

О сверхпроводимости s -типа в тяжелофермионных соединениях

В. В. Вальков^{*○+1}), Д. М. Дзедзисашвили^{*+}

^{*} Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отд. РАН, 660036 Красноярск, Россия

[○] Красноярский государственный университет, 660075 Красноярск, Россия

⁺ Красноярский государственный технический университет, 660074 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 5 мая 2006 г.

После переработки 18 июля 2006 г.

Для периодической модели Андерсона в пределе сильных корреляций ($U = \infty$) в куперовском канале вычислена амплитуда рассеяния f -электронов. Из условия существования полюса этой амплитуды получено уравнение, определяющее критическую температуру перехода (T_c) в сверхпроводящую фазу с s -симметрией параметра порядка. На основе самосогласованного решения системы уравнений рассчитана зависимость T_c от концентрации электронов и параметра гибридизации. Оказалось, что область реализации сверхпроводящей фазы примыкает к области существования ненасыщенного ферромагнитного состояния и не пересекается с ней. Полученные результаты могут быть использованы для описания перехода в сверхпроводящую фазу с s -симметрией параметра порядка в тяжелофермионном скуттерудите $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$. При этом для получения значений T_c , близких к экспериментальным, существенным оказался учет процессов рассеяния фермионов на спиновых флуктуациях.

PACS: 71.27.+a, 74.70.Tx

Известно, что соединения с тяжелыми фермионами (ТФ) обладают сверхпроводящими свойствами, отличными от свойств, предсказываемых теорией БКШ. Так в CeCu_2Si_2 , UPt_3 , URu_2Si_2 реализуется сверхпроводимость с анизотропным параметром порядка. Для объяснения этих особенностей были выдвинуты предположения о важности вклада спин-флуктуационного механизма куперовской неустойчивости. В то же время, недавние экспериментальные исследования тяжелофермионного скуттерудита $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$ [1], являющегося сверхпроводником при $T < T_c = 4.1 \text{ K}$, привели к выводу о предпочтительности s -типа симметрии параметра порядка. Такие данные продолжают стимулировать развитие работ, связанных с анализом электрон-фононного механизма куперовского спаривания, приводящего к сверхпроводимости s -типа (см., например, [2]). Вместе с тем представляется актуальным рассмотрение механизма куперовской неустойчивости непосредственно в модели Андерсона, который, с одной стороны, учитывал бы спин-флуктуационное рассеяние, а с другой – приводил к сверхпроводимости s -типа. Решению этой задачи посвящена данная работа.

Соединения с ТФ принято описывать в рамках периодической модели Андерсона (ПМА). При этом часто используется метод вспомогательных бозонов, при котором операторы Хаббарда представляются в ви-

де произведения фермиевского оператора и оператора безспинового бозона. Достоинством такого представления является возможность применения фейнмановской техники при вычислениях функций Грина, а его недостатком – необходимость введения констрейна. Необходимость отсечения вкладов от нефизических состояний является источником практических трудностей при развитии теории в рамках отмеченного подхода.

В данной работе анализ куперовской неустойчивости проводится для ПМА в режиме сильных электронных корреляций (СЭК) непосредственно в атомном представлении. Для вычисления амплитуды рассеяния применяется диаграммная техника для операторов Хаббарда [3, 4]. Полученное в работе точное представление для мацубаровской функции Грина (ФГ) f -электронов позволило, с одной стороны, вскрыть смысл ренормировочных констант, возникающих при использовании слэив-бозонного представления, а с другой стороны, продемонстрировать его ограниченность.

Гамильтониан периодической модели Андерсона в пределе СЭК может быть записан в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{f\sigma} (E_0 - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}f\sigma} (V_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_f} c_{\mathbf{k}\sigma}^+ X_f^{0\sigma} + \text{h.c.}), \quad (1)$$

¹) e-mail: vvv@iph.krasn.ru

где первое слагаемое описывает подсистему коллективизированных электронов с законом дисперсии $\epsilon_{\mathbf{k}}$; $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$) – оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии с квазиимпульсом \mathbf{k} и проекцией спинового момента σ ; второе слагаемое в (1) отражает наличие подсистемы локализованных электронов с энергией E_0 и химическим потенциалом μ ; последний член гамильтониана (1) учитывает гибридизацию локализованных и коллективизированных состояний с параметром гибридизационного взаимодействия $V_{\mathbf{k}}$. Операторы Хаббарда $X^{mn} = |m\rangle\langle n|$ строятся на базе трех одноузельных состояний: $\{|m\rangle\}$: $|0\rangle$ – состояние без электронов, $|\sigma\rangle$ – два состояния, различающиеся проекцией спинового момента $\sigma = \pm 1/2$. В пределе бесконечно большого кулоновского отталкивания состояния с двумя электронами на одном узле $|2\rangle$ запрещены.

