

ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР И ТЕПЛОЕМКОСТЬ ТЯЖЕЛЫХ ФЕРМИОНОВ В СКОШЕННОЙ ФАЗЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

В. В. Вальков^{a,b,c}, Д. М. Дзедзисашивили^{a,b}*

^a *Институт физики Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Сибирский федеральный университет
660075, Красноярск, Россия*

^c *Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М. Ф. Решетнева
660014, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 4 июня 2009 г.

В условиях скоса магнитных подрешеток антиферромагнитных интерметаллидов вычислен энергетический спектр тяжелых фермионов во внешнем магнитном поле. Это позволило при учете перестраивания структуры магнитной подсистемы выявить низкотемпературные особенности электронной теплоемкости тяжелофермионных антиферромагнетиков с металлическим типом основного состояния. Рассчитанные температурные зависимости намагниченности, теплоемкости и константы Зоммерфельда в окрестности точки перехода в антиферромагнитную фазу качественно хорошо коррелируют с экспериментальными данными, полученными для тяжелофермионных антиферромагнетиков PuGa_3 , $\text{Ce}_2\text{Au}_2\text{Cd}$, YbNiSi_3 , PuPd_5Al_2 .

1. ВВЕДЕНИЕ

Структура основного состояния (ОС) и низкотемпературные свойства тяжелофермионных (ТФ) систем продолжают оставаться предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований. Химическую основу соединений с тяжелыми фермионами составляют редкоземельные элементы (чаще всего Ce и Yb), а также U и трансурановые элементы (Pu и Np). Установлено, что тип ОС в ТФ-интерметаллидах может претерпевать значительные изменения под воздействием внешних полей.

Характер ОС в существенной степени определяется результатом конкуренции двух взаимодействий. С одной стороны, s - f -обменная связь между спиновыми моментами коллективизированных и локализованных f -электронов из-за кондовских флуктуаций проявляет тенденцию к экранировке спиновых моментов локализованных электронов и формированию немагнитного типа ОС. В противопо-

ложном направлении действует обменное взаимодействие между спиновыми моментами f -электронов, стремясь установить магнитный порядок. Конкретная реализация структуры ОС зависит также от относительного положения энергии локализованного f -уровня и химического потенциала.

При доминировании s - f -обменного взаимодействия интерметаллид может находиться в немагнитном металлическом состоянии, характеризуемом большим значением константы Зоммерфельда γ (состояние с ТФ). Примеров систем, в которых при температурах порядка 10 К наблюдается такая фаза, довольно много. Однако только соединение CeCu_6 и, возможно, CePt_2Sn_2 остаются парамагнитными металлами вплоть до самых низких температур [1]. В остальных, известных к настоящему времени, ТФ-системах при температурах порядка 1 К наблюдается дальнейшая модификация основного состояния. Формирование тяжелых квазичастиц может завершиться, например, переходом из металлического состояния в полупроводниковое, как это имеет место в CeNiSn [2], или в диэлектрическое. Теория

*E-mail: vvv@iph.krasn.ru

низкотемпературных свойств подобных систем при слабых магнитных полях была развита в работе [3]. Типичными представителями ТФ-диэлектриков или так называемых кондовских изоляторов являются соединения $\text{Ce}_3\text{V}_4\text{Pt}_3$, SmV_6 [4], $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$ [5]. Термодинамическое поведение этих систем успешно описывается в рамках модели двухкомпонентной ферми-жидкости [6, 7].

Часть интерметаллических соединений с ТФ при температурах, не превышающих 5 К, становится сверхпроводниками. В качестве примеров можно привести как классические ТФ-сверхпроводники — CeCu_2Si_2 [8], URu_2Si_2 [9], UPt_3 [10], — так и открытые относительно недавно системы 1-1-5 — CeTIn_5 , ($T = \text{Co, Rh, Ir}$) [11, 12], — а также скуттерудиты — $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$ [13] и $\text{PrRu}_4\text{As}_{12}$ [14]. Иногда переход в сверхпроводящую фазу реализуется под высоким давлением. Например, в CeRhIn_5 [12] и CeCu_2Ge_2 [15] сверхпроводимость наблюдается только при давлении, большем соответственно 16 кбар и 77 кбар.

Наконец, существует большое количество ТФ-систем, в которых при понижении температуры главную роль начинает играть обменное взаимодействие между локализованными f -электронами. В таких веществах при температурах порядка 10 К обнаруживается фазовый переход с формированием дальнего магнитного порядка. Ферромагнитный тип упорядочения реализуется в соединениях UGe_2 [16], URu [17], ZrZn_2 [18]. Однако основная масса магнитных ТФ-систем является антиферромагнетиками. В некоторых соединениях с тяжелыми фермионами, например в CeRhIn_5 [19], изменение внешних условий вызывает переход в состояние, характеризующее сосуществованием антиферромагнитного (AFM) и сверхпроводящего (SC) параметров порядка.

Многообразие низкотемпературных фаз и их модификация внешними воздействиями инициируют большое количество экспериментальных исследований магнитной восприимчивости [20], проводимости [21], магнитосопротивления [22], термоэдс [23] и теплоемкости ТФ-систем под давлением, а также во внешнем магнитном поле. При исследовании антиферромагнитной фазы соединений с ТФ в окрестности фазового перехода важная информация получается в результате обработки экспериментальных данных по температурной эволюции теплоемкости во внешнем магнитном поле PuGa_3 [24], $\text{Ce}_2\text{Au}_2\text{Cd}$ [25], YbNiSi_3 [26], PuPd_5Al_2 [27]. Для адекватной интерпретации результатов таких экспериментов необходимо корректно учитывать перестройку магнитной подсистемы, индуцированной внеш-

ним магнитным полем. Это становится очевидным, если учесть, что в ТФ-антиферромагнетиках температура Нееля относительно мала ($T_N \sim 3$ К) [28] и поле $H \sim 10^4$ Э, являясь соизмеримым с эффективным параметром обменного взаимодействия между спиновыми моментами f -ионов, вызывает значительный снос магнитных подрешеток.

Между тем теоретическое описание термодинамических свойств антиферромагнитных ТФ-систем, представленное в современной литературе, во многих отношениях оказывается недостаточным. Так, например, в работах [29–32] в рамках симметричной периодической модели Андерсона (РАМ) вычислялся фермиевский спектр кондо-изоляторов в строго коллинеарной АФМ-фазе (в отсутствие внешнего магнитного поля). Описание энергетического спектра тяжелофермионных антиферромагнитных металлов в возникающей при наложении внешнего магнитного поля скошенной фазе в настоящее время отсутствует. Между тем наличие скаса магнитных подрешеток и его изменение при вариациях температуры приводят к дополнительным вкладам в электронную теплоемкость и влияют на константу Зоммерфельда. Уже только это обстоятельство делает актуальной постановку задачи о вычислении низкотемпературной теплоемкости ТФ-антиферромагнетиков при учете температурно-зависимого скаса магнитных подрешеток.

Теоретическое изучение эффектов, связанных с наличием дальнего АФМ-порядка, может быть проведено в рамках расширенной РАМ, включающей обменные взаимодействия в подсистеме локализованных f -электронов. Слагаемые такого типа появляются в эффективном низкоэнергетическом гамильтониане РАМ в режиме большого, но конечного одноузельного кулоновского взаимодействия U в результате применения метода унитарных преобразований [33–36]. Однако следует отметить, что для ТФ с металлическим типом проводимости непосредственное применение преобразования Шриффера–Вольфа [33, 34] не может быть использовано, поскольку при нахождении локализованного уровня в зоне проводимости эффективные обменные интегралы расходятся [37]. Вывод эффективных обменных взаимодействий между спиновыми моментами f -ионов в модели Андерсона для металлического типа основного состояния был реализован в работе [38], где при использовании атомного представления были выделены гибридационные процессы V_{12} , связанные с участием высокоэнергетических состояний верхней хаббардовской подзоны. Это позволило построить эффективный гамильтониан РАМ

до четвертого порядка по параметру V_{12}/U включительно и получить явные выражения для обменных интегралов, не содержащих расходимостей.

В настоящей работе на основе эффективного гамильтониана РАМ в режиме сильных электронных корреляций вычислен спектр тяжелых фермионов в скошенной внешним магнитным полем АФМ-фазе. Решение задачи получено на основе широко используемого в теории тяжелых фермионов слейв-бозонного представления, а также последовательного применения пяти преобразований Боголюбова при диагонализации квадратичной формы эффективного гамильтониана РАМ. Это позволило провести изучение влияния магнитного поля на температурную зависимость теплоемкости и константу Зоммерфельда в ТФ-антиферромагнетиках.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

Гамильтониан РАМ в представлении операторов рождения $c_{k\sigma}^+$ ($d_{l\sigma}^+$) и уничтожения $c_{k\sigma}$ ($d_{l\sigma}$) коллективизированного (локализованного) электрона с квазиимпульсом k (с номером ячейки Ванье l) и проекцией спинового момента σ имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{l\sigma} (E_\sigma - \mu) d_{l\sigma}^+ d_{l\sigma} + U \sum_l \hat{n}_{l\uparrow} \hat{n}_{l\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{lk\sigma} \{V_k e^{-ikl} c_{k\sigma}^+ d_{l\sigma} + \text{H.c.}\}. \quad (1)$$

Первая сумма описывает невзаимодействующие коллективизированные электроны во внешнем магнитном поле H , снимающем вырождение затравочного энергетического спектра ε_k по значению проекции спинового момента $\sigma = +1/2, -1/2$:

$$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - 2\sigma\mu_B H,$$

μ_B — магнетон Бора. Второе слагаемое учитывает наличие локализованных состояний с энергией $E_\sigma = E_0 - g\sigma\mu_B H$, E_0 — затравочная энергия. В магнитном поле локализованный уровень расщепляется на два зеемановских подуровня. Величина расщепления зависит от значения g -фактора редкоземельного иона. Введение химического потенциала μ , как обычно, связано с использованием в дальнейшем усреднения по большому каноническому ансамблю. Кулоновское взаимодействие двух электронов, находящихся на одном ионе, учтено посредством третьего слагаемого, в котором $\hat{n}_{l\sigma} = d_{l\sigma}^+ d_{l\sigma}$ является оператором числа локализованных электронов

с проекцией спинового момента σ , а U — энергией хаббардовского отталкивания. Последний член в формуле (1) описывает гибридизационные процессы между двумя группами электронов с интенсивностью V_k .

При нахождении энергетического спектра тяжелых фермионов в скошенной АФМ-фазе будем считать, что локализованный уровень E_0 находится в пределах нижней половины зоны проводимости. В режиме сильных электронных корреляций энергия верхнего хаббардовского уровня $E_0 + U$ находится выше потолка зоны проводимости. Если $U \gg |V_k|$, то использование атомного представления для локализованных состояний f -ионов позволяет явно отделить высокоэнергетические процессы гибридизации с участием двоичных локализованных состояний от низкоэнергетических, когда переходы электронов из зоны проводимости происходят только в локализованные состояния с одним электроном. Поскольку первые гибридизационные процессы происходят с участием уровня с большой величиной энергии $E_0 + U$, их можно учесть посредством операторной формы теории возмущений. Реализация этой программы приводит к эффективному гамильтониану, включающему обменную связь спиновых моментов коллективизированных и локализованных электронов, а также обменное взаимодействие между спиновыми моментами f -ионов [38]. Таким образом, описание физических свойств тяжелофермионных антиферромагнитных интерметаллидов может быть реализовано на основе модифицированного гамильтониана Андерсона

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{mix} + \hat{H}_{exch}, \quad (2)$$

слагаемые которого записываются в двухподрешеточном представлении Ванье. Первое слагаемое в формуле (2) учитывает наличие коллективизированных и локализованных состояний электронов:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \sum_{f\sigma} (\varepsilon_\sigma - \mu) a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} + \sum_{g\sigma} (\varepsilon_\sigma - \mu) b_{g\sigma}^+ b_{g\sigma} + \\ & + \sum_{f\sigma} (E_\sigma - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{g\sigma} (E_\sigma - \mu) X_g^{\sigma\sigma} + \\ & + \sum_{ff'\sigma} t_{ff'} a_{f\sigma}^+ a_{f'\sigma} + \sum_{gg'\sigma} t_{gg'} b_{g\sigma}^+ b_{g'\sigma} + \\ & + \sum_{fg\sigma} t_{fg} (b_{g\sigma}^+ a_{f\sigma} + a_{f\sigma}^+ b_{g\sigma}). \quad (3) \end{aligned}$$

Индексами « f » и « f' » обозначаются узлы, принадлежащие F -подрешетке, а индексами « g » и « g' » —

узлы, относящиеся к G -подрешетке. Операторы рождения (уничтожения) электронов проводимости, относящиеся к подрешеткам F и G , переобозначены посредством соответственно a_f^+ (a_f) и b_g^+ (b_g). Третье и четвертое слагаемые в формуле (3) отражают вклады локализованных состояний соответственно из подрешеток F и G . Пятая (шестая) сумма в формуле (3) описывает перескоки электронов проводимости внутри подрешетки F (G), а последняя сумма — между подрешетками. Величина $\varepsilon_\sigma = \varepsilon - 2\sigma\mu_B H$ определяет диагональную часть энергии коллективизированного состояния в представлении Ванье в магнитном поле, ε — затравочный уровень отмеченной энергии, $t_{ll'}$ — матричные элементы, отражающие интенсивность перескоков коллективизированных электронов с узла l на узел l' (индексы узлов l, l' могут относиться как к F -, так и к G -подрешеткам). Описание состояний f -ионов осуществляется в атомном представлении с помощью операторов Хаббарда:

$$X_l^{m,n} = |m\rangle\langle n|.$$

При $n = 0$ вектор $|n\rangle$ описывает состояние без электронов, а при $n = \sigma$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) — одноэлектронное состояние с проекцией спинового момента σ .

