В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили

Институт физики СО РАН Академгородок, 50, Красноярск, 660036, Россия Красноярский государственный университет пр. Свободный, 79, Красноярск, 660041, Россия

Красноярский государственный технический университет ул. Киренского, 26, Красноярск, 660074, Россия E-mail: ddm@iph.krasn.ru

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ *S*-ТИПА В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ ^{*}

Для периодической модели Андерсона в режиме сильных электронных корреляций, методом диаграммной техники получены точные представления для нормальных и аномальных функций Грина локализованных (f-) и коллективизированных (c-) электронов через нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов f-электронных функций Грина. Роль аномальных компонент силового оператора в теории сверхпроводимости тяжелых фермионов рассмотрена впервые. Показано, что диаграммный ряд для функций Грина f-электронов периодической модели Андерсона в сверхпроводящей фазе эквивалентен диаграммному ряду для функций Грина модели Хаббарда при $U = \infty$, где U – кулоновское взаимодействие двух электронов на одном узле. В однопетлевом приближении для массового и силового операторов найдены уравнения самосогласования, определяющие сверхпроводящий параметр порядка s-типа и критическую температуру T_c . Показано, что учет аномальной компоненты силового оператора существенно изменяет концентрационную зависимость $T_c(n)$.

Введение

Сверхпроводящее состояние тяжелофермионных (ТФ) соединений обладает необычными свойствами, которые с трудом поддаются описанию в рамках стандартной теории БКШ. Принято считать, что в таких «классических» ТФ сверхпроводниках, как, например, СеСи₂Si₂, UBe₁₃, UPt₃ реализуется сверхпроводимость с анизотропным параметром порядка предположительно *d*-симметрии [1]. Близость областей сверхпроводящей и антиферромагнитной фаз послужила поводом для введения предположения о принципиальной роли спиновых флуктуаций в механизме куперовской неустойчивости.

В последнее время появилось несколько новых классов ТФ-сверхпроводников. Среди них отметим ТФ LaFe₄P₁₂ [2], являющийся сверхпроводником при $T < T_c = 4,1$ К и относящийся к соединениям со структурой типа скуттерудита [3]. Отличительная особенность ТФ скуттерудита LaFe₄P₁₂ заключается в том, что по экспериментальным данным в нем реализуется сверхпроводящая фаза с необычным для этих веществ *s*-типом симметрии параметра порядка. Такие данные стимулируют развитие работ, связанных с анализом электрон-фононного механизма куперовского спаривания, приводящего к сверхпроводимости *s*-типа [4].

В нашей работе отмеченная особенность сверхпроводящей фазы в LaFe₄P₁₂ будет анализироваться с позиций механизма куперовского спаривания, присущего сильно коррелированным системам. Речь идет о кинематическом механизме, впервые описанном в работе [5]. Поскольку скуттерудит LaFe₄P₁₂ относится, как и все ТФ соединения, к классу сильно коррелированных систем, то естественно ожидать, что кинематический механизм куперовского спаривания очевидным образом может приводить к сверхпроводящей фазе s-типа. При построении теории сверхпроводящей фазы в LaFe₄P₁₂ в рамках периодической модели Андерсона будем учитывать процессы рассеяния на спиновых флуктуациях так, как это сделано впервые в работе [6] при рассмотрении высокотемпе-

^{*} Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 06-02-16100), программы ОФН РАН, Интеграционного проекта СО РАН, а также гранта СО РАН «Лаврентьевский конкурс молодежных проектов».

ратурных сверхпроводников на основе модели Хаббарда. Из результатов работы будет видно, что учет этих процессов имеет существенное значение для получения значений критических температур, сопоставимых с экспериментально наблюдаемыми.

Соединения с тяжелыми фермионами принято описывать в рамках периодической модели Андерсона. Наиболее популярным методом теоретического исследования проблемы тяжелых фермионов и, в частности, сверхпроводящей фазы, реализуемой в этих материалах, является метод вспомогательных бозонов. В частности он был использован в работе [7] при исследовании конкуренции антиферромагнитной и сверхпроводящей фаз. Достоинством этого метода является возможность применения фейнмановской техники при вычисления функций Грина, а его недостатком – необходимость введения констрейна для отсечения вкладов от нефизических состояний. Последнее обстоятельство является источником практических трудностей при развитии теории в рамках такого подхода. Для освобождения от указанных проблем в данной работе будет использован метод диаграммной техники для операторов Хаббарда [8].