Для изучения куперовской неустойчивости в ПМА введем мацубаровские функции Грина для коллективизированных и локализованных электронов:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') &= -\langle T_{\tau} \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}^+(\tau') \rangle, \\ D_{\alpha\beta}(f\tau; g\tau') &= -\langle T_{\tau} \tilde{X}_{f}^{\alpha}(\tau) \tilde{X}_{g}^{-\beta}(\tau') \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

При записи этих выражений использовались стандартные обозначения [3–5].

Из рассмотрения диаграммного ряда для функции Грина f -электронов следует, что в каждом порядке теории возмущений, после спаривания всех c -операторов, возникает диаграммное представление, формально аналогичное представлению для модели Хаббарда, если ввести зависящий от мацубаровской частоты эффективный фурье-образ интеграла перескока:

$$\tilde{t}_{\mathbf{k}}(\omega_n) = |V_{\mathbf{k}}|^2 G_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega_n) = |V_{\mathbf{k}}|^2 (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}})^{-1}, \quad (3)$$

где $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Возможность такой точной перегруппировки обусловлена линейностью оператора гибридизационного взаимодействия по фермиевским операторам $c_{\mathbf{k}\sigma}$ и $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$.

Качественно аналогичное сведение диаграммного ряда для электронной функции Грина имеет место в случае электрон-фононного взаимодействия [5]. При этом возникает диаграммный ряд, соответствующий появлению эффективного, зависящего от частоты, межфермионного взаимодействия. Отличие нашего случая заключается в том, что возможность введения эффективного взаимодействия обусловлена линейностью оператора взаимодействия относительно ферми-операторов, а не бозе-операторов, как это имело место для электрон-фононного взаимодействия.

Расширение отмеченной аналогии приводит к выводу о возникновении в подсистеме f -электронов эффективного взаимодействия (через дополнительную

фермиевскую подсистему), точно так же, как возникает косвенное взаимодействие через фононную подсистему. При этом можно ожидать, что при определенных обстоятельствах, это эффективное взаимодействие может служить источником куперовской неустойчивости. Для исследования этого вопроса рассмотрим в парафазе процесс столкновения f -электронов с противоположными проекциями спиновых моментов.

Решение задачи о куперовской неустойчивости сводится к определению условий, при которых в амплитуде рассеяния f -электронов с противоположными проекциями спиновых моментов появляется полюс. В графической форме уравнение для этой амплитуды может быть представлено в виде

$$\Gamma(k; -k|k; -k) = \Gamma(k+q; -k-q|k; -k) + \Gamma(k+q; -k-q|k; -k) + \Gamma(k+q; -k-q|k; -k) \Gamma(k; -k|k; -k) \Gamma(k+q; -k-q|k; -k), \quad (4)$$

где темным квадратам соответствует искомая амплитуда $\Gamma(k; -k|k; -k)$ (в правой части уравнения $\Gamma(k+q; -k-q|k; -k)$); k и q обозначают четырехмерные векторы $k = (\mathbf{k}, i\omega_n)$, $q = (\mathbf{q}, i\omega_m)$, причем $\omega_n = (2n+1)\pi T$, а $\omega_m = 2m\pi T$, $n, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Затравочная амплитуда $\Gamma^{(0)}(k; -k|k+q; -k-q)$ (при $q = 0$ первое слагаемое уравнения (4)) изображена посредством светлого квадрата. Линия со светлой (темной) стрелкой обозначает функцию Грина f электрона $G(k)$ с проекцией спинового момента $\sigma = +1/2$ ($\sigma = -1/2$). В графической форме уравнение для функции $G(k)$ при учете отмеченной выше перестройки диаграммного ряда имеет вид

$$\begin{aligned} \text{Double line} &= \text{Double line} + \text{Double line} \circlearrowleft \Sigma \\ \text{Double line} &= \text{Double line} + \text{Double line} \text{---} P \end{aligned} \quad (5)$$