Состояния с двумя f -электронами на одном узле не участвуют в формировании гильбертова пространства эффективного гамильтониана (2), поскольку процессы с участием двоичных состояний учтены по теории возмущений. Этим обстоятельством объясняется тот факт, что в $\hat{\mathcal{H}}_{mix}$ присутствуют только низкоэнергетические гибридизационные процессы между локализованными и коллективизированными состояниями:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{mix} = & \sum_{fg\sigma} \left(W_{fg} a_{f\sigma}^+ X_g^{0\sigma} + W_{gf} b_{g\sigma}^+ X_f^{0\sigma} \right) + \\ & + \sum_{ff'\sigma} V_{ff'} a_{f\sigma}^+ X_{f'}^{0\sigma} + \sum_{gg'\sigma} V_{gg'} b_{g\sigma}^+ X_{g'}^{0\sigma} + \text{H.c.} \quad (4) \end{aligned}$$

Первая сумма в формуле (4) описывает гибридизационные процессы между состояниями из разных подрешеток с матричными элементами W_{fg} . Гибридизационные процессы в пределах одной подрешетки отражены вторым и третьим слагаемыми.

Обменную часть гамильтониана (2), обусловленную процессами виртуальных забросов в двоичные состояния, запишем в виде

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{exch} = & \sum_{ff'} J_{ff'} (\mathbf{S}_f \cdot \boldsymbol{\sigma}_{f'}) + \sum_{gg'} J_{gg'} (\mathbf{S}_g \cdot \boldsymbol{\sigma}_{g'}) + \\ & + \sum_{fg} L_{fg} (\mathbf{S}_f \cdot \boldsymbol{\sigma}_g + \mathbf{S}_g \cdot \boldsymbol{\sigma}_f) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{ff'} I_{ff'} (\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_{f'}) - \frac{1}{2} \sum_{gg'} I_{gg'} (\mathbf{S}_g \cdot \mathbf{S}_{g'}) + \\ & + \sum_{fg} K_{fg} (\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_g). \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь учтено s - f -обменное взаимодействие между спиновыми моментами локализованных и коллективизированных электронов, а также обменное взаимодействие в локализованной подсистеме. Матричные элементы для s - f -обменного взаимодействия в пределах одной подрешетки обозначены посредством $J_{ff'}$ и $J_{gg'}$, а из разных подрешеток — L_{fg} . Матричные элементы $I_{ff'}$ и $I_{gg'}$ отражают интенсивность обменной связи между спиновыми моментами локализованных состояний, принадлежащих одной подрешетке. Посредством K_{fg} обозначены обменные интегралы между спиновыми моментами локализованных состояний из разных подрешеток. Поведение обменных параметров при изменении гибридизации и расстояния между узлами решетки проанализировано в работе [38].

Компоненты локализованных квазиспиновых операторов \mathbf{S}_l связаны с операторами Хаббарда обычным образом:

$$\begin{aligned} S_l^x = & \frac{1}{2} \sum_{\sigma} X_l^{\sigma\bar{\sigma}}, \quad S_l^y = i \sum_{\sigma} \sigma X_l^{\bar{\sigma}\sigma}, \\ S_l^z = & \sum_{\sigma} \sigma X_l^{\sigma\sigma}, \quad S_l^+ = X_l^{\uparrow\downarrow}, \\ S_l^- = & X_l^{\downarrow\uparrow} \quad (\bar{\sigma} = -\sigma). \end{aligned} \quad (6)$$

Для коллективизированных состояний связь компонент оператора спина электрона с фермиевскими операторами имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_l^x = & (c_{l\uparrow}^+ c_{l\downarrow} + c_{l\downarrow}^+ c_{l\uparrow})/2, \quad \sigma_l^y = (c_{l\uparrow}^+ c_{l\downarrow} - c_{l\downarrow}^+ c_{l\uparrow})/2i, \\ \sigma_l^z = & (c_{l\uparrow}^+ c_{l\uparrow} - c_{l\downarrow}^+ c_{l\downarrow})/2. \end{aligned}$$

3. СЛЕЙВ-БОЗОННОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА В СРЕДНЕПОЛЕВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДЛЯ СКОШЕННОЙ АФМ-ФАЗЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В магнитном поле происходит деформация магнитной структуры ТФ-антиферромагнетика и векторы равновесных намагниченностей \mathbf{R}_F и \mathbf{R}_G в F -

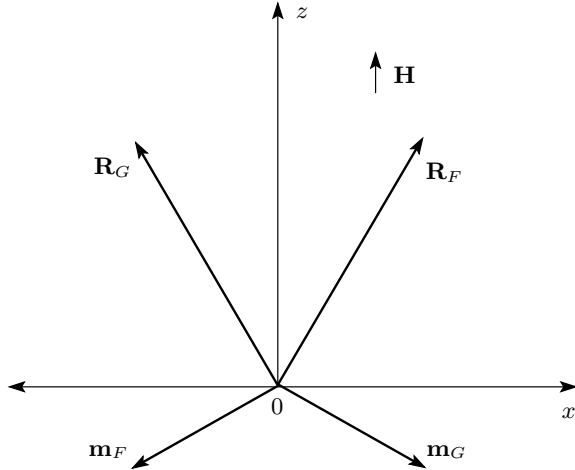


Рис. 1. Направления векторов намагниченностей в скошенной фазе при включении магнитного поля \mathbf{H} вдоль оси z . При $\mathbf{H} = 0$ все векторы коллинеарны оси x

G -подрешетках ориентированы по отношению друг к другу на угол, отличный от 180° (см. рис. 1). Из-за s - f -обменной связи локализованных спинов с коллективизированными этот скос магнитных подрешеток индуцирует перестройку спектра фермиевских возбуждений. В результате зависимость электронной теплоемкости от внешнего магнитного поля будет содержать ренормировки, обусловленные зависимостью скоса магнитных подрешеток от H .

Рассмотрение отмеченных эффектов проведем в приближении, игнорирующем релаксационные процессы. Тогда влияние локализованной подсистемы на коллективизированную может быть описано в приближении среднего поля. Гибридизационные процессы учтем в рамках слейв-бозонного представления с последующим использованием усредненного констрейна [39]. Как известно, такой подход удовлетворительно описывает энергетический спектр тяжелых фермионов в немагнитной фазе. С учетом сказанного, гамильтониан РАМ представим следующим образом:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_c + \hat{\mathcal{H}}_L + \hat{\mathcal{H}}_{mix} + C, \quad (7)$$

где $\hat{\mathcal{H}}_c$ — гамильтониан коллективизированной подсистемы

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_c = \sum_{k\sigma} \{ [t_k + \sigma(J_0 + L_0)R_{\parallel} - 2\sigma\mu_B H] \times \\ \times (a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma}) + \Gamma_k (a_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}) + \\ + [(J_0 - L_0)R_{\perp}/2] (a_{k\sigma}^+ a_{k\bar{\sigma}} - b_{k\sigma}^+ b_{k\bar{\sigma}}) \}, \quad (8) \end{aligned}$$

а фурье-образы интегралов перескоков определены для зоны Бриллюэна, соответствующей антиферромагнитной фазе:

$$\begin{aligned} t_{ff'} &= N^{-1} \sum_k t_k \exp \{ ik(f - f') \}, \\ t_{fg} &= N^{-1} \sum_k \Gamma_k \exp \{ ik(f - g) \}, \end{aligned}$$

где N — число узлов в магнитной подрешетке. Влияние локализованной подсистемы проявилось в виде поля подмагничивания $\sim R_{\parallel} = \langle S_f^z \rangle = \langle S_g^z \rangle$, а также слагаемого $\sim R_{\perp} = \langle S_f^x \rangle = -\langle S_g^x \rangle$, описывающего процессы с переворотом проекции спинового момента в коллективизированной подсистеме.

После двухэтапного преобразования Боголюбова

$$\begin{aligned} a_{k\sigma} &= (\alpha_{k\sigma} - \beta_{k\sigma})/\sqrt{2}, \\ b_{k\sigma} &= (\alpha_{k\sigma} + \beta_{k\sigma})/\sqrt{2}, \\ \alpha_{k\sigma} &= \cos \varphi_{k\sigma} A_{k\sigma} - \sin \varphi_{k\sigma} B_{k\bar{\sigma}}, \\ \beta_{k\bar{\sigma}} &= \cos \varphi_{k\sigma} B_{k\bar{\sigma}} + \sin \varphi_{k\sigma} A_{k\sigma} \end{aligned} \quad (9)$$

с параметрами преобразования

$$\begin{aligned} \cos 2\varphi_{k\sigma} &= -\Gamma_{k\sigma}/\nu_{k\sigma}, \quad \sin 2\varphi_{k\sigma} = \Delta_{\perp}/\nu_{k\sigma}, \\ \Delta_{\perp} &= (J_0 - L_0)R_{\perp}/2, \\ \Gamma_{k\sigma} &= \Gamma_k + \sigma [(J_0 + L_0)R_{\parallel} - 2\mu_B H], \\ \nu_{k\sigma} &= \sqrt{\Gamma_{k\sigma}^2 + \Delta_{\perp}^2} \end{aligned} \quad (10)$$

оператор (8) приобретает диагональный вид:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_c &= \sum_{k\sigma} \{ \xi_{k\sigma}^- A_{k\sigma}^+ A_{k\sigma} + \xi_{k\sigma}^+ B_{k\bar{\sigma}}^+ B_{k\bar{\sigma}} \}, \\ \xi_{k\sigma}^{\pm} &= t_k \pm \nu_{k\sigma}. \end{aligned} \quad (11)$$

При введении слейв-бозонного представления [39] для операторов Хаббарда локализованной подсистемы фермиевские операторы для F -подрешетки обозначим посредством $\Lambda_{f\sigma}$, а фермиевские операторы для G -подрешетки — через $\chi_{g\sigma}$. После учета среднопольных эффектов, индуцированных воздействием на локализованные состояния обменных взаимодействий, получаем гамильтониан локализованной подсистемы в квазиимпульсном представлении

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_L = \sum_{k\sigma} \left\{ (E_0 + \lambda + \sigma h_{\parallel}) (\Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma} + \chi_{k\sigma}^+ \chi_{k\sigma}) - \right. \\ \left. - \frac{h_{\perp}}{2} (\Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\bar{\sigma}} - \chi_{k\sigma}^+ \chi_{k\bar{\sigma}}) \right\}. \quad (12) \end{aligned}$$

Здесь $h_{\parallel} = -g\mu_B H + m_{\parallel}(J_0 + L_0) + R_{\parallel}(K_0 - I_0)$, $h_{\perp} = R_{\perp}(K_0 + I_0) - m_{\perp}(J_0 - L_0)$, $m_{\parallel} = \langle \sigma_f^z \rangle = \langle \sigma_g^z \rangle$,

$m_{\perp} = \langle \sigma_f^x \rangle = -\langle \sigma_g^x \rangle$. Параметр λ определяет ренормировку энергии локализованного уровня, возникающую при использовании слейв-бозонов [39].

Диагонализация \hat{H}_L осуществляется путем преобразования

$$\begin{aligned} \Lambda_{k\sigma} &= \cos \phi D_{k\sigma} + 2\sigma \sin \phi D_{k\bar{\sigma}}, \\ \chi_{k\sigma} &= \cos \phi G_{k\sigma} - 2\sigma \sin \phi G_{k\bar{\sigma}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где угол ϕ удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} \cos 2\phi &= -\frac{h_{\parallel}}{\bar{H}_{\Lambda}}, \quad \sin 2\phi = -\frac{h_{\perp}}{\bar{H}_{\Lambda}}, \\ \bar{H}_{\Lambda} &= \sqrt{h_{\perp}^2 + h_{\parallel}^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

В результате для \hat{H}_L получаем выражение

$$\hat{H}_L = \sum_{k\sigma} \tilde{E}_{\sigma} (D_{k\sigma}^+ D_{k\sigma} + G_{k\sigma}^+ G_{k\sigma}), \quad (15)$$

где $\tilde{E}_{\sigma} = E_0 + \lambda - \sigma \bar{H}_{\Lambda}$ — энергия локализованных электронов в скошенной фазе без учета гибридизационных процессов.