Точные представления для функций Грина периодической модели Андерсона

Гамильтониан периодической модели Андерсона в представлении операторов Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций ($U = \infty$) имеет вид: $H = H_0 + H_{int}$, где

$$\begin{split} H_{0} &= \sum_{k\sigma} \xi_{k} c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} + \sum_{f\sigma} \tilde{E} X_{f}^{\sigma\sigma}, \\ H_{\text{int}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kf\sigma} \left(V_{k} e^{-ikf} c_{k\sigma}^{+} X_{f}^{0\sigma} + H.C. \right). \end{split}$$
(1)

Здесь первое слагаемое в H_0 описывает подсистему с-электронов с законом дисперсии: ε_k , ($\xi_k = \varepsilon_k - \mu$), $c_{k\sigma}^+$ ($c_{k\sigma}$) – оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии с квазиимпульсом k и проекцией спинового момента σ . Второе слагаемое в H_0 описывает подсистему локализованных f-электронов с отсчитанной от химпотенциала μ энергией: $\tilde{E}_{\sigma} = E_0 - \mu$. Операторы Хаббарда строятся на базисе трех одноузельных состояний: пустого состояния $|0_f\rangle$ и двух состояний $|\sigma_f\rangle$, описывающих один электрон на узле f с проекцией спина $\sigma = \mp 1/2$. Состояния с двумя электронами на одном узле, в силу условия $U = \infty$, исключены. Таким образом, диагональные операторы Хаббарда в (1) имеют вид $X_f^{\sigma\sigma} = |\sigma_f\rangle\langle\sigma_f|$. Гамильтониан взаимодействия H_{int} описывает гибридизацию f- и ссостояний с интенсивностью, определяемой параметром гибридизации V_k . Оператор $X_f^{0\sigma}$ уничтожает электрон на узле f со спином σ (если таковой имеется, иначе результат действия $X_f^{0\sigma}$ дает ноль), а оператор $c_{k\sigma}^+$ рождает электрон в зоне проводимости.

Изучение термодинамических свойств данной модели проведем на основе формализма диаграммной техники для мацубаровских функций Грина. При рассмотрении сверхпроводящей фазы удобно ввести две нормальные:

$$G_{k\sigma}(\tau - \tau') = - \left\langle T_{\tau} \tilde{c}_{k\sigma}(\tau) \tilde{c}_{k\sigma}^{+}(\tau') \right\rangle, \bar{G}_{-k\overline{\sigma}}(\tau - \tau') = - \left\langle T_{\tau} \tilde{c}_{-k\overline{\sigma}}^{+}(\tau) \tilde{c}_{-k\overline{\sigma}}(\tau') \right\rangle$$
(2)

и две аномальные

$$\begin{aligned}
F_{k\sigma}(\tau - \tau') &= -\langle T_{\tau} \tilde{c}_{k\sigma}(\tau) \tilde{c}_{-k\overline{\sigma}}(\tau') \rangle, \\
\overline{F}_{k\sigma}(\tau - \tau') &= -\langle T_{\tau} \tilde{c}_{-k\overline{\sigma}}^{+}(\tau) \tilde{c}_{k\sigma}^{+}(\tau') \rangle
\end{aligned} \tag{3}$$

функции Грина для с-электронов ($\overline{\sigma} = -\sigma$). В этих уравнениях угловые скобки обозначают термодинамическое усреднение с гамильтонианом (1). Все операторы взяты в представлении Гейзенберга, а Т_т -оператор упорядочения – по мацубаровскому времени т. Поскольку гамильтониан (1) содержит как обычные операторы вторичного квантования, так и операторы Хаббарда, то при построении диаграммных рядов теории возмущений для функций Грина (2-3) будем использовать два варианта диаграммной техники: обычную фейнмановскую диаграммную технику [9] и диаграммную технику для операторов Хаббарда [8]. Последняя имеет особенности, связанные с нетривиальным характером перестановочных соотношений для операторов Хаббарда. Эти особенности проявляются, в частности, в возникновении нового структурного элемента – силового оператора. Анализ диаграммных рядов для четырех функций Грина с-электронов (2–3) показывает, что каждая из них может быть выражена через одну из четырех функций Грина локализованных электронов, определенных на операторах Хаббарда:

$$D_{\bar{\alpha}\bar{\beta}}(f\tau;g\tau') = -\left\langle T_{\tau}\tilde{X}_{f}^{\bar{\alpha}}(\tau)\tilde{X}_{g}^{-\bar{\beta}}(\tau')\right\rangle, \quad (4)$$