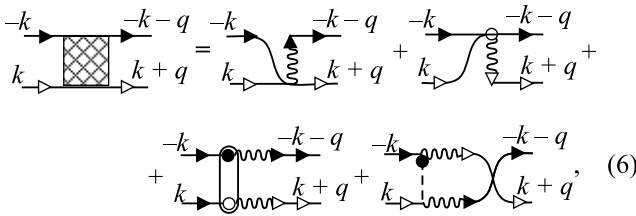
где двойной сплошной линии соответствует коллективная функция Грина $G^{(0)}(k)$, а тонкой сплошной линией без стрелок – затравочный пропагатор $G_0(\omega_n) = (i\omega_n - E_0 + \mu)^{-1}$. Светлому кружку с вписанным в него символом Σ ставится в соответствие массовый оператор $\Sigma(k)$, а полукругу – силовой оператор $P(k)$. Волнистая линия обозначает эффективное взаимодействие $\tilde{t}_{\mathbf{k}}(\omega_n)$, определенное в (3).

Решая систему уравнений (5), получаем точное представление для функции $G(k)$:

$$G(k) = \frac{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}}{(i\omega_n - E_0 + \mu - \Sigma(k))(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}) - P(k)|V_{\mathbf{k}}|^2},$$

содержащее, кроме массового оператора, силовой оператор $P(k)$. Этот оператор влияет как на спектральные характеристики, так и на ренормировку гибридационной константы. Из полученного представления для $G(k)$ следует, что слэив-бозонное приближение возникает в том случае, если пренебречь зависимостью ренормировочного множителя от частоты, а также его мнимой составляющей. Поскольку, как показывает анализ, последние факторы оказываются существенными, то использование простейших приближений при слэив-бозонном подходе существенно искажает реальную физику.

Принимая во внимание процессы рассеяния на спиновых флуктуациях, получим, что затравочная амплитуда определяется графиками



и аналитически может быть записана в следующем виде:

$$\Gamma^{(0)}(k; -k|k+q; -k-q) = \frac{|V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|^2}{(\omega_n + \omega_m)^2 + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^2} \times \{2\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + |V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|^2 [\bar{\chi}\delta(\omega_m) + 2\chi\delta(2\omega_n + \omega_m)]\}. \quad (7)$$

В этих формулах χ – магнитная восприимчивость системы, $\bar{\chi} = \chi - C_n/4T$, $C_n = \langle \Delta \hat{n}_f \Delta \hat{n}_f \rangle$ – коррелятор плотность-плотность. Появление χ и C_n обусловлено учетом процессов релаксации на спиновых и зарядовых флуктуациях [6].

Учитывая выражение (7) для затравочной амплитуды, нетрудно убедиться в том, что полная амплитуда рассеяния $\Gamma(k+q; -k-q|k; -k)$ не зависит от значения квазиимпульса \mathbf{q} , но зависит от ω_m . Это свойство позволяет свести нахождение искомой амплитуды $\Gamma_{\omega}(\mathbf{k}) \equiv \Gamma(k; -k|k; -k)$ к решению системы уравнений

$$\begin{aligned} [1 - T\bar{\chi}\Phi_2(\omega)]\Gamma_{\omega}(\mathbf{k}) - 2T\chi\Phi_2(\omega)\bar{\Gamma}_{\omega}(\mathbf{k}) - \\ - T\sum_{\omega} \Phi_1(\omega)\Gamma_{\omega}(\mathbf{k}) = \Gamma_{\omega}^{(0)}(\mathbf{k}), \\ [1 - T\bar{\chi}\Phi_2(\omega)]\bar{\Gamma}_{\omega}(\mathbf{k}) - 2T\chi\Phi_2(\omega)\Gamma_{\omega}(\mathbf{k}) - \\ - T\sum_{\omega} \Phi_1(\omega)\Gamma_{\omega}(\mathbf{k}) = \bar{\Gamma}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\bar{\Gamma}_{\omega}(\mathbf{k}) = \Gamma(\bar{k}; -\bar{k}|k; -k), \quad \bar{k} = (\mathbf{k}, -i\omega_n),$$