В используемом подходе слагаемое \hat{H}_{mix} имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{mix} &= \sum_{k\sigma} \left\{ \tilde{V}_k (a_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ \chi_{k\sigma}) + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{W}_k (a_{k\sigma}^+ \chi_{k\sigma} + b_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma}) \right\} + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $\tilde{V}_k = e_0 V_k$, $\tilde{W}_k = e_0 W_k$, а e_0^2 — среднее значение оператора числа вспомогательных бозонов в расчете на один узел. Фурье-образы внутри- и межподрешеточных параметров гибридизации также определены для магнитной зоны Бриллюэна:

$$\begin{aligned} V_k &= \sum_{(f-f')} V_{ff'} \exp \{-ik(f-f')\}, \\ W_k &= \sum_{(f-g)} W_{fg} \exp \{-ik(f-g)\}. \end{aligned}$$

Применение преобразований (9) и (13) приводит к тому, что уравнения движения при учете оператора \hat{H}_{mix} образуют замкнутую нераспадающуюся систему восьмого порядка. Соответственно этому дисперсионное уравнение также является уравнением восьмой степени и получение замкнутых уравнений самосогласования становится громоздким.

Ситуация радикально упрощается, если ввести еще одно унитарное преобразование:

$$\begin{aligned} D_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{k\sigma} + L_{k\sigma}), \\ G_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{k\sigma} - L_{k\sigma}). \end{aligned} \quad (17)$$

Тогда гибридизационная часть гамильтониана (2) приобретает вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{mix} &= \sum_{k\sigma} \left\{ \left(v_{+,k\sigma}^{(c)} A_{k\sigma}^+ - v_{+,k\sigma}^{(s)} B_{k\bar{\sigma}}^+ \right) P_{k\sigma} - \right. \\ &\quad \left. - \left(v_{-,k\sigma}^{(s)} A_{k\sigma}^+ + v_{-,k\sigma}^{(c)} B_{k\bar{\sigma}}^+ \right) L_{k\bar{\sigma}} \right\} + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (18)$$

где $v_{\pm,k\sigma}^{(c)} = \tilde{V}_k \cos \psi_{k\sigma}^{\pm} \pm \tilde{W}_k \cos \psi_{k\sigma}^{\pm}$, $v_{\pm,k\sigma}^{(s)} = \tilde{V}_k \sin \psi_{k\sigma}^{\pm} \pm \tilde{W}_k \sin \psi_{k\sigma}^{\pm}$, $\psi_{k\sigma}^{\pm} = \varphi_{k\sigma} \pm 2\sigma\phi$. Структура же \hat{H}_L после преобразования (17) не изменится:

$$\hat{H}_L = \sum_{k\sigma} \tilde{E}_{\sigma} (P_{k\sigma}^+ P_{k\sigma} + L_{k\sigma}^+ L_{k\sigma}). \quad (19)$$

Существенно, что теперь уравнения движения разбиваются на два независимых блока четвертой степени.

Константа C в гамильтониане (7) содержит среднелевые поправки к энергии системы, а также слабое, связанное с констрейном, ограничивающим среднее число локализованных электронов ($n_f \leq 1$):

$$\begin{aligned} C &= -2NR_{\parallel} m_{\parallel} (J_0 + L_0) - 4Nm_{\perp} \Delta_{\perp} + \\ &\quad + NR_{\perp}^2 (K_0 + J_0) + NR_{\parallel}^2 (I_0 - K_0) + 2N\lambda (e_0^2 - 1). \end{aligned} \quad (20)$$

Для окончательной диагонализации квадратичной формы гамильтониана РАМ, определяемой выражениями (11), (18) и (19), применим пятое унитарное преобразование ($\lambda = 1, \dots, 4$):

$$\begin{aligned} Z_{\lambda k\sigma} &= u_{\lambda 1, k\sigma} A_{k\sigma} + u_{\lambda 2, k\sigma} B_{k\bar{\sigma}} + \\ &\quad + u_{\lambda 3, k\sigma} P_{k\sigma} + u_{\lambda 4, k\sigma} L_{k\bar{\sigma}}. \end{aligned} \quad (21)$$

Коэффициенты этого преобразования $u_{\lambda j, k\sigma}$ найдем из требования диагональности операторной части гамильтониана РАМ в представлении новых операторов $Z_{\lambda k\sigma}$:

$$\hat{H}_c + \hat{H}_{mix} + \hat{H}_L = \sum_{\lambda k\sigma} E_{\lambda k\sigma} Z_{\lambda k\sigma}^+ Z_{\lambda k\sigma}. \quad (22)$$

Данное требование сводится к решению системы четырех однородных уравнений:

$$\begin{pmatrix} \omega - \xi_{k\sigma}^- & 0 & -\left(v_{+,k\sigma}^{(c)}\right)^* & \left(v_{-,k\sigma}^{(s)}\right)^* \\ 0 & \omega - \xi_{k\sigma}^+ & \left(v_{+,k\sigma}^{(s)}\right)^* & \left(v_{-,k\sigma}^{(c)}\right)^* \\ -v_{+,k\sigma}^{(c)} & v_{+,k\sigma}^{(s)} & \omega - E_{\sigma} & 0 \\ v_{-,k\sigma}^{(s)} & v_{-,k\sigma}^{(c)} & 0 & \omega - E_{k\bar{\sigma}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_{\lambda 1, k\sigma} \\ u_{\lambda 2, k\sigma} \\ u_{\lambda 3, k\sigma} \\ u_{\lambda 4, k\sigma} \end{pmatrix} = 0. \quad (23)$$

Из условия существования нетривиальных решений данной системы находим дисперсионное уравнение, определяющее восемь ветвей $E_{\lambda k\sigma}$ ($\lambda = 1, \dots, 4$, $\sigma = \pm 1/2$) спектра фермиевских возбуждений РАМ в скошенной антиферромагнитной фазе:

$$\begin{aligned} & (\omega - \xi_{k\sigma}^-) (\omega - \xi_{k\sigma}^+) (\omega - E_\sigma) (\omega - E_{\bar{\sigma}}) + \\ & + |\tilde{V}_k^2 - \tilde{W}_k^2|^2 - (\omega - \xi_{k\sigma}^-) (\omega - E_{\bar{\sigma}}) \left| v_{+,k\sigma}^{(s)} \right|^2 - \\ & - (\omega - \xi_{k\sigma}^-) (\omega - E_\sigma) \left| v_{-,k\sigma}^{(c)} \right|^2 - (\omega - \xi_{k\sigma}^+) (\omega - E_\sigma) \times \\ & \times \left| v_{-,k\sigma}^{(s)} \right|^2 - (\omega - \xi_{k\sigma}^+) (\omega - E_{\bar{\sigma}}) \left| v_{+,k\sigma}^{(c)} \right|^2 = 0. \quad (24) \end{aligned}$$

В частном случае, при учете только внутримолекулярной гибридизации $V_k \neq 0$, $W_k = 0$ дисперсионное уравнение упрощается:

$$\begin{aligned} & \left[(\omega - \xi_{k\sigma}^-) (\omega - E_\sigma) - |\tilde{V}_k|^2 \right] \times \\ & \times \left[(\omega - \xi_{k\sigma}^+) (\omega - E_{\bar{\sigma}}) - |\tilde{V}_k|^2 \right] + \\ & + 4\sigma |\tilde{V}_k|^2 \sin^2 \psi_{k\sigma}^- \bar{H}_\Lambda \nu_{k\sigma} = 0. \quad (25) \end{aligned}$$

В противоположной ситуации $W_k \neq 0$, $V_k = 0$, дисперсионное уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} & \left[(\omega - \xi_{k\sigma}^-) (\omega - E_\sigma) - |\tilde{W}_k|^2 \right] \times \\ & \times \left[(\omega - \xi_{k\sigma}^+) (\omega - E_{\bar{\sigma}}) - |\tilde{W}_k|^2 \right] + \\ & + 4\sigma |\tilde{W}_k|^2 \sin^2 \psi_{k\sigma}^+ \bar{H}_\Lambda \nu_{k\sigma} = 0. \quad (26) \end{aligned}$$

Уравнения (25) и (26) формально различаются лишь аргументом синуса в последнем слагаемом. В парафазе ($\bar{H}_\Lambda = 0$) оба эти уравнения дают стандартный миксонный спектр.

В дальнейшем для упрощения аналитических расчетов ограничимся рассмотрением случая одноподрешеточной гибридизации ($W_k = 0$). При нахождении коэффициентов преобразования (21) кроме уравнений (23) воспользуемся условием унитарности $\sum_j u_{\lambda j, k\sigma}^2 = 1$. В результате для коэффициентов пятого преобразования получаем выражения

$$\begin{aligned} u_{\lambda 1, k\sigma} &= \left\{ - (E_{\lambda k\sigma} - \xi_{k\sigma}^+) (E_{\lambda k\sigma} - E_\sigma) \times \right. \\ & \times (E_{\lambda k\sigma} - E_{\bar{\sigma}}) + |\tilde{V}_k|^2 \cos^2 \psi_{k\sigma}^- (E_{\lambda k\sigma} - E_\sigma) + \\ & \left. + |\tilde{V}_k|^2 \sin^2 \psi_{k\sigma}^- (E_{\lambda k\sigma} - E_{\bar{\sigma}}) \right\} / \Delta_{k\sigma} (E_{\lambda k\sigma}), \\ u_{\lambda 2, k\sigma} &= |\tilde{V}_k|^2 \sin \psi_{k\sigma}^- \times \\ & \times \cos \psi_{k\sigma}^- (E_{\bar{\sigma}} - E_\sigma) / \Delta_{k\sigma} (E_{\lambda k\sigma}), \\ u_{\lambda 3, k\sigma} &= |\tilde{V}_k| \cos \psi_{k\sigma}^- \left\{ |\tilde{V}_k|^2 - (E_{\lambda k\sigma} - \xi_{k\sigma}^+) \times \right. \\ & \left. \times (E_{\lambda k\sigma} - E_{\bar{\sigma}}) \right\} / \Delta_{k\sigma} (E_{\lambda k\sigma}), \\ u_{\lambda 4, k\sigma} &= |\tilde{V}_k| \sin \psi_{k\sigma}^- \left\{ |\tilde{V}_k|^2 - (E_{\lambda k\sigma} - \xi_{k\sigma}^+) \times \right. \\ & \left. \times (E_{\lambda k\sigma} - E_\sigma) \right\} / \Delta_{k\sigma} (E_{\lambda k\sigma}), \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_{k\sigma}^2 (\omega) &= \cos^2 \psi_{k\sigma}^- \left[(\omega - E_\sigma)^2 + |\tilde{V}_k|^2 \right] \times \\ & \times \left[|\tilde{V}_k|^2 - (\omega - E_{\bar{\sigma}}) (\omega - \xi_{k\sigma}^+) \right]^2 + \\ & + \sin^2 \psi_{k\sigma}^- \left[(\omega - E_{\bar{\sigma}})^2 + |\tilde{V}_k|^2 \right] \times \\ & \times \left[|\tilde{V}_k|^2 - (\omega - E_\sigma) (\omega - \xi_{k\sigma}^+) \right]^2. \end{aligned}$$

Вводя функцию

$$\begin{aligned} \Phi_{\lambda k\sigma}^{ij} (\alpha) &= (u_{\lambda i, k\sigma}^* \cos \alpha + u_{\lambda j, k\sigma}^* \sin \alpha) / \sqrt{2}, \\ & i, j = 1, 2, 3, 4, \end{aligned}$$

выразим исходные операторы эффективного гамильтониана РАМ через операторы $Z_{\lambda k\sigma}$, в представлении которых этот гамильтониан диагонален (см. (22)):

$$\begin{aligned} a_{k\sigma} &= \\ & = \sum_{\lambda} \left[\Phi_{\lambda k\sigma}^{12} (-\varphi_{k\sigma}) Z_{\lambda k\sigma} - \Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{21} (\varphi_{k\bar{\sigma}}) Z_{\lambda k\bar{\sigma}} \right], \\ b_{k\sigma} &= \\ & = \sum_{\lambda} \left[\Phi_{\lambda k\sigma}^{12} (-\varphi_{k\sigma}) Z_{\lambda k\sigma} + \Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{21} (\varphi_{k\bar{\sigma}}) Z_{\lambda k\bar{\sigma}} \right], \\ \Lambda_{k\sigma} &= \\ & = \sum_{\lambda} \left[\Phi_{\lambda k\sigma}^{34} (2\sigma\phi) Z_{\lambda k\sigma} + \Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{43} (2\sigma\phi) Z_{\lambda k\bar{\sigma}} \right], \\ \chi_{k\sigma} &= \\ & = \sum_{\lambda} \left[\Phi_{\lambda k\sigma}^{34} (2\sigma\phi) Z_{\lambda k\sigma} - \Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{43} (2\sigma\phi) Z_{\lambda k\bar{\sigma}} \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

4. УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

Диагонализация гамильтониана посредством преобразования (28) позволяет простым образом вычислить все средние от исходных операторов.