где корневые вектора $\vec{\alpha}, \vec{\beta} = \{(0, \sigma), (\overline{\sigma}, 0)\}$. В частотно-импульсном представлении отмеченная связь в матричной формулировке (для краткости изложения) записывается в виде

$$\hat{G}_{k\sigma}(\omega_n) = \hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(\omega_n) + \\ + \hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(\omega_n)\hat{V}_k\hat{D}_{\sigma}(k,\omega_n)\hat{V}_k^+\hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(\omega_n),$$
(5)

где

$$\begin{split} \hat{V}_{k} &= diag(V_{k}, -V_{-k}^{*}), \\ \hat{G}_{k\sigma}(\omega_{n}) &= \begin{pmatrix} G_{k\sigma}(\omega_{n}) & F_{k\sigma}(\omega_{n}) \\ \overline{F}_{k\sigma}(\omega_{n}) & \overline{G}_{-k\overline{\sigma}}(\omega_{n}) \end{pmatrix}, \\ \hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(\omega_{n}) &= \begin{pmatrix} (i\omega_{n} - \xi_{k\sigma})^{-1} & 0 \\ 0 & (i\omega_{n} + \xi_{-k\overline{\sigma}})^{-1} \end{pmatrix}, \\ \hat{D}_{\sigma}(k, \omega_{n}) &= \begin{pmatrix} D_{0\sigma,0\sigma}(k, \omega_{n}) & D_{0\sigma,\overline{\sigma}0}(k, \omega_{n}) \\ D_{\overline{\sigma}0,0\sigma}(k, \omega_{n}) & D_{\overline{\sigma}0,\overline{\sigma}0}(k, \omega_{n}) \end{pmatrix}. \end{split}$$

Нетрудно убедиться, что диаграммное разложение функций Грина f-электронов сводится к виду, формально аналогичному разложению, получающемуся для модели Хаббарда с $U = \infty$. Отличие заключается в том, что в данном случае вместо обычного Фурье-образа интеграла перескока t_k в теорию будет входить эффективный матричный оператор перескока, зависящий от мацубаровской частоты:

$$\hat{t}(k,\omega_n) = \hat{V}_k \hat{G}_k^{(0)}(\omega_n) \hat{V}_k^+.$$

С учетом сказанного графические уравнения для вычисления функции Грина $\hat{D}_{\sigma}(k,\omega_n) = \hat{G}_{\sigma}(k,\omega_n)\hat{P}_{\sigma}(k,\omega_n)$ можно представить в виде

$$= = + = \sum_{p \to \infty}$$

Здесь жирной линии соответствует матричная функция Грина $\hat{D}_{\sigma}(k,\omega_n)$. Кружку с символом Σ и полукругу с символом P отвечают матричные массовый $\hat{\Sigma}_{\sigma}(k,\omega_n)$ и силовой $\hat{P}_{\sigma}(k,\omega_n)$ операторы соответствен-

но. Двойная линия обозначает коллективную функцию Грина $\hat{G}_{\sigma}^{(0)}(k,\omega_n)$. Матричные элементы для отмеченных четырех матриц определены точно так же, как и для матрицы $\hat{D}_{\sigma}(k,\omega_n)$ (5). Наконец, тонкая линия соответствует матрице затравочных пропагаторов:

$$\hat{g}_{\sigma}(\omega_n) = diag\left((i\omega_n - \tilde{E}_{\sigma})^{-1}, (i\omega_n + \tilde{E}_{\overline{\sigma}})^{-1}\right).$$
 (7)
В аналитической записи система уравнений