$$\Gamma_{\omega}^{(0)}(\mathbf{k}) = \Gamma^{(0)}(k; -k|k; -k),$$

$$\bar{\Gamma}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{k}) = \Gamma^{(0)}(\bar{k}; -\bar{k}|k; -k),$$

$$\Phi_1(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} 2\xi_{\mathbf{q}}l(q), \quad \Phi_2(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{q}}|^2 l(q),$$

$$l(q) = \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2}{|(i\omega - \xi_{\mathbf{q}})(i\omega - E_0 - \Sigma + \mu) - P(\omega)|V_{\mathbf{q}}|^2|^2}. \quad (9)$$

Вычислив из системы (8) амплитуду рассеяния $\Gamma_{\omega}(\mathbf{k})$ и определив ее полюс, находим уравнение для температуры перехода в сверхпроводящую фазу с s -типом симметрии параметра порядка ($\alpha = 3\chi T - C_n/4$):

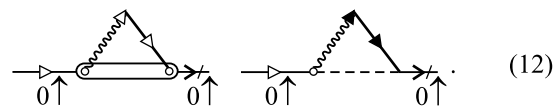
$$1 + T \sum_{\omega} \Phi_1(\omega) / [1 + \alpha \Phi_2(\omega)] = 0. \quad (10)$$

Аналитическое суммирование по мацубаровским частотам в этом уравнении можно провести только при $\alpha = 0$. При конечных α суммирование осуществлялось численно. Поскольку α зависит от магнитной восприимчивости, то через эту величину в теории учитываются процессы рассеяния на спиновых степенях свободы рассматриваемой системы. Такой механизм учета релаксационных процессов был рассмотрен в работе [6] при описании высокотемпературных сверхпроводников.

При проведении численных расчетов осуществлялось самосогласованное нахождение $G(k)$. В однопетлевом приближении имеется один график для массового оператора $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}$:



и два графика для поправки к силовому оператору $\delta P_{0\sigma,0\sigma}$:



Используя правила диаграммной техники, находим аналитические выражения для $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}$:

$$\Sigma_{0\sigma,0\sigma} = -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_m} |V_{\mathbf{q}}|^2 G_{\mathbf{q}}^{(0)}(\omega_m) G(\mathbf{q}, \omega_m), \quad (13)$$

и для $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_n)$:

$$\delta P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_n) = \beta \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{q}}|^2 G_{\mathbf{q}}^{(0)}(\omega_n) G(\mathbf{q}, \omega_n), \quad (14)$$

где $\beta = 3\chi T + C_n/4$. Заметим, что силовой оператор является зависящей от мацубаровской частоты функцией, тогда как массовый оператор представляет собой неопределенную константу, приводящую к сдвигу локализованного уровня. Эти особенности использовались при записи выражения для $l(q)$ (9).

С учетом выражений (13) и (14) была записана бесконечная система уравнений самосогласования для нахождения химического потенциала, массового оператора, числа локализованных электронов, а также поправки силового оператора $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_n)$. Численное решение полученной системы позволило рассчитать зависимость температуры перехода в сверхпроводящую фазу с s -типом симметрии параметра порядка. Результаты расчетов T_c представлены на двух рисунках, демонстрирующих концентрационную зависимость критической температуры при различных значениях гибридизационного параметра.

При вычислениях принималось, что затравочная электронная зона характеризуется полуэллиптической плотностью состояний: $g(\varepsilon) = (8/\pi W^2) \sqrt{(W/2)^2 - \varepsilon^2}$. Все энергетические параметры системы измерялись в единицах ширины затравочной зоны W . Положение локализованного уровня соответствовало середине зоны. Значение магнитной восприимчивости при вычислениях принималось равным восприимчивости соединений с тяжелыми фермионами, то есть более чем на два порядка превосходила характерные значения восприимчивости Паули для обычных металлов. Из представленных на рис.1 зависимостей видно, что при учете спин-флуктуационных процессов рассеяния изменение параметра гибридизации в пределах от 0.05 до 0.2 не приводит к существенному увеличению критической температуры.