Последнее необходимо для получения замкнутой системы интегральных уравнений для семи параметров согласования: μ , λ , R_{\parallel} , m_{\parallel} , e_0 , R_{\perp} , m_{\perp} . Так, выражения для функций распределения локализованных и коллективизированных электронов имеют вид

$$\langle \Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma} \rangle = \sum_{\lambda} |\Phi_{\lambda k\sigma}^{34}(2\sigma\phi)|^2 f(E_{\lambda k\sigma}) + \sum_{\lambda} |\Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{43}(2\sigma\phi)|^2 f(E_{\lambda k\bar{\sigma}}), \quad (29)$$

$$\langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle = \sum_{\lambda} |\Phi_{\lambda k\sigma}^{12}(-\varphi_{k\sigma})|^2 f(E_{\lambda k\sigma}) + \sum_{\lambda} |\Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{21}(\varphi_{k\bar{\sigma}})|^2 f(E_{\lambda k\bar{\sigma}}), \quad (30)$$

где $f(x) = 1/(\exp((x - \mu)/T) + 1)$ — функция распределения Ферми–Дирака. В силу эквивалентности магнитных подрешеток

$$\langle \Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma} \rangle = \langle \chi_{k\sigma}^+ \chi_{k\sigma} \rangle, \quad \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle = \langle b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} \rangle.$$

Корреляционные функции (29) и (30) используются в первых четырех уравнениях самосогласования для параметров μ , λ , R_{\parallel} и m_{\parallel} :

$$\begin{aligned} n &= 2 \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} (\langle \Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma} \rangle + \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle), \\ \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle \Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma} \rangle &= 1 - e_0^2, \\ R_{\parallel} &= \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sigma \langle \Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\sigma} \rangle, \\ m_{\parallel} &= \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sigma \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle, \end{aligned} \quad (31)$$

где n — полное число электронов в системе.

Как известно, при использовании слеив-бозонного описания тяжелых фермионов эффективное значение гибридизации становится зависящим от внешних параметров (температура, значение магнитного поля и т. д.) [39]. Эта зависимость появляется из-за ренормирующего множителя e_0^2 , стоящего перед параметром гибридизации в уравнениях для функций Грина и, как следствие, в уравнениях самосогласования. Обычно уравнение для отмеченного ренормирующего множителя получается из условия минимума свободной энергии. В нашем случае это уравнение приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned} -\lambda e_0 &= \frac{1}{N} \times \\ &\times \sum_{\lambda k\sigma} V_k \left[(\Phi_{\lambda k\sigma}^{12}(-\varphi_{k\sigma}))^* \Phi_{\lambda k\sigma}^{34}(2\sigma\phi) f(E_{\lambda k\sigma}) - \right. \\ &\left. - (\Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{21}(\varphi_{k\bar{\sigma}}))^* \Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{43}(2\sigma\phi) f(E_{\lambda k\bar{\sigma}}) \right]. \quad (32) \end{aligned}$$

Оставшиеся два параметра порядка R_{\perp} , m_{\perp} , определяющие поперечные компоненты намагниченностей локализованных и коллективизированных электронов, находятся из решения уравнений самосогласования:

$$\begin{aligned} R_{\perp} &= \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle \Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\bar{\sigma}} \rangle, \\ m_{\perp} &= \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\bar{\sigma}} \rangle, \end{aligned} \quad (33)$$

где средние при учете (28) записываются в виде

$$\begin{aligned} \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\bar{\sigma}} \rangle &= \\ &= - \sum_{\lambda} (\Phi_{\lambda k\sigma}^{12}(-\varphi_{k\sigma}))^* \Phi_{\lambda k\sigma}^{21}(\varphi_{k\sigma}) f(E_{\lambda k\sigma}) - \\ &- \sum_{\lambda} (\Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{21}(\varphi_{k\bar{\sigma}}))^* \Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{12}(-\varphi_{k\bar{\sigma}}) f(E_{\lambda k\bar{\sigma}}), \quad (34) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Lambda_{k\sigma}^+ \Lambda_{k\bar{\sigma}} \rangle &= \\ &= \sum_{\lambda} (\Phi_{\lambda k\sigma}^{34}(2\sigma\phi))^* \Phi_{\lambda k\sigma}^{43}(-2\sigma\phi) f(E_{\lambda k\sigma}) + \\ &+ \sum_{\lambda} (\Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{43}(2\sigma\phi))^* \Phi_{\lambda k\bar{\sigma}}^{34}(-2\sigma\phi) f(E_{\lambda k\bar{\sigma}}). \quad (35) \end{aligned}$$

Уравнения (31)–(35) представляют систему семи интегральных уравнений, применяемую далее для самосогласованного расчета низкотемпературной термодинамики тяжелофермионных интерметаллидов в скошенной магнитным полем АФМ-фазе.

5. СТРУКТУРА ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ И СПЕКТРА ФЕРМИЕВСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ РАМ В СКОШЕННОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ ФАЗЕ

При численных расчетах предполагалось, что упорядочение ионов соответствует объемноцентрированной кубической решетке, а затравочная зона проводимости формируется на основе перескоков между ближайшими соседями с интегралом туннелирования t_1 . В этом случае

$$\begin{aligned} \Gamma_k &= 8t_1 \cos\left(\frac{k_x b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z b}{2}\right), \\ t_k &= 0, \end{aligned} \quad (36)$$

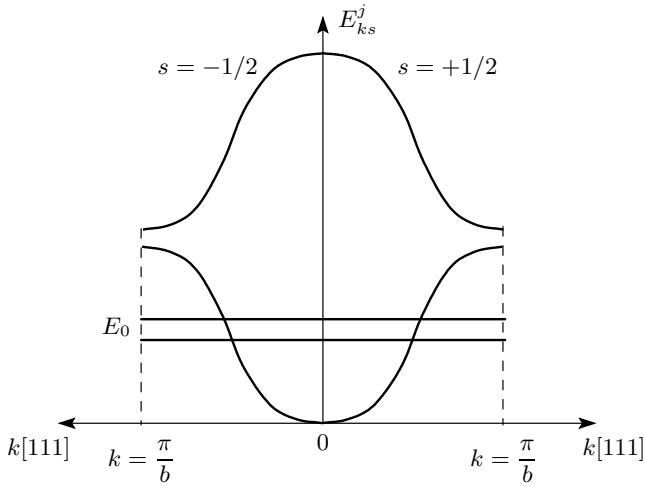


Рис. 2. Качественный вид затравочной зонной структуры ПАМ в АФМ-фазе

где b — параметр магнитной решетки. Для упрощения вычислений учитывались только такие s - f -обменные процессы между локализованными и коллективизированными состояниями электронов, которые происходят в пределах одной ячейки. Аналогичное упрощение принято и в отношении процессов гибридизации. Эти ограничения приводят к следующим равенствам: $V_q = V$, $W_q = 0$, $J_q = J$, $L_q = 0$, где V и J — значения соответственно параметра гибридизации и s - f -обменного интеграла. Для исключения эффектов фрустрации в подсистеме локализованных электронов считалось, что обменная связь осуществляется только между ближайшими спинами из разных подрешеток. Таким образом: $I_q = 0$, а $K_q = 8K_1 \cos(q_x b/2) \cos(q_y b/2) \cos(q_z b/2)$, где K_1 — обменный интеграл для ближайших соседей. В дальнейшем все энергетические параметры будут измеряться в единицах $|t_1|$ ($t_1 < 0$).

В качестве отправной точки приведем в схематическом виде спектр фермиевских возбуждений в АФМ-фазе при $H = 0$. Этот спектр определяется решениями дисперсионного уравнения (25) и на качественном уровне без учета процессов гибридизации показан на рис. 2. Правая сторона рисунка демонстрирует спектр для $\sigma = +1/2$, а левая — для $\sigma = -1/2$. Четыре ветви спектра $E_{\lambda k \sigma}$ ($\lambda = 1, 2, 3, 4$) вырождены по значению квантового числа σ (левые и правые ветви рисунка идентичны). Прямые линии соответствуют расщепленным обменным полем \bar{H}_Δ энергетическим уровням локализованных состояний f -подсистемы с затравочной энергией E_0 . Для наглядности расщепление уровней на рис. 2 показан

но большим. В действительности же \bar{H}_Δ на два-три порядка меньше ширины зоны. Дисперсные линии отражают затравочный спектр коллективизированных электронов. Удвоение числа ветвей этого спектра по сравнению с парамагнитным случаем связано с АФМ-структурой, при которой происходит соответствующее уменьшение размеров зоны Бриллюэна. Изменение квазиимпульса выбрано вдоль направления [111]. Для других направлений качественная картина идентична.

При дальнейшем анализе ограничимся случаем, когда локализованный уровень, как и на рис. 2, находится в пределах нижней половины затравочной зоны коллективизированных электронов, а химический потенциал расположен в непосредственной окрестности этого уровня. Поскольку эффективное поле \bar{H}_Δ , определяющее энергию расщепления f -состояний, много меньше ширины зоны проводимости, наиболее существенные изменения энергетического спектра при включении гибридных процессов и скашивании магнитных подрешеток происходят только вблизи энергии E_0 . Имея это в виду, при обсуждении влияния магнитного поля будем акцентировать внимание только на модификации фермиевского спектра в непосредственной окрестности этой энергетической области. Особая актуальность такого анализа связана с тем, что модификация энергетического спектра в отмеченной области определяет все особенности низкотемпературной термодинамики тяжелых фермионов в антиферромагнитной скошенной фазе, тогда как самые верхние ветви спектра с $\lambda = 4$ не дают вклада в термодинамические характеристики системы.

Прежде чем переходить к анализу рассчитанных самосогласованным образом дисперсионных зависимостей, остановимся на особенности температурного поведения ключевого параметра теории слэив-бозонов — ϵ_0^2 . К настоящему времени хорошо установлено, что в парамагнитной фазе самосогласованное решение для ϵ_0^2 приводит к его монотонному уменьшению. При этом в теории появляется важный энергетический параметр T^* , определяющий температуру, при которой ϵ_0^2 обращается в нуль. При $T < T^*$ система находится в когерентном режиме. В приближении прямоугольной плотности фермиевских состояний с полушириной зоны D

$$T^* = 2 \frac{e^C}{\pi} \sqrt{D^2 - \mu^2} \exp \left\{ -\frac{\lambda D}{V^2} \right\},$$

где $C = 0.577$ — постоянная Эйлера. При этом температура Кондо значительно превышает T^* .

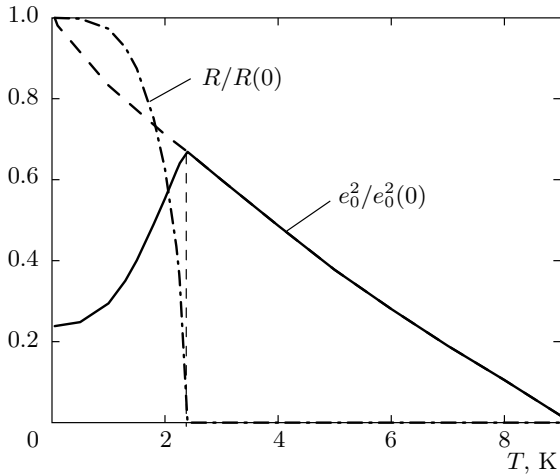


Рис. 3. Температурные зависимости относительных величин: ренормировочного параметра e_0^2 и подрешеточной намагниченности для $|t_1| = 1$ эВ

При наличии обменных взаимодействий между локализованными спиновыми моментами и возникновении дальнего магнитного порядка ситуация, как показали самосогласованные численные расчеты, становится несколько иной. Это связано с тем, что в системе появился новый энергетический масштаб: в нашем случае — температура Нееля T_N . Оказалось, что температурная зависимость e_0^2 в магнитоупорядоченной фазе имеет характер монотонного увеличения. Эта ситуация продемонстрирована на рис. 3, полученном в результате самосогласованного решения представленной выше системы интегральных уравнений при следующих параметрах: $E_0 = -4$, $V = 0.53$, $K_0 = 0.002$, $J_0 = 0.002$, $n = 2.4$. Видно, что в точке магнитного упорядочения происходят смена температурной зависимости e_0^2 и переход к типичному парамагнитному поведению. При этом температура Нееля всегда оказывается меньше температуры когерентности. Следует подчеркнуть, что представленная зависимость является типичной и реализуется и при других параметрах модели.

На рис. 4 для АФМ-фазы показан спектр в окрестности локализованного уровня, рассчитанный на основе дисперсионного уравнения (25) и системы уравнений самосогласования (31)–(35) для трех значений температуры. Параметры модели выбирались следующими: $E_0 = -4$, $V = 0.4$, $K_0 = 0.02$, $J_0 = 0.5$, $n = 2.2$, магнитное поле $H = 0$. Приведенное на рисунке значение температуры Нееля, равное 23 К (для UPd_2Al_3 $T_N = 14.5$ К [40], для $CeRh_2Si_2$ — $T_N = 35$ К [41]) соответствует выбо-

ру ширины затравочной зоны проводимости, равной 16 эВ ($|t_1| = 1$ эВ). При выборе меньших значений ширины этой зоны будет иметь место пропорциональное уменьшение температуры Нееля. На графиках, приведенных ниже, используется аналогичное масштабирование энергетических величин. Наиболее существенная особенность представленного спектра заключается в наличии узкой зоны тяжелых квазичастиц, отделенной как снизу, так и сверху энергетическими щелями. Этим данная картина спектра принципиально отличается от структуры спектра ТФ в парамагнитной фазе, когда энергетический спектр тяжелых квазичастиц только с одной стороны отделен энергетической щелью.