(6) имеет вид

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(k,\omega_{n}) &= \\ &= \hat{G}_{\sigma}^{(0)}(k,\omega_{n}) + \hat{G}_{\sigma}^{(0)}(k,\omega_{n})\hat{\Sigma}_{\sigma}(k,\omega_{n})\hat{G}_{\sigma}(k,\omega_{n}), \\ \hat{G}_{\sigma}^{(0)}(k,\omega_{n}) &= \\ &= \hat{g}_{\sigma}(\omega_{n}) + \hat{g}_{\sigma}(\omega_{n})\hat{P}_{\sigma}(k,\omega_{n})\hat{t}_{\sigma}(k,\omega_{n})\hat{G}_{\sigma}^{(0)}(k,\omega_{n}). \end{aligned}$$

Откуда для $\hat{G}_{\sigma}(k,\omega_n)$ находим

$$\hat{G}_{\sigma}(k,\omega_n) = \\ = \left\{ \hat{g}_{\sigma}^{-1}(\omega_n) - \hat{P}_{\sigma}(k,\omega_n) \hat{t}_{\sigma}(k,\omega_n) - \hat{\Sigma}_{\sigma}(k,\omega_n) \right\}^{-1}.$$

После вычисления обратной матрицы, для компонент функций Грина $\hat{G}_{\sigma}(k,\omega_n)$ получаем выражения

$$\begin{split} G_{0\sigma,0\sigma}(k,\omega_n) &= \left(i\omega_n + \tilde{E}_{\overline{\sigma}} - \Sigma_{\overline{\sigma}0,\overline{\sigma}0}(k,\omega_n) - \right.\\ \left. -P_{\overline{\sigma}0,\overline{\sigma}0}(k,\omega_n) \left| V_{-k} \right|^2 \, \overline{G}_{-k\overline{\sigma}}^{(0)}(\omega_n) \right) \right/ \det(k,\omega_n), \\ G_{0\sigma,\overline{\sigma}0}(k,\omega_n) &= \left(\Sigma_{0\sigma,\overline{\sigma}0}(k,\omega_n) + \right.\\ \left. + \left. P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}(k,\omega_n) \right| V_{-k} \right|^2 \, \overline{G}_{-k\overline{\sigma}}^{(0)}(\omega_n) \right) \right/ \det(k,\omega_n), \end{split}$$

где детерминант

$$\begin{aligned} \det(k, \omega_n) &= \\ &= \left\{ i\omega_n - \tilde{E}_{\sigma} - P_{0\sigma,0\sigma} |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(\omega_n) - \Sigma_{0\sigma,0\sigma} \right\} \times \\ &\times \left\{ i\omega_n + \tilde{E}_{\overline{\sigma}} - P_{\overline{\sigma}0,\overline{\sigma}0} |V_{-k}|^2 \overline{G}_{-k\overline{\sigma}}^{(0)}(\omega_n) - \Sigma_{\overline{\sigma}0,\overline{\sigma}0} \right\} - \\ &- \left\{ P_{0\sigma,\overline{\sigma}0} |V_{-k}|^2 \overline{G}_{-k\overline{\sigma}}^{(0)}(\omega_n) + \Sigma_{0\sigma,\overline{\sigma}0} \right\} \times \\ &\times \left\{ P_{\overline{\sigma}0,0\sigma} |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(\omega_n) + \Sigma_{\overline{\sigma}0,0\sigma} \right\} . \end{aligned}$$

Эти уравнения дают точное представление нормальных и аномальных функций Грина локализованных f-электронов периодической модели Андерсона в сверхпроводящей фазе через нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов. Совместно с уравнением (5) эти уравнения определяют также и точное представление для нормальных и аномальных функций Грина коллективизированных с-электронов. Отметим, что в частном случае нормальной фазы подобные представления для функций Грина были получены ранее в работе [10] методом производящего функционала. Дальнейшее решение задачи связано с аппроксимациями массового и силового операторов.

Однопетлевое приближение для массового и силового операторов в сверхпроводящей фазе

В основе вычисления массового и силового операторов лежит метод диаграммной техники для операторов Хаббарда. Графики, определяющие вклады в нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов в однопетлевом приближении, приведены в табл. 1.