Иная ситуация имеет место, если релаксационные процессы не учитываются. Расчеты показывают, что критическая температура в этом случае значительно возрастает в отмеченной области изменения параметра V . Соответствующее поведение продемонстрировано на рис.2.

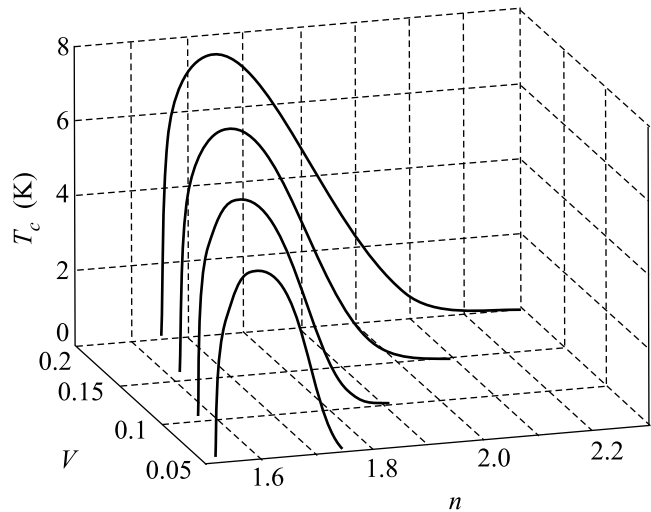


Рис.1. Температура сверхпроводящего перехода ПМА при учете спин-флуктуационных процессов рассеяния

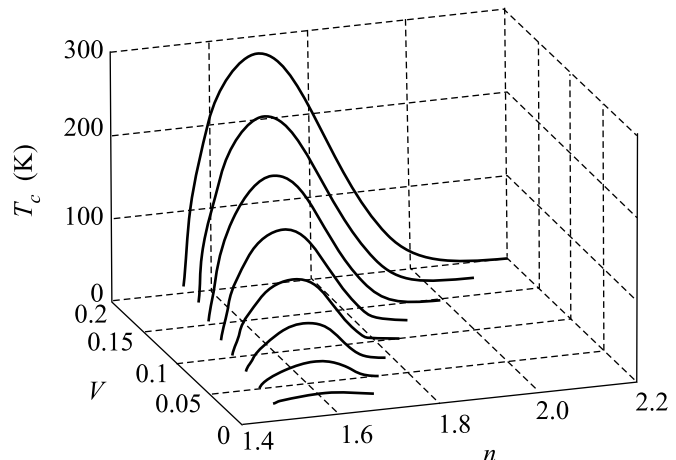


Рис.2. Температура сверхпроводящего перехода ПМА без учета процессов рассеяния

Представленные результаты о куперовской неустойчивости приводят к вопросу о взаимном расположении на фазовой диаграмме системы областей существования различных фаз. Условия реализации дальнего магнитного порядка в однопримесной модели были выяснены Андерсоном. Для периодической модели Андерсона область существования ферромагнитного упорядочения, установленная в недавней работе Изюмова с сотрудниками [7], показана на рис.3. Посредством FM обозначена область реализации ферромагнитной фазы, аббревиатура SF используется для обозначения насыщенного ферромагнитного состояния, а P – для парамагнитной фазы. Небольшие количественные отличия в форме границ SF- и FM-областей связаны только с тем, что отношение энергетических параметров V и E_0 к ширине зоны в нашем случае было выбрано в четыре раза меньшим,

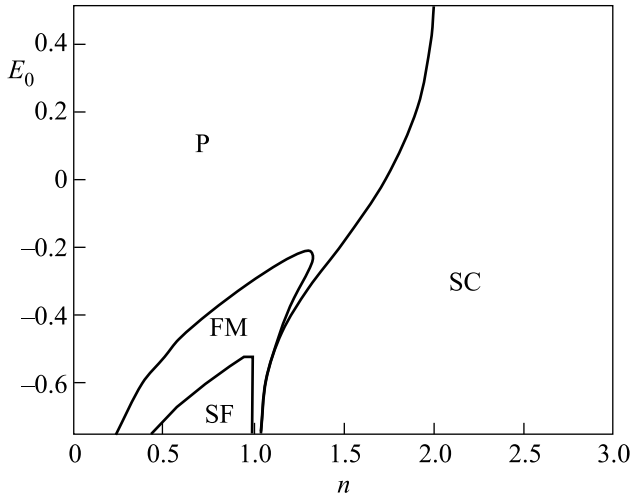


Рис.3. Фазовая диаграмма периодической модели Андерсона, $V = 0.125$

чем в работе [7]. Для вычисления границы области сверхпроводящей (SC) фазы воспользуемся уравнением (10). В низкотемпературном пределе можно пренебречь вкладами от процессов рассеяния на спиновых флуктуациях. Тогда суммирование по мацубаровским частотам можно провести в явном виде. В результате получаем