Ширина отщепленной зоны ТФ имеет порядок величины \tilde{H}_Δ и, как видно из условий (14), задается обменными параметрами, а также значениями магнитных моментов локализованной и коллективизированной подсистем. На рис. 4б представлена соответствующая плотность электронных состояний в окрестности локализованного уровня в том же энергетическом масштабе, что и спектр на рис. 4а.

Сравнивая рис. 4в–е с рис. 4а и 4б, можно проследить за температурной эволюцией зонной структуры. В частности, видно, что по мере увеличения температуры ширина узкой зоны постепенно уменьшается, а химический потенциал, первоначально лежащий внутри этой зоны, опускается ниже ее дна. При температуре порядка 19 К узкая зона вырождается в уровень, а с дальнейшим увеличением температуры эта зона инвертируется (рис. 4в). В результате инверсии максимуму дисперсии узкой зоны ($E_{2k\sigma}$) соответствует состояние в центре зоны Бриллюэна. Инверсия узкой зоны сопровождается значительным уменьшением средней намагниченности локализованных электронов R . По мере приближения температуры к T_N нижняя щель (между зонами с $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$) уменьшается и обращается в нуль (рис. 4д, 4е), а верхняя (гибридизационная щель парафазы) остается.

Включение внешнего магнитного поля H вызывает скос векторов намагниченностей подрешеток. Из-за s - f -обменной связи между электронами коллективизированной и локализованной подсистем этот скос индуцирует изменение спектральных характеристик системы. Характер этих изменений в окрестности локализованного уровня продемонстрирован на рис. 5. Параметры модели выбраны такими же, как и в предыдущем расчете, а температура фиксирована, $T = 1$ К. Поле спин-флип-перехода для выбранных параметров оказывается равным $\mu_B H_c = 8.1 \cdot 10^{-3}$. На рис. 5а показан спектр квази-

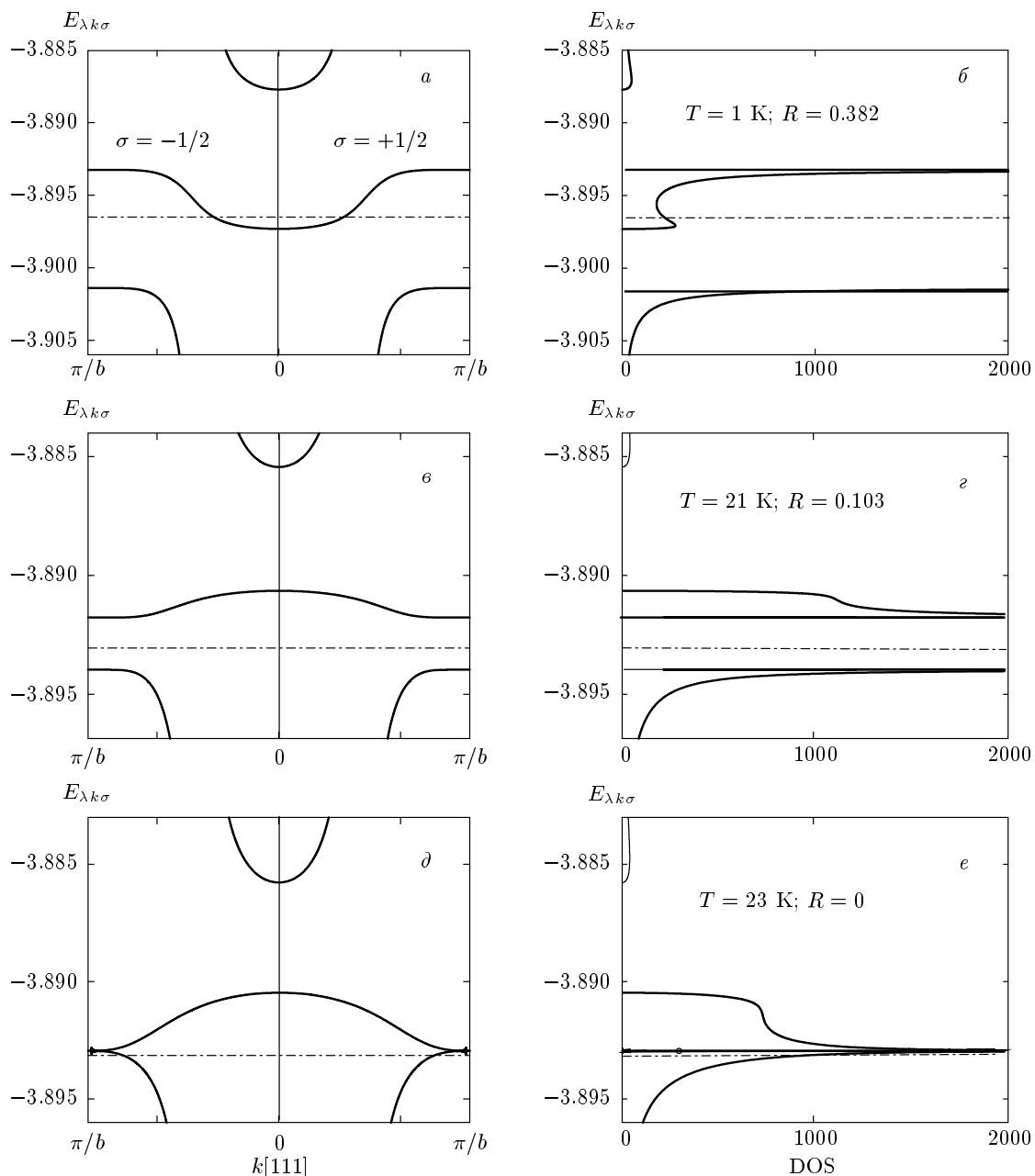


Рис. 4. Температурная эволюция фермиевского спектра (*a, б, д*) и плотности электронных состояний (*б, з, е*) для РАМ в AFM-фазе в окрестности локализованного уровня. Штрихпунктирной линией обозначен химический потенциал. Температура Нееля $T_N \approx 23$ К

частиц, рассчитанный при $H/H_c = 0.214$. Сравнение этого спектра со спектром, рассчитанным для $H = 0$ (рис. 4а), показывает, что изменение спектра проявляется в двух моментах. Первая модификация имеет простую природу и связана со снятием вырождения по квантовому числу σ . Вторая особенность связана с тем, что если для $\sigma = -1/2$ на первой ($\lambda = 1$) и второй ($\lambda = 2$) ветвях спектра выделяются обла-

сти, которые сближаются при увеличении магнитного поля, то для $\sigma = +1/2$ аналогичное сближение реализуется между второй ($\lambda = 2$) и третьей ($\lambda = 3$) ветвями. По мере увеличения магнитного поля отмеченное сближение участков спектра усиливается (рис. 5б). При $H = H_c$ (рис. 5в) происходит касание первой и второй ветвей спектра для $\sigma = -1/2$, а также второй и третьей ветвей для $\sigma = +1/2$. В резуль-

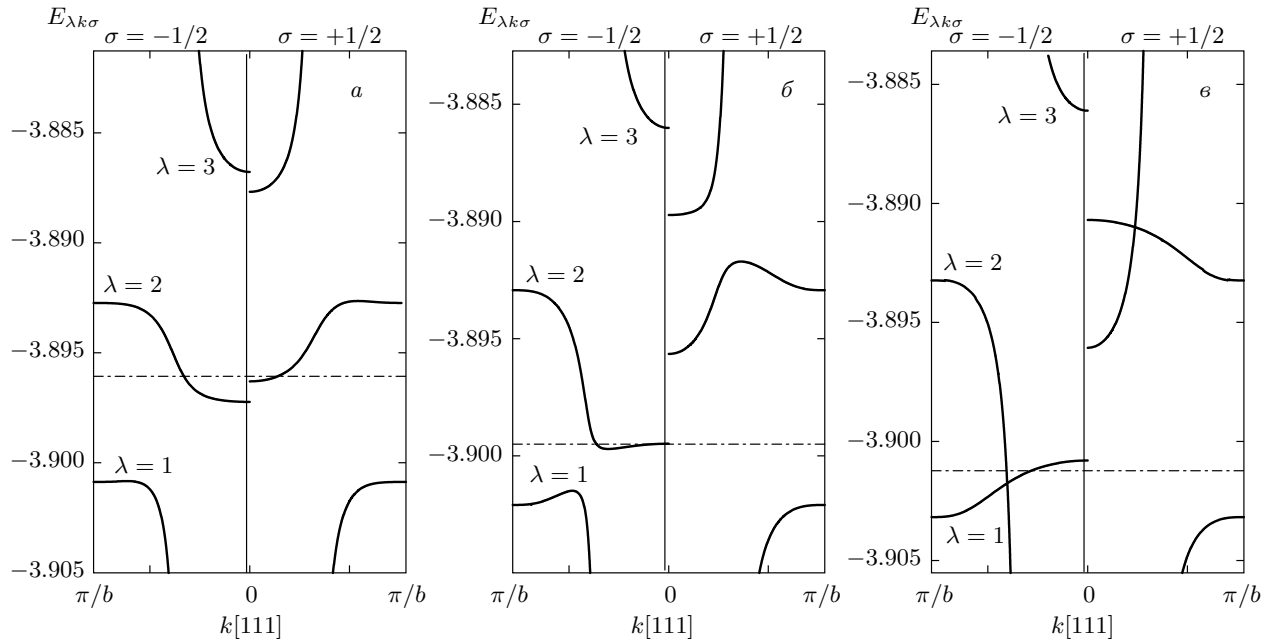


Рис. 5. Спектр квазичастиц ТФ-антиферромагнетика в скошенной фазе в окрестности локализованного уровня при различных значениях магнитного поля: а) $H/H_c = 0.214$, $R = 0.379$; б) $H/H_c = 0.821$, $R = 0.391$; в) $H/H_c = 1$, $R = 0.393$. Штрихпунктирной линией показано положение химического потенциала

тате получается структура спектра, соответствующая спектру ферромагнитной фазы, когда расщепление по проекции спинового момента σ индуцируется действием эффективного поля. Заметим, что это возникает при том самом значении магнитного поля, когда вектор антиферромагнетизма обращается в нуль.

Анализ дисперсионных кривых, представленных на рис. 4, 5, показывает, что отличительной чертой спектра фермиевских квазичастиц в скошенной АФМ-фазе по сравнению со спектром ТФ в пара- и ферромагнитной фазах является наличие узкой отщепленной зоны $E_{2k\sigma}$, структура которой весьма чувствительна к небольшим изменениям температуры и магнитного поля. Масштаб ширины отщепленной зоны, как и масштаб полей и температур, существенно влияющих на эту зону, определяется величиной обменных и s - f -обменных интегралов, а также значением намагниченности R . В том случае, когда химический потенциал лежит в этой узкой зоне, низкотемпературная термодинамика системы в существенной степени определяется спектром $E_{2k\sigma}$.

Представленные результаты для коллинеарной и скошенной антиферромагнитных фаз были получены на основе численного решения двух ($\sigma = \pm 1/2$) дисперсионных уравнений четвертого порядка (25),

описывающих спектр фермиевских возбуждений $E_{\lambda k \sigma}$ при произвольных соотношениях между параметрами. В важном для практических приложений случае, когда характерная энергия расщепления много меньше ширины затравочной зоны проводимости ($\bar{H}_\Lambda \ll W$), выражения для спектра тяжелых фермионов, описываемых ветвями $E_{2k\sigma}$, могут быть получены в аналитическом виде. Действительно, если $\bar{H}_\Lambda \ll W$, то с хорошей точностью $\xi_{k\sigma}^\pm = \pm |\Gamma_k|$. Тогда, при нахождении спектра элементарных возбуждений в окрестности локализованного уровня энергии $\zeta = E_0 + \lambda$ в дисперсионном уравнении (25) можно положить $(\omega - \xi_{k\sigma}^\pm) \approx (\zeta \mp |\Gamma_k|)$. При этом дисперсионное уравнение (25) приобретает форму квадратного уравнения, а два его решения

$$\begin{aligned} \Omega_{k\sigma}^\pm &= \zeta(1 - \gamma_k) \pm \eta_{k\sigma}, \\ \gamma_k &= |\tilde{V}_k|^2 / (\Gamma_k^2 - \zeta^2), \\ \eta_{k\sigma} &= \{(\gamma_k \Gamma_k)^2 + \gamma_k (\Delta_\perp h_\perp - 2\sigma h_\parallel \Gamma_k - \\ &\quad - h_\parallel (J_0 R_\parallel - 2\mu_B H)/2) + \bar{H}_\Lambda^2/4\}^{1/2} \end{aligned} \tag{37}$$

описывают дисперсию фермиевских возбуждений в отмеченной энергетической области. На правой стороне рис. 6 сплошными (штриховыми) линия-

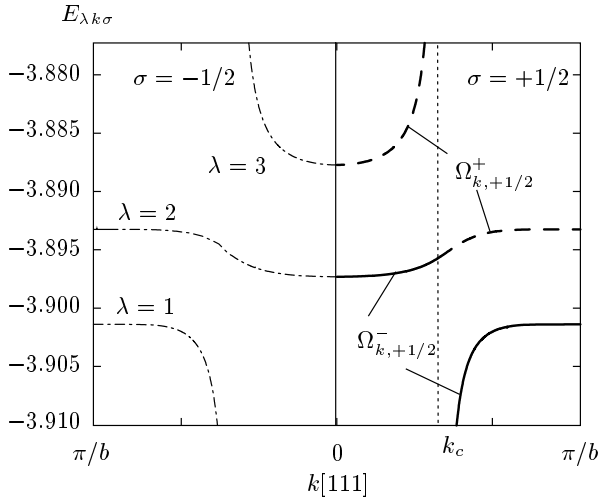


Рис. 6. Спектр квазичастиц ТФ-антиферромагнетика в коллинеарной АФМ-фазе в окрестности локализованного уровня, рассчитанный из дисперсионного уравнения четвертой степени (25) (при $\sigma = -1/2$) и по формуле (37) (при $\sigma = +1/2$)

ми показано поведение энергетического спектра, определяемого решениями $\Omega_{k,+1/2}^-$ ($\Omega_{k,+1/2}^+$). Параметры модели выбирались такими же, как и при расчете графиков на рис. 4 и 5. При этом поле $H = 0$, а температура $T = 1$ К. На левой стороне рис. 6 штрихпунктирной линией показаны ветви спектра $E_{\lambda k, -1/2}$, рассчитанные из дисперсионного уравнения (25). В коллинеарной АФМ-фазе спектр вырожден по значению квантового числа σ : $E_{\lambda k, -1/2} = E_{\lambda k, +1/2}$. Поэтому если рассматриваемое приближение оправдано, то дисперсионные зависимости на левой и правой сторонах рис. 6 должны совпадать. Из сравнения кривых видно, что поведение энергетического спектра в окрестности локализованного уровня, описываемое аналитическими выражениями (37), практически неотличимо от спектра, определяемого на основе точного решения дисперсионного уравнения. Расхождение возникает лишь в области энергий, выходящей за окрестность ζ , и на данном рисунке не проявляется.