Таблица 1

Однопетлевые диаграммы для массового и силового операторов



При написании этих диаграмм мы использовали принцип топологической непрерывности [11], дополненный принципом старшинства фермиподобных операторов Хаббарда над бозеподобными. Кроме того, для обозначения вкладов в нормальную компоненту силового оператора мы использовали символ δ , поскольку (в отличие от остальных компонент) вклад для нее в нольпетлевом приближении отличен от нуля и равен $1-N_{\overline{\sigma}},$ где N_{σ} – числа заполнения f-уровня электронами с проекцией спинового момента σ . Таким образом, $\delta P_{0\sigma,0\sigma}$ является поправкой к нольпетлевому приближению: $P_{0\sigma,0\sigma} = 1 - N_{\overline{\sigma}} + \delta P_{0\sigma,0\sigma}$. В табл. 2 приведены по отдельности графические элементы диаграмм и сопоставляемые им функции. Овалам соответствуют Фурье-образы неприводимых корреляторов:

$$K_{f-g}^{\sigma\sigma,\sigma'\sigma'} = \left\langle \Delta(X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma}) \Delta(X_g^{00} + X_g^{\sigma'\sigma'}) \right\rangle, \quad (10)$$

где символ Δ обозначает флуктуацию оператора $\Delta X = X - \langle X \rangle$. Используя правила диаграммной техники, по табл. 1 и 2 нетрудно написать аналитические выражения, соответствующие нормальными и аномальным компонентам массового и силового операторов

$$\begin{split} \Sigma_{0\sigma,0\sigma} &= -\frac{T}{N} \sum_{q\omega_n} \left| V_q \right|^2 G_{q,\sigma}^{(0)}(\omega_n) G_{0\sigma,0\sigma}(q,\omega_n) ,\\ \Sigma_{0\sigma,\overline{\sigma}0} &= \frac{2T}{N} \sum_{q\omega_n} \left| V_q \right|^2 G_{q,\sigma}^{(0)}(\omega_n) G_{0\overline{\sigma},\sigma0}(q,\omega_n) ,\\ \delta P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_n) &= \frac{\beta}{N} \sum_{q} \left| V_q \right|^2 G_{q,\sigma}^{(0)}(\omega_n) G_{0\sigma,0\sigma}(q,\omega_n) ,\\ P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}(\omega_n) &= \frac{\alpha}{N} \sum_{q} \left| V_q \right|^2 G_{q,\sigma}^{(0)}(\omega_n) G_{0\overline{\sigma},\sigma0}(q,\omega_n) , \end{split}$$

$$(11)$$

где $\alpha = 3T\chi - C_0/4$, $\beta = 3T\chi + C_0/4$, χ – парамагнитная восприимчивость, а C_0 – Фурье-образ корреляторов (10) при q = 0. Из формул (11) следует, что в однопетлевом приближении компоненты массового оператора не зависят ни от частоты, ни от импульса. Компоненты силового оператора зависят только от частоты.