$$1 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{|V_q|^2 \xi_q \left\{ \frac{\text{th}(\tilde{E}_q^+ / 2T_c)}{\tilde{E}_q^+} - \frac{\text{th}(\tilde{E}_q^- / 2T_c)}{\tilde{E}_q^-} \right\}}{(\tilde{E}_q^+)^2 - (\tilde{E}_q^-)^2}, \quad (15)$$

где $\tilde{E}_q^\pm = (\epsilon_q + E_0 + \Sigma) / 2 \pm \nu_q / 2 - \mu$, $\nu_q = \{(\epsilon_q - E_0 - \Sigma)^2 + 4(1 - n_d / 2) |V_q|^2\}^{1/2}$, n_d – число локализованных электронов в расчете на один узел. Оказалось, что граница области SC-фазы, полученная из анализа этого уравнения, примыкает к границе FM-фазы и не пересекается с ней (рис.3). Факт непересечения является важным в контексте конкуренции магнитных и сверхпроводящих фаз и укладывается в общую концепцию об антогонизме сверхпроводимости и магнетизма.

Заметим, что сверхпроводящая фаза реализуется только при заполнении верхней гибридной зоны. Этот результат нетрудно увидеть из уравнения (15). Действительно, если химический потенциал лежит в нижней зоне, то главный вклад в интеграл вносит область, где $\tilde{E}_q^- = 0$. При этом значение интеграла отрицательно и уравнение (15) не имеет решения. Если же μ находится в верхней зоне, главное положительное значение интеграла набирается в окрестности $\tilde{E}_q^+ = 0$. При этом решение, как показывают численные расчеты, имеется всегда.

Из представленных в работе результатов следует, что исследование ПМА методом диаграммной техники для операторов Хаббарда может быть сведено к изучению свойств модели Хаббарда для сильно коррелированных f -электронов с эффективным взаимодействием $\tilde{t}_k(\omega_n)$, зависящим от мацубаровской частоты. Аналогичный вывод был сделан ранее в работе [7] при рассмотрении методом производящего функционала нормальной фазы ПМА. С учетом этих фактов нетрудно понять, что рассмотренный в работе механизм куперовской неустойчивости в ПМА фактически аналогичен кинематическому механизму, приводящему к s -спариванию в модели Хаббарда в режиме СЭК [8].

В заключение отметим, что при описании сверхпроводящей фазы тяжелофермионных соединений в ПМА существенное значение имеют процессы спин-флуктуационного рассеяния. Выше мы ограничились рассмотрением влияния этих процессов только на сверхпроводимость с s -типом симметрии параметра порядка, поскольку, по данным работы [1], в тяжелофермионном скуттерудите $\text{CeFe}_4\text{P}_{12}$ реализуется именно такой параметр порядка сверхпроводящей фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 06-02-16100), программы ОФН РАН, Интеграционного проекта СО РАН, а также гранта СО РАН “Лаврентьевский конкурс молодежных проектов”.

1. Y. Nakai, K. Ishida, D. Kikuchi et al., JPSJ **74**, 3370 (2005).
2. V. Barzykin and L. P. Gor'kov, Phys. Rev. B **71**, 214521 (2005).
3. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
4. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, М.: Физматлит, 1994.
5. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, М.: Физматгиз, 1962.
6. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **125**, 891 (2004).
7. Ю. А. Изюмов, Н. И. Чашин, Д. С. Алексеев, *Теория сильнокоррелированных систем. Метод производящего функционала*, М.-Ижевск: “Регулярная и хаотическая динамика”, 2006.
8. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, М.: Едиториал УРСС, 2004.