Заметим, что изображение средней дисперсионной кривой на правой стороне рис. 6, представленное сплошной линией, переходящей в пунктирную, связано с разрывным характером решений (37) в точке $k = k_c$, где γ_k меняет знак. При этом в области $k < k_c$ ветвь $\Omega_{k,\sigma}^+$ соответствует ветви $E_{3k\sigma}$, а при $k > k_c$ — ветви с $\lambda = 2$. Ветвь $\Omega_{k,\sigma}^-$ при $k < k_c$ соответствует ветви $E_{2k\sigma}$, а в области больших значений квазиимпульса соответствует ветви $E_{1k\sigma}$. Учти-

таявая такое поведение, аналитическое выражение для спектра отщепленной зоны тяжелых фермионов можно представить в следующем виде:

$$E_{2k\sigma} = \zeta(1 - \gamma_k) - \text{sign}(\gamma_k)\eta_{k\sigma}. \quad (38)$$

Подчеркнем, что это выражение справедливо во всей области магнитных полей, когда реализуется скошенная фаза антиферромагнитного интерметаллида. Все представленные выше на рис. 4, 5 дисперсионные кривые с $\lambda = 2$ практически точно описываются аналитическим выражением (38).

Для частных случаев антиферромагнитной (АФМ), ферромагнитной (FM) и парамагнитной (PM) фаз из уравнения (38) получаем

$$E_{2k\sigma}^{AFM} = \zeta(1 - \gamma_k) - \text{sign}(\gamma_k) \times \left\{ (\gamma_k \Gamma_k)^2 + \gamma_k \Delta_{\perp} h_{\perp} + h_{\perp}^2 / 4 \right\}^{1/2},$$

$$E_{2k\sigma}^{FM} = \zeta(1 - \gamma_k) - \text{sign}(\gamma_k) \left\{ (\gamma_k \Gamma_k - \sigma h_{\parallel})^2 - \frac{h_{\parallel} \gamma_k}{2} (J_0 R_{\parallel} - 2\mu_B H) \right\}^{1/2}, \quad H \geq H_c,$$

$$E_{2k\sigma}^{PM} = \zeta + \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\Gamma_k + \zeta}.$$

Формула (38) позволяет также найти выражение для эффективной массы m^* тяжелых квазичастиц в скошенной АФМ-фазе. Раскладывая (38) в окрестности малых k , находим

$$\frac{m^*}{m_0} = \frac{\Gamma_0^2 - \zeta^2}{|\Gamma_0| \gamma_0} \times \left\{ 2|\zeta| - \left[\Delta_{\perp} h_{\perp} - h_{\parallel} (J_0 R_{\parallel} - 2\mu_B H) / 2 + (\Gamma_0^2 + \zeta^2) \left(\gamma_0 + \sigma \frac{h_{\parallel}}{|\Gamma_0|} \right) \right] / \eta_{0\sigma} \right\}^{-1}, \quad (40)$$

где m_0 — эффективная масса затравочных коллективизированных электронов вблизи дна зоны. Для закона дисперсии (36) m_0 определяется из выражения $\hbar^2 / 2m_0 b^2 = |t_1|$. В парамагнитной фазе для эффективной массы тяжелых квазичастиц получаем особенно простое выражение:

$$\frac{m_{PM}}{m_0} = - \frac{(|\Gamma_0| + |\zeta|)^2}{|V|^2 (1 - n_f)}. \quad (41)$$

Отрицательность значения массы определяет дырочный характер тяжелых квазичастиц парафазы.

6. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЯЖЕЛОФЕРМИОННЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ В СКОШЕННОЙ АФМ-ФАЗЕ

Численный анализ уравнений самосогласования показывает, что для заданного набора параметров модели и внешних условий может реализоваться несколько устойчивых фаз. Выбор стабильного из метастабильных состояний осуществлялся по наименьшему значению свободной энергии. Принимая во внимание соотношения (7) и (22), запишем выражение для свободной энергии:

$$F(T, V, N) = -T \sum_{\lambda=1}^4 \sum_{k\sigma} \ln \left(1 + \exp \left\{ -\frac{E_{\lambda k\sigma} + \mu}{T} \right\} \right) + C + \mu N. \quad (42)$$

Из расчетов следует, что интенсивность гибридизационных процессов влияет на результат конкуренции между АФМ- и РМ-фазами. Смена типа состояния при возрастании параметра гибридизации продемонстрирована на рис. 7. Расчеты проводились при следующих параметрах: $E_0 = -2$, $K_0 = 0.02$, $J_0 = 0.5$, $n = 2.8$, $T = 1$ К и $H = 0$. Из рис. 7 следует, что при величине гибридизации меньшей $V_c \approx 0.43$ стабильной является АФМ-фаза, обладающая наибольшей намагниченностью. Если же $V > V_c$, то стабильной фазе соответствует парамагнитное решение с $R = 0$, а решения АФМ-типа становятся метастабильными. Рассмотренное изменение стабильной фазы системы при увеличении параметра гибридизации представляет собой частный случай перехода первого рода по параметру взаимодействия. Для нулевого значения температуры это соответствовало бы квантовому фазовому переходу. Зная характер изменения структуры основного состояния системы при увеличении V , можно описать эволюцию зонной структуры при возрастании интенсивности гибридизационных процессов. При малых значениях V спектр фермиевских возбуждений в окрестности локализованного уровня имеет вид, характерный для антиферромагнитного упорядочения системы (см. рис. 4а). С увеличением параметра гибридизации узкая зона сужается, а гибридизационные щели увеличиваются. При $V = V_c$, когда происходит смена типа основного состояния с антиферромагнитного на парамагнитное, спектр элементарных возбуждений приобретает вид, показанный на рис. 4д. Подчеркнем, что в данном случае существенная модификация энергетического спектра, соответствующе-

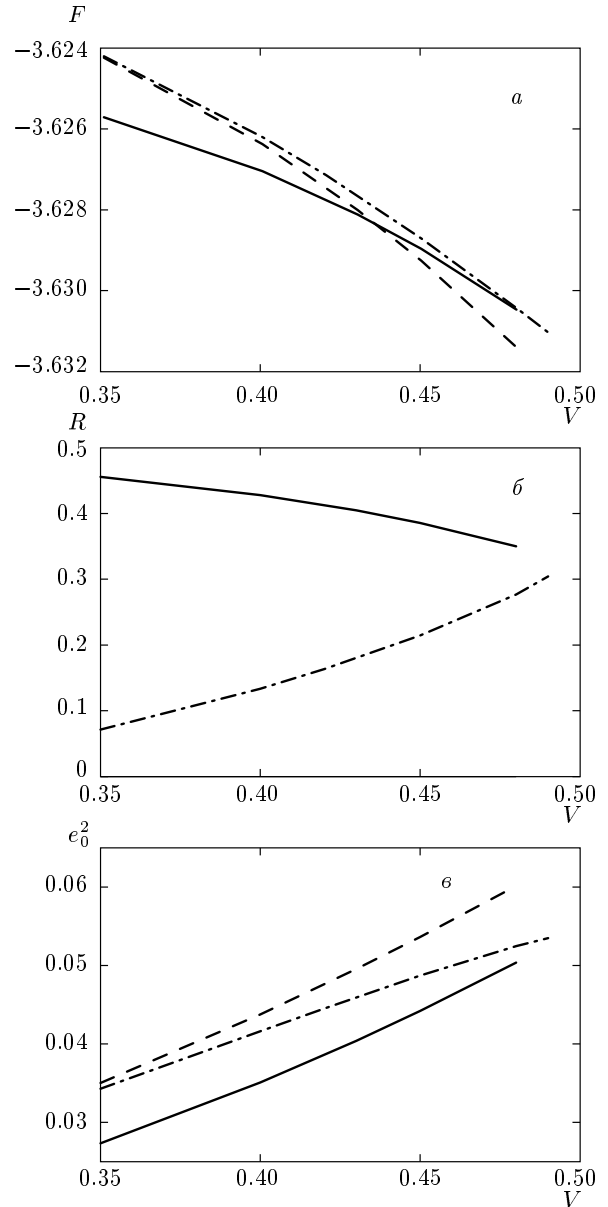


Рис. 7. а) Свободная энергия парамагнитного (штриховая линия) и двух АФМ (сплошная и штрихпунктирная линии) решений; б) поведение параметров порядка для двух АФМ-фаз; е) ренормировочный параметр e_0^2

го состояниям с тяжелыми фермионами, происходит за счет эволюции дальнего АФМ-порядка, вызванного изменением гибридизационного параметра. Перестройка магнитного упорядочения в локализованной подсистеме навязывает изменение в спектральных свойствах фермиевских квазичастиц. При этом величина гибридизации выступает в роли контрольного параметра, управляющего величиной намагни-

ченности подрешеток.

Описанный сценарий скачкообразного изменения структуры основного состояния локализованной подсистемы при возрастании параметра гибридизации не является единственным. Выбирая иные значения параметров модели, можно реализовать такую ситуацию, когда AFM-состояние остается стабильной фазой вплоть до самых малых значений намагниченности подрешетки. Это означает, что переход из магнитного упорядочения в парамагнитное состояние может происходить посредством перехода второго рода или посредством фазового перехода первого рода, близкого ко второму. Такой тип эволюции характеристик стабильной фазы продемонстрирован на рис. 8. В данном случае при проведении расчетов были изменены только значение затравочной энергии локализованного уровня и концентрация электронов: $E_0 = -4$ и $n = 2.2$. Остальные параметры модели выбирались такими же, как и при расчетах графиков рис. 7. Видно, что при всех значениях V решение, описывающее дальний магнитный порядок, обладает меньшей энергией, чем парамагнитное. Однако величина магнитного момента R уменьшается с $R = 0.45$ (при $V = 0.1$) до $R = 0.06$ (при $V = 0.7$). В этой связи заметим, что именно такие малые значения намагниченности подрешетки экспериментально наблюдаются во многих ТФ-антиферромагнетиках.