Таблица 2

Элементы диаграммной техники и соответствующие им функции

	$g_{0\sigma}(i\omega_n)$	\rightarrow 0σ 0σ	$G_{0\sigma,0\sigma}(k,i\omega_n)$
	$D_{\sigma\bar{\sigma},\sigma\bar{\sigma}}(k,i\omega_n)$	$\overline{\sigma}_{0}$ 0σ	$G_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k,i\omega_n)$
~~~~>	$ V_k ^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$	<u> </u>	$K_k^{\sigma\sigma,\sigma\sigma} rac{1}{T} \delta_{\omega_s,0}$
<b>&gt;</b>	$ V_k ^2 G_{k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n)$	•	$K_k^{\sigma\sigma,\overline{\sigma\sigma}} \frac{1}{T} \delta_{\omega_x,0}$

## Уравнение на критическую температуру

Используя выражения (11), можно получить уравнения для самосогласованных численных расчетов свойств сверхпроводящей фазы, описываемой периодической моделью Андерсона. Самосогласованному определению подлежат следующие величины:  $\mu$ ,  $N_{\sigma}$ ,  $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}$ ,  $\Sigma_{0\sigma,\overline{\sigma}0}$ ,  $P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_n)$  и  $P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}(\omega_n)$ . Поскольку компоненты P зависят от мацубаровской частоты, то возникает бесконечная система уравнений. Для ее решения удобно воспользоваться следующими из системы (11) правилами сумм для компонент массового и силового операторов:

$$\beta \Sigma_{0\sigma,0\sigma} = -T \sum_{\omega_n} \delta P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_n),$$
  

$$\alpha \Sigma_{0\sigma,\overline{\sigma}0} = 2T \sum_{\omega_n}^{\omega_n} P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}(\omega_n).$$
(12)

В результате уравнение на температуру перехода в сверхпроводящее состояние с *s*-типом симметрии параметра порядка записывается в виде

$$1 = -T \sum_{\omega_n} \Phi_1(\omega_n) / (1 + \alpha \Phi_2(\omega_n)), \quad (13)$$

где

$$\Phi_{1}(\omega_{n}) = \frac{1}{N} \sum_{q} \frac{2\xi_{q} |V_{q}|^{2}}{a(q,\omega_{n})}, \Phi_{2}(\omega_{n}) = \frac{1}{N} \sum_{q} \frac{|V_{q}|^{4}}{a(q,\omega_{n})}$$
$$a(q,\omega_{n}) = \left| (i\omega_{n} - \xi_{q})(i\omega_{n} - \tilde{\varepsilon}_{f}) - -P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_{n}) |V_{q}|^{2} \right|^{2}, \quad \tilde{\varepsilon}_{f} = E_{0} + \Sigma_{0\sigma,0\sigma} - \mu.$$

Отметим, что традиционно описание сверхпроводящей фазы строится при использовании только аномальной компоненты массового оператора. Впервые на важность учета аномальной компоненты силового оператора было указано в работе [12] при исследовании сверхпроводимости в *t-J*-модели.

Для демонстрации роли компонент силового оператора получим уравнение на  $T_c$  без учета однопетлевых поправок для него. Положив  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0$ , приходим к уравнению, которое, после вычисления суммы по мацубаровским частотам (в данном случае это можно сделать аналитически), принимает вид

$$1 = \frac{1}{N} \sum_{q} \frac{\left| V_{q} \right|^{2} \xi_{q}}{\left( \tilde{E}_{q}^{+} \right)^{2} - \left( \tilde{E}_{q}^{-} \right)^{2}} \times \left[ \frac{\tanh\left( \tilde{E}_{q}^{+} / 2T_{c} \right)}{\tilde{E}_{q}^{+}} - \frac{\tanh\left( \tilde{E}_{q}^{-} / 2T_{c} \right)}{\tilde{E}_{q}^{-}} \right], \quad (14)$$

где миксонный спектр  $\tilde{E}_q^{\pm} = (\xi_q + \tilde{\epsilon}_f)/2 \pm v_q$ ,  $v_q = \sqrt{(\xi_q - \tilde{\epsilon}_q)^2 + 4(1 - N_{\sigma}) |V_q|^2}$ . Выражение (14) может быть использовано при анализе сверхпроводящей фазы с достаточно низкими  $T_c$ , когда процессами рассеяния на спиновых флуктуациях можно пренебречь (т. е. когда  $\chi$  мало).

### Результаты численных расчетов

При проведении численных расчетов затравочная электронная зона описывалась полуэллиптической плотностью состояний. Все энергетические параметры системы измерялись в единицах ширины *W* этой зоны.

Обсуждение результатов вычислений начнем с вопроса о взаимном расположении на фазовой диаграмме системы областей существования различных фаз. Область реализации дальнего магнитного порядка в периодической модели Андерсона, установленная в недавней работе [13], показана на рис. 1. Здесь введены следующие обозначения: FM – ферромагнитная фаза, SF – область насыщенного ферромагнетизма, Р – парамагнитная фаза.

Для вычисления границы области сверхпроводящей SC-фазы использовалось уравнение (14) в пределе  $T_c \rightarrow 0$ . Оказалось, что граница области SC-фазы примыкает к границе FM-фазы и не пересекается с ней (см. рис. 1). Факт непересечения является важным в контексте конкуренции магнитных и сверхпроводящих фаз и укладывается в общую концепцию об антагонизме сверхпроводимости и магнетизма. Важным обстоятельством является также и то, что SC-фаза реализуется только при заполнении верхней гибридизованной зоны.