Проведенный анализ спектра фермиевских возбуждений в AFM-фазе соответствует такой концентрации электронов, когда химический потенциал μ находится в пределах узкой отщепленной зоны. Именно в этом случае выполняются условия существования антиферромагнитного решения. При уменьшении концентрации n электронов происходят опустошение локализованных состояний и уменьшение подрешеточной намагниченности R . Возникающие при этом изменения структуры спектра и плотности состояний системы в окрестности локализованного уровня продемонстрированы на рис. 9. Параметры модели при расчете этих графиков имели следующие значения: $E_0 = -4$, $V = 0.7$, $K_0 = 0.02$, $J_0 = 0.5$. Температура выбиралась равной одному Кельвину, а магнитное поле отсутствовало. При $n = 2.4$ (рис. 9а,б) химический потенциал находится примерно в середине узкой зоны между пиками плотности состояний (см. штрихпунктирную линию). Система обладает дальним AFM-порядком с большим значением магнитного момента редкоземельного иона: $R = 0.460$. Уменьшение концентрации до $n = 2.2$ (рис. 9в,г) приводит не только к понижению химического потенциала μ , но и к суще-

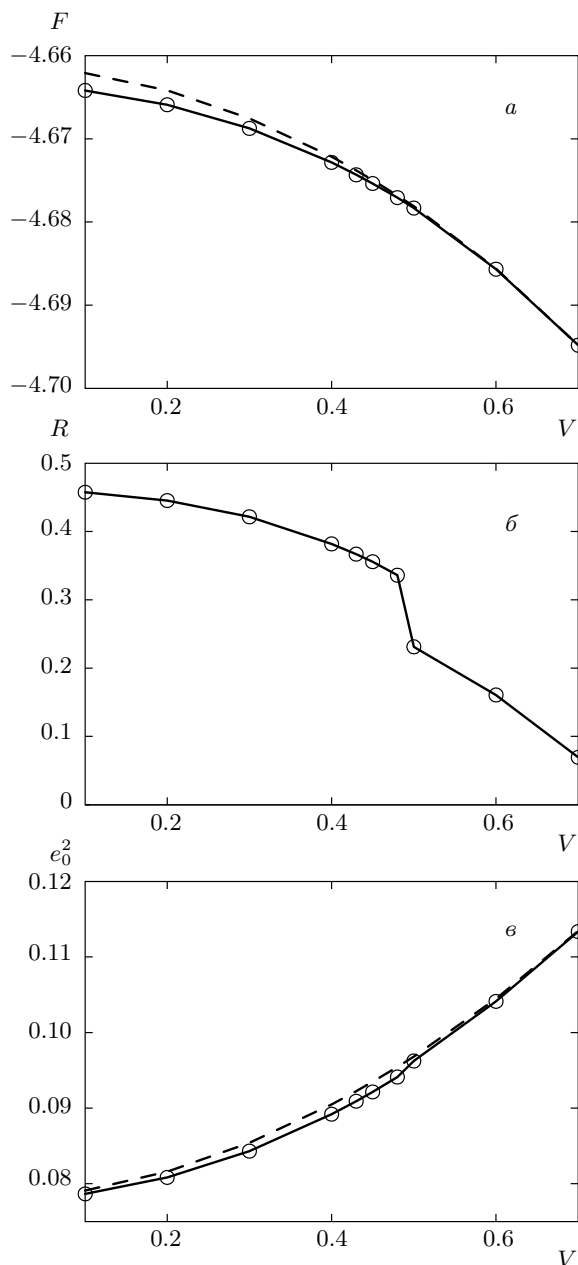


Рис. 8. Зависимости свободной энергии F (а), параметра AFM-порядка R (б) и ренормировочного параметра (в) от величины гибридизации V для парамагнитного решения — штриховая линия и AFM-решения — сплошная линия

ственной перестройке характера дисперсионной зависимости узкой зоны, проявляющейся как изменение ее кривизны (инверсия узкой зоны). При этом верхняя щель увеличивается, а нижняя — уменьшается, но остается конечной. С физической точки зрения, обнаруженная инверсия узкой зоны означает изменение знака эффективной массы.

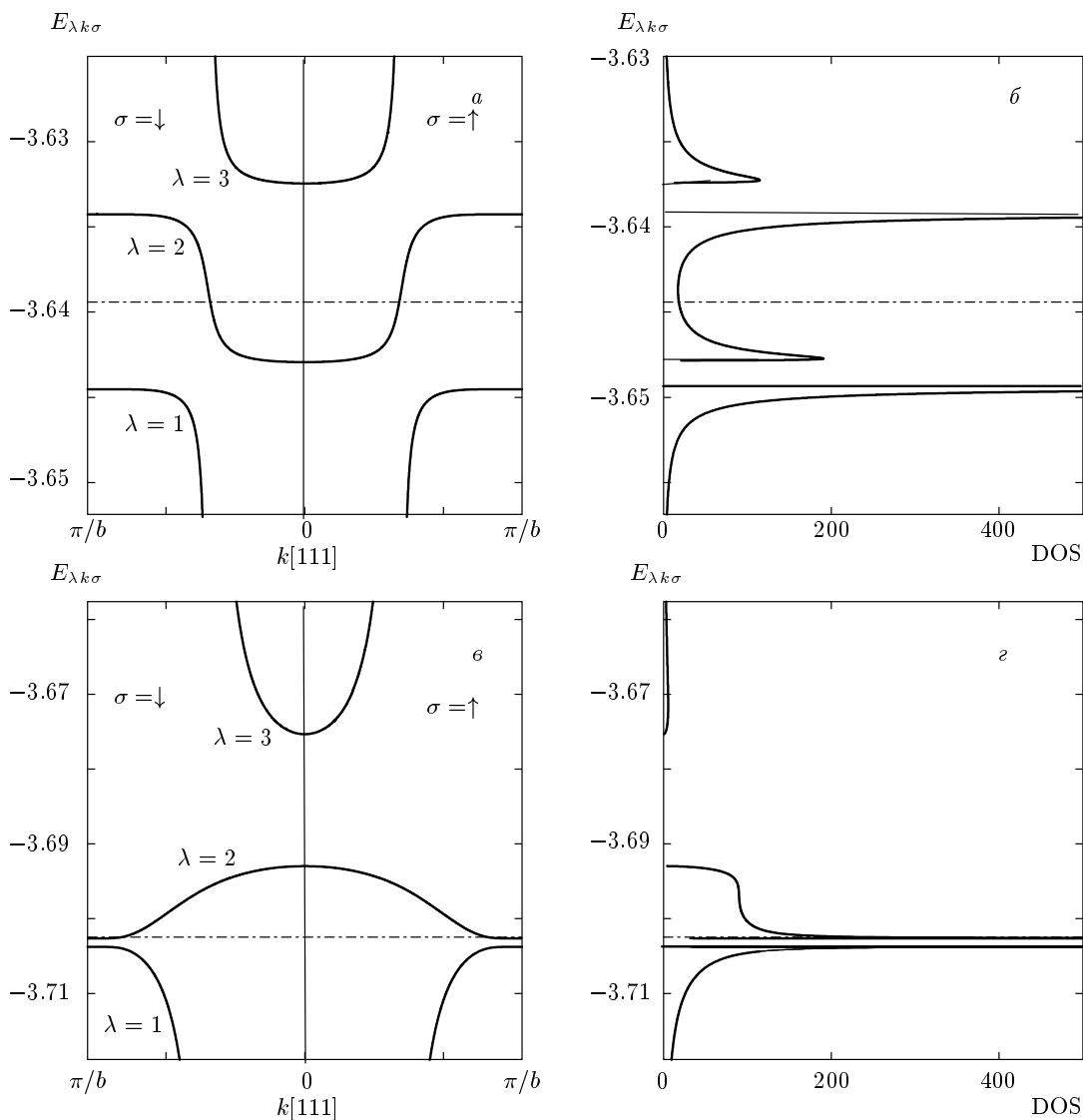


Рис. 9. Спектр квазичастиц и плотность состояний в окрестности локализованного уровня при $n = 2.4$, $R = 0.460$ (а,б); $n = 2.2$, $R = 0.061$ (в,г)

Как следует из представленных расчетов, уменьшение концентрации n приводит к существенному подавлению магнитного момента до значения $R = 0,061$, которое, как уже отмечалось, хорошо коррелирует со значениями намагниченности во многих ТФ-антиферромагнетиках. Другой важный аспект связан с тем, что химический потенциал смещается так, что попадает на пик плотности состояний (рис. 9г). Это способствует возникновению состояний с тяжелыми фермионами и оказывает решающее влияние на термодинамические свойства системы, в частности, на значение электронной теплоемкости ТФ-антиферромагнетиков.

На рис. 10 представлены результаты решения системы уравнений самосогласования при различных значениях температуры. Приведенные зависимости намагниченности подрешетки R , теплоемкости системы C и константы Зоммерфельда $\gamma = C/T$ в нулевом магнитном поле получены для двух значений концентрации электронов: $n = 2.4$ и $n = 2.2$. При этом другие параметры модели были такими же, как и при построении графиков рис. 9. Из сравнения рис. 10а и 10г следует, что при уменьшении концентрации, сопровождающейся смещением химического потенциала в сторону пика плотности состояний (см. предыдущий рисунок и комментарии

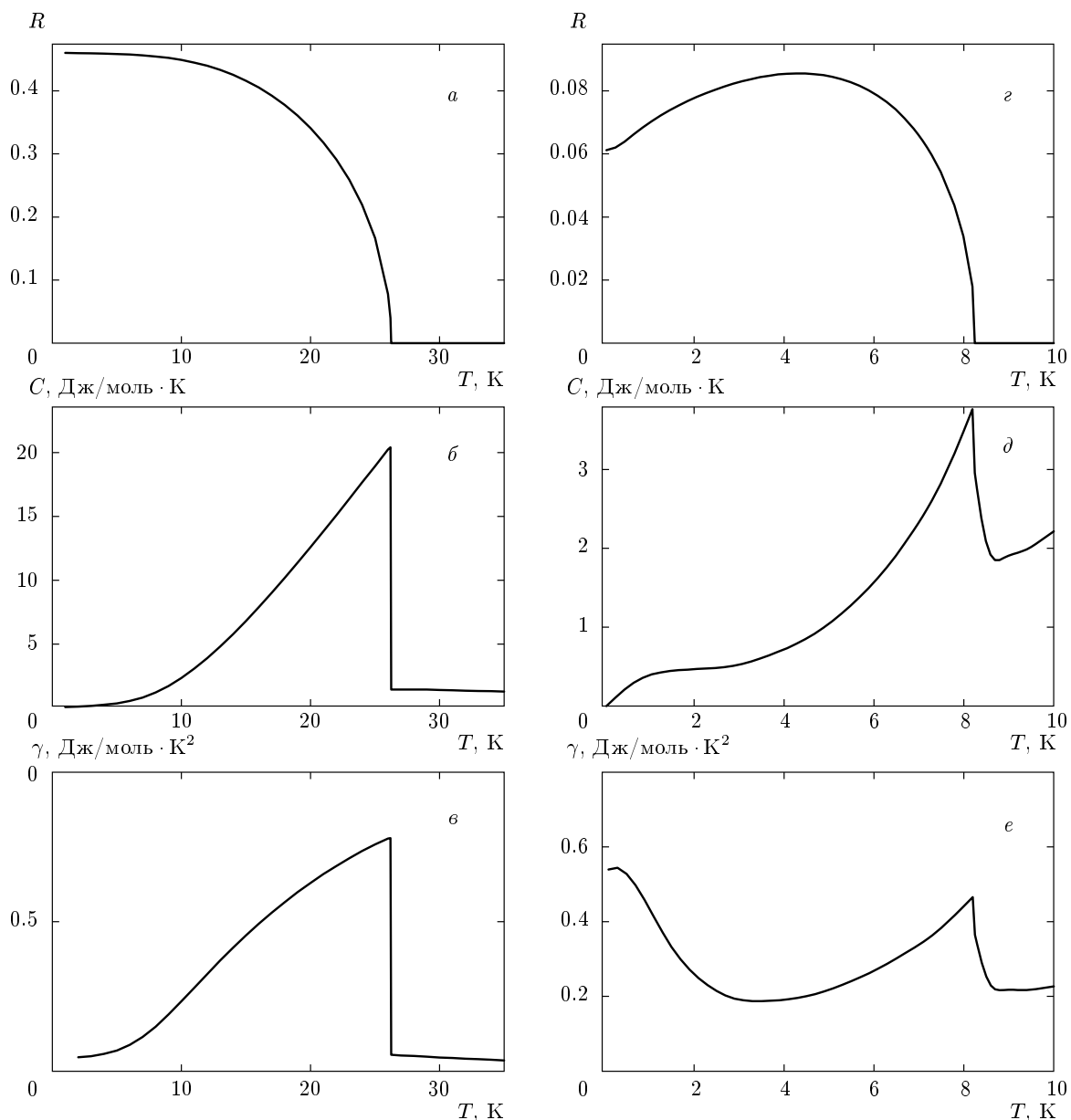


Рис. 10. Температурная зависимость магнитного момента R , теплоемкости C и константы Зоммерфельда γ при двух значениях концентрации электронов: $n = 2.4$ (а, б, в) и $n = 2.2$ (z, д, е)

к нему), происходит уменьшение не только величины магнитного момента R , но и значения критической температуры: если при $n = 2.4$ величина $T_N = 26.2$ К (рис. 10а), то при $n = 2.2$ имеем $T_N = 8.2$ К (рис. 10z). Для сравнения заметим, что характерная температура Нееля «классических» ТФ-антиферромагнетиков составляет примерно 10 К.

Рисунки 10б и 10д демонстрируют резкое изменение теплоемкости системы в окрестности температуры перехода из антиферромагнитной фазы в парамагнитную. Сильное возрастание C при подходе к T_N слева обусловлено вкладом магнитных степеней свободы. Наличие в системе сильных электронных корреляций затрудняет разделение электронного и магнитного вкладов в термодинамические характе-

ристики ТФ-антиферромагнетиков. Однако при самых низких температурах $T \ll T_N$ электронная теплоемкость значительно превышает магнитную. Поэтому отношение C/T позволяет оценить эффективную массу электронов и их плотность состояний. Эту информацию можно извлечь из рис. 10в и 10е. При $n = 2.4$, когда химический потенциал находится в середине узкой зоны между пиками плотности состояний (рис. 9б), теплоемкость системы, согласно рис. 10в, примерно в 50 раз превышает теплоемкость газа свободных электронов. Такие квазичастицы уже считаются тяжелыми, а порядок величины их эффективной массы соответствует, например, массе носителей тока в ТФ-скуттерудите $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$ [13].

При понижении концентрации до $n = 2.2$ химический потенциал смещается на пик плотности состояний (рис. 9г), а электронная теплоемкость системы возрастает в 10 раз (рис. 10е). Это означает, что эффективная масса тяжелых квазичастиц в указанном режиме достигает примерно 500 масс свободного электрона. Такие значения массы квазичастиц уже характерны для «классических» систем с тяжелыми фермионами.

Отметим наконец различный характер температурного изменения константы γ для концентраций $n = 2.4$ и $n = 2.2$. Если в первом случае константа Зоммерфельда монотонно возрастает вплоть до T_N (рис. 10в), то во втором случае, прежде чем возрасти, она сначала уменьшается (рис. 10е).

Как отмечалось выше, включение магнитного поля вызывает скос намагниченностей подрешеток. Это индуцирует модификацию спектральных кривых и изменение плотности состояний. Перестройка основного состояния должна, очевидно, отразиться и на термодинамических свойствах системы. На рис. 11 представлены расчеты температурной зависимости теплоемкости и параметра γ при $n = 2.4$ для трех значений напряженности магнитного поля ниже точки спин-флип-перехода. Параметры модели выбирались такие же, как и при расчете кривых на рис. 10. На рис. 11 видно, что включение магнитного поля, помимо размытия области фазового перехода, приводит к уменьшению значения температуры T_{max} , соответствующей максимуму теплоемкости на зависимости $C(T)$. Это означает уменьшение температуры Нееля, поскольку именно T_{max} экспериментально интерпретируется как температура антиферромагнитного перехода. Именно такое поведение зависимостей $C(T)$ и $\gamma(T)$ было зафиксировано в экспериментах на системах PuGa_3 [24], $\text{Ce}_2\text{Au}_2\text{Cd}$ [25], YbNiSi_3 [26], PuPd_5Al_2 [27].

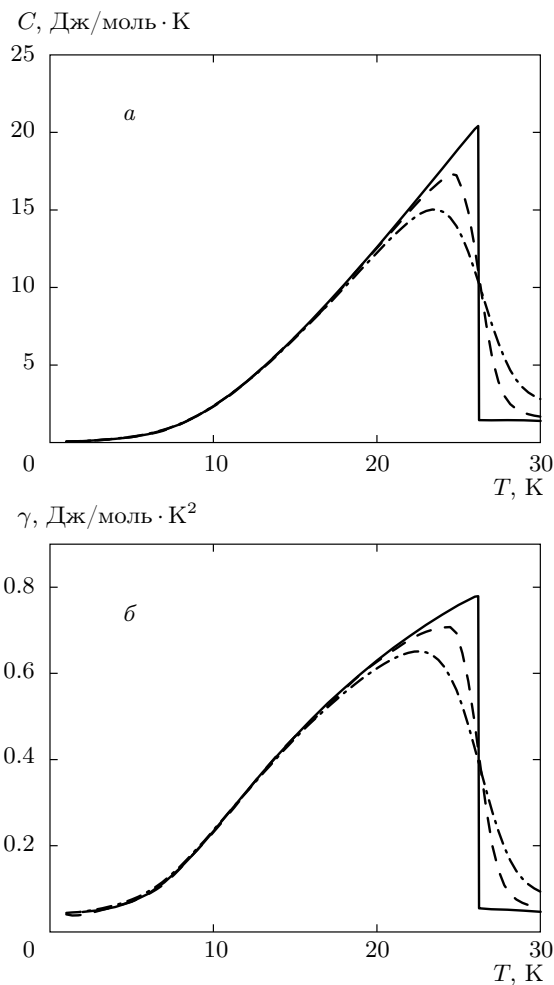


Рис. 11. Температурная зависимость теплоемкости и константы Зоммерфельда для концентрации $n = 2.4$ при трех значениях магнитного поля: $H = 0$ (сплошная линия), $\mu_B H = 5.79 \cdot 10^{-4}$ (штриховая линия) и $\mu_B H = 1.16 \cdot 10^{-3}$ (штрихпунктирная линия)

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты данной работы сводятся к следующему.

1. При использовании слейв-бозонного представления впервые рассмотрены спектральные и термодинамические свойства антиферромагнитных интерметаллидов с тяжелыми фермионами, в которых магнитное поле вызывает скос магнитных подрешеток. Для получения дисперсионного уравнения, определяющего ветви спектра элементарных возбуждений фермиевского типа в скошенной АФМ-фазе, была применена последовательность унитарных преобразований. Цель такого подхода

заклучалась в том, чтобы детерминант восьмого порядка представить в явном блочно диагональном виде через два детерминанта четвертого порядка. Реализация этой программы радикально упростила не только аналитическую часть задачи, но и численные расчеты, связанные с решением большого числа трансцендентных уравнений самосогласования.

2. Проведенные расчеты вскрыли особенности формирования спектра тяжелых фермионов в редкоземельных интерметаллидах с антиферромагнитным типом упорядочения спиновых моментов локализованной подсистемы. В частности, показано, что в таких системах состояниям тяжелых фермионов соответствует узкая зона, отделенная сверху и снизу энергетическими щелями. Магнитное поле, вызывающее скос магнитных подрешеток, существенно модифицирует характер дисперсионной зависимости этой зоны, приводя к изменению эффективной массы не только по величине, но и по знаку.

3. Впервые для неколлинеарной фазы с отличным от нуля вектором антиферромагнетизма получены аналитические выражения, описывающие спектр тяжелых фермионов в широком интервале магнитных полей и температур. Это позволило в явном виде установить соотношения между эффективными массами для парамагнитной фазы, коллинеарной антиферромагнитной фазы, а также для ферромагнитной фазы, возникающей в области больших магнитных полей после спин-флоп-перехода.

4. Учтено влияние магнитных степеней свободы коллективизированных электронов на скашивание намагниченностей подрешеток в магнитном поле. Это обстоятельство особенно существенно для ТФ-соединений с металлическим типом основного состояния, когда концентрация носителей тока велика. В частности, обнаружено, что только в рамках такого описания имеет место выполнение термодинамических принципов в низкотемпературной области.

5. На основе полученных выражений для спектра тяжелых фермионов в различных фазах исследовано термодинамическое поведение системы. Рассчитаны зависимости намагниченности подрешетки и свободной энергии от контрольных параметров и температуры. Впервые отмечено, что наличие магнитного упорядочения приводит к качественному изменению температурной зависимости ренормировочного множителя e_0^2 слейв-бозонного представления. В антиферромагнитной фазе e_0^2 монотонно возрастает при увеличении температуры. Определены области параметров, когда намагниченность подрешетки принимает малые значения, соответствующие экспе-

риментальным данным по антиферромагнитным тяжелофермионным интерметаллидам.

6. Впервые при учете скоса магнитных подрешеток рассмотрено поведение теплоемкости в неколлинеарной антиферромагнитной фазе. Показано, что индуцированные магнитным полем изменения в электронной теплоемкости хорошо коррелируют с имеющимися экспериментальными данными по антиферромагнитным интерметаллидам.

Авторы выражают благодарность К. А. Кикоину за критические замечания и полезное обсуждение результатов данной работы.

Работа выполнена в рамках Программы Президиума РАН «Квантовая физика конденсированных сред», междисциплинарного интеграционного проекта № 53 СО РАН, а также при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-00226).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Amato, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 1119 (1997).
2. T. Takabatake, F. Teshima, H. Fujii, S. Nishigori, T. Suzuki, T. Fujita, Y. Yamaguchi, J. Sakurai, and D. Jaccard, *Phys. Rev. B* **41**, 9607 (1990).
3. K. A. Kikoin, M. N. Kiselev, A. S. Mishchenko, and A. de Visser, *Phys. Rev. B* **59** 15070 (1999).
4. L. Degiorgi, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 687 (1999).
5. H. Sugawara, S. Osaki, M. Kobayashi, T. Namiki, S. R. Saha, Y. Aoki, and H. Sato, *Phys. Rev. B* **71**, 125127 (2005).
6. Yu. Kagan, K. A. Kikoin, and N. V. Prokof'ev, *Physica B* **182**, 201 (1992).
7. Ю. Каган, К. А. Кикоин, Н. В. Прокофьев, *Письма в ЖЭТФ* **56**, 221 (1992).
8. F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Messchede, W. Franz, and H. Schafer, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892 (1979).
9. H. R. Ott, H. Rudiger, Z. Fisk, and J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1595 (1983).
10. G. R. Stewart, Z. Fisk, J. O. Willis, and J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 679 (1984).
11. C. Petrovic, R. Movshovich, M. Jaime, P. G. Pagliuso, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, Z. Fisk, and J. D. Thompson, *Europhys. Lett.* **53**, 354 (2001).

12. H. Hegger, C. Petrovic, E. G. Moshopoulou, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, Z. Fisk, and J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4986 (2000).
13. Y. Nakai, K. Ishida, D. Kikuchi, H. Sugawara, and H. Sato, *JPSJ* **74**, 3370 (2005).
14. T. Namiki, Y. Aoki, H. Sato, C. Sekine, I. Shirovani, T. Matsuda, Y. Haga, and T. Yagi, *JPSJ* **76**, 093704 (2007).
15. E. Vergoz and D. Jaccard, *J. Magn. Magn. Mater.* **177–181**, 294 (1998).
16. S. S. Saxena, P. Agarwal, K. Ahilan, F. M. Grosche, R. K. W. Haselwimmer, M. J. Steiner, E. Pugh, I. R. Walker, S. R. Julian, P. Monthoux, G. G. Lonzarich, A. Huxley, I. Sheikin, and D. Braithwaite, *J. Fluquet Nature* **406**, 587 (2000).
17. T. Akazawa, H. Hidaka, H. Kotegawa, T. C. Kobayashi, T. Fujiwara, E. Yamamoto, Y. Haga, R. Settai, and Y. Onuki, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, L29 (2004).
18. C. Pfleiderer, M. Uhlarz, S. M. Hayden, R. Vollmer, H. V. Lohneysen, N. R. Bernhoeft, and G. G. Lonzarich, *Nature* **412**, 58 (2001).
19. T. Park, F. Ronning, H. Q. Yuan, M. B. Salamon, R. Movshovich, J. L. Sarrao, and J. D. Thompson, *Nature* **440**, 65 (2006).
20. П. А. Алексеев, Ж.-М. Миньо, К. С. Немковский, В. Н. Лазуков, Е. В. Нефедова, А. П. Менушенков, А. В. Кузнецов, Р. Бюли, А. В. Грибанов, *ЖЭТФ* **132**, 22 (2007).
21. А. В. Богач, Г. С. Бурханов, В. В. Глушков, С. В. Демишев, О. Д. Чистяков, Н. Е. Случанко, *ЖЭТФ* **132**, 125 (2007).
22. Н. Е. Случанко, А. В. Богач, В. В. Глушков, С. В. Демишев, Н. А. Самарин, Г. С. Бурханов, О. Д. Чистяков, *Письма в ЖЭТФ* **76**, 31 (2002).
23. М. И. Игнатов, А. В. Богач, Г. С. Бурханов, В. В. Глушков, С. В. Демишев, А. В. Кузнецов, О. Д. Чистяков, Н. Ю. Шицевалова, Н. Е. Случанко, *ЖЭТФ* **132**, 69 (2007).
24. P. Boulet, E. Colineau, F. Wastin, P. Javorsky, J. C. Griveau, J. Rebizant, G. R. Stewart, and E. D. Bauer, *Phys. Rev. B* **72**, 064438 (2005).
25. S. Rayaprol and R. Pottgen, *Phys. Rev. B* **72**, 214435 (2005).
26. S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, M. A. Avila, and T. Takabatake, *Phys. Rev. B* **75**, 094433 (2007).
27. K. Gofryk, J.-C. Griveau, E. Colineau, and J. Rebizant, *Phys. Rev. B* **77**, 092405 (2008).
28. P. Misra, *Heavy Fermion Systems*, Elsevier, Oxford (2008).
29. V. Dorin and P. Schlottmann, *Phys. Rev. B* **46**, 10800 (1992).
30. B. Moller and P. Wolfle, *Phys. Rev. B* **48**, 10320 (1993).
31. E. Halvorsen and G. Czycholl, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 1775 (1996).
32. S.-J. Sun, M.-F. Yang, and T.-M. Hong, *Phys. Rev. B* **48**, 16127 (1993).
33. J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
34. C. Lacroix and M. Cyrot, *Phys. Rev. B* **20**, 1969 (1979).
35. В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс, *ТМФ* **121**, 464 (1999).
36. Д. Ф. Дигор, П. Ентел, М. Маринаро, В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс, *ТМФ* **127**, 304 (2001).
37. Z. Liang-Jian and Z. Qing-Qi, *J. Magn. Magn. Mater.* **109**, 237 (1992).
38. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *ТМФ* **157**, 235 (2008).
39. P. Coleman, *Phys. Rev. B* **29**, 3035 (1984).
40. A. Grauel, A. Bohm, H. Fischer et al., *Phys. Rev. B* **46**, 5818 (1992).
41. R. Movshovich, T. Graf, D. Mandrus et al., *Phys. Rev. B* **53**, 8241 (1996).