Этот результат нетрудно увидеть из уравнения (14). Действительно, если химпотенциал лежит в нижней зоне, то главный вклад в интеграл вносит область, где  $\tilde{E}_q^- = 0$ . При этом значение интеграла отрицательно, и уравнение (14) 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.

Для рассмотрения вопроса о возможных значениях критической температуры и их зависимости от параметров модели в SCобласти необходимо решать уравнение (13). Выберем положение локализованного уровня в середине затравочной зоны  $E_0 = 0$ . Будем считать, что рассматриваемые темпера-



*Рис. 1.* Фазовая диаграмма периодической модели Андерсона (*V* = 1,25) при *T* = 0

туры сверхпроводящего перехода много меньше характерной температуры  $T_{\gamma \max}$  [1], при которой система переходит в тяжелофермионное состояние, а восприимчивость перестает зависеть от температуры. По этой причине  $\chi$  будем рассматривать как параметр модели. Значение ее возьмем равной характерной восприимчивости соединений с тяжелыми фермионами:  $\chi = 200\chi_0$ , т. е. более чем на два порядка превосходящей значения восприимчивости Паули  $\chi_0$  для обычных металлов. Из представленных на рис. 2 зависимостей видно, что при учете  $P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}$ изменение параметра гибридизации в пределах от 0,05 до 0,2 не приводит к существенному увеличению критической температуры, которая изменяется от 4 до 8 К. Иная ситуация имеет место, если аномальная компонента силового оператора не учитывается. Расчеты, основанные в этом случае на уравнении (14), показывают (рис. 3), что Т_с зна-



Рис. 2. Температура сверхпроводящего перехода в периодической модели Андерсона при учете аномальной компоненты силового оператора



*Рис. 3.* Температура *T_c* в периодической модели Андерсона без учета процессов рассеяния

чительно возрастает в отмеченной области изменения параметра V.

Из анализа результатов представленных на рис. 2 и 3, также следует, что если значения  $T_c$  без учета  $P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}$  были малы, то учет  $P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}$  практически не влияет на величину температуры  $T_c$ . Если же значения  $T_c$  были велики, то включение  $P_{0\sigma,\overline{\sigma}0}$  приводит к сильному подавлению  $T_c$ . Данный эффект связан с тем обстоятельством, что восприимчивость  $\chi$  входит в теорию в виде произведения  $T\chi$ . При малых  $T_c$  вклад от  $T\chi$  незначителен. При больших  $T_c$  вклад от восприимчивости существенен и, как показывают расчеты, приводит к сильному подавлению критической температуры.

### Список литературы

1. Onuki Y., Settai R., Sugiyama K. et al. Recent Advances in the Magnetism and Superconductivity of Heavy Fermion Systems // J. Phys. Soc. Jpn. 2004. Vol. 73. P. 769.

2. Nakai Y., Ishida K., Kikuchi D. et al. Evideance for s-Wave Superconductivity with Antiferromagnetic Fluctuations in Filled Skutterudite LaFe₄P₁₂:¹³⁹La and ³¹P-NMR Studies // J. Phys. Soc. Jpn. 2005. Vol. 74. P. 3370.

3. Безносиков Б. В., Александров К. С. Кристаллохимия и прогноз соединений со структурой типа скуттерудита. Красноярск: Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН. 2005. Препринт 833 Ф.

4. *Barzykin V., Gor'kov L. P.* Competition between phonon superconductivity and Kondo screening in mixed valence and heavy fermion compounds // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71. P. 214521.

5. Зайцев Р. О., Иванов В. А. Сверхпроводимость в модели Хаббарда // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. С. 140.

6. Зайцев Р. О. К двухпараметрической теории сверхпроводимости // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 79. С. 143.

7. Sacramento P. D. Coexistence of antiferromagnetism and superconductivity in the Anderson lattice // arXiv:cond-mat/0310018. 2003.

8. Зайцев Р. О. Диаграммная техника и газовое приближение в модели Хаббарда // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. С. 1100.

9. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физмат-гиз, 1962.

10. Изюмов Ю. А., Алексеев Д. С. Ферромагнитное состояние в периодической модели Андерсона // ФММ. 2004. Т. 97. С. 18–27.

11. Вальков В. В., Овчинников С. Г. Квазичастицы в сильно коррелированных системах // Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001.

12. Val'kov V. V., Golovnya A. A., Dzebisashvili D. M. The role of anomalous strength operator in the high-Tc superconductivity theory // Physica B: Cond.-mat. 2006. Vol. 378–380. P. 465.

13. Изюмов Ю. А., Чащин Н. И., Алексеев Д. С. Теория сильнокоррелированных систем. Метод производящего функционала // Регулярная и хаотическая динамика. М.: Ижевск, 2006. С. 384.

Материал поступил в редколлегию 06.12.2006