

# МОДЕЛЬ ИЗОТРОПНОГО $d$ -СПАРИВАНИЯ В UPt<sub>3</sub>

*M. E. Житомирский, И. А. Лукьянчук*

*Институт Теоретической Физики им. Л. Д. Ландау РАН,  
117 334, Москва*

Поступила в редакцию 23 июня 1993 г.

Предложена феноменологическая модель, описывающая  $H - T - P$ -фазовую диаграмму тяжелофермионного сверхпроводника UPt<sub>3</sub>. В этой модели UPt<sub>3</sub> является почти изотропным  $d$ -сверхпроводником со слабым расщеплением критической температуры из-за воздействия кристаллического поля. Показано, что модель соглашается со всеми известными экспериментальными данными по фазовой диаграмме UPt<sub>3</sub>. Используемые параметры близки к значениям, задаваемым теорией слабой связи. Обсуждаются физические причины подобной изотропизации сверхпроводящих свойств.

Расщепление сверхпроводящего перехода в соединении UPt<sub>3</sub> было открыто около пяти лет назад [1]. Его существование является одним из главных доказательств нетривиального спаривания электронов в ряде тяжелофермионных сверхпроводников. Однако причина этого расщепления до сих пор не ясна. Ни одна из известных в настоящее время феноменологических моделей [2–4] не объясняет в полной мере имеющихся экспериментальных данных — расщепление  $T_c$ , излом (kink) в зависимости  $H_{c2}(T)$  для всех направлений магнитного поля, фазовую диаграмму в переменных  $H - T - P$  (подробнее см. [5]).

В данной работе мы предлагаем модель, в которой естественным образом получаются все известные экспериментальные результаты. Обоснованием для нее могут послужить недавние исследования кристаллической структуры UPt<sub>3</sub> [6,7]. В ГПУ решетке атомов урана (ABAB...) были обнаружены дефекты упаковки типа ABACABAC..., соответствующие двойной гексагональной структуре. Наличие подобных дефектов во многих случаях свидетельствует о близости кристалла к переходу в ГЦК структуру [8]. Размер дефектов  $a \sim 30\text{ \AA}$  [6] меньше длины когерентности  $\xi_0 \sim 150\text{ \AA}$ . Поэтому существование таких дефектов должно приводить к изотропизации спектра возбуждений, ответственных за образование куперовских пар.

В соответствии с этим мы предположим, что спаривание электронов в UPt<sub>3</sub> с относительным моментом  $l = 2$  происходит в почти изотропном окружении. Более низкая симметрия кристаллической решетки лишь слабо расщепляет критическую температуру пятнадцатикратно вырожденного  $d$ -мультиплета. Аналогичная модель для  $p$ -спаривания изучалась ранее в работе [9], однако она не дает излома в  $H_{c2}(T)$  для магнитных полей, лежащих в базисной плоскости кристалла.

Отправным пунктом нашего анализа является  $SO(3)$ -симметричный функционал Гинзбурга - Ландау для синглетного сверхпроводящего параметра порядка  $\Delta(\mathbf{k}) = \sum a_m Y_{2m}(\mathbf{k}/|\mathbf{k}|) = B_{ij} k_i k_j$  ( $\mathbf{k}$  — импульс на поверхности Ферми,  $Y_{2m}$  — сферические функции второго порядка,  $\text{Sp } B = 0$ ):

$$F = \alpha(T - T_c)\text{Sp } B^* B + \beta_1(\text{Sp } B^* B)^2 + \beta_2|\text{Sp } B^2|^2 + \beta_3\text{Sp } (B^{*2} B^2) +$$

$$+ K_1 \nabla_i^* B_{jk}^* \nabla_i B_{jk} + K_2 \nabla_i^* B_{ik}^* \nabla_j B_{jk} + K_3 \nabla_i^* B_{jk}^* \nabla_j B_{ik}, \quad (1)$$

$$\nabla_i = \partial_i - i \frac{2e}{\hbar c} A_i.$$

В теории слабой связи  $\beta_2 = 0, 5\beta_1$ ,  $\beta_3 = 0$ ,  $K_2 = K_3 = 2K_1$ . Как показано в [10], при  $\beta_2 > 0$  в зависимости от знака  $\beta_3$  реализуются следующие состояния:

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{k}) &\sim (k_x + ik_y)^2, & \beta_3 > 0, \\ \Delta(\mathbf{k}) &\sim k_x^2 + e^{2\pi i/3} k_y^2 + e^{4\pi i/3} k_z^2, & \beta_3 < 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Случай  $\beta_3 = 0$  вырожден: любая матрица  $B$ , такая, что  $\text{Sp } B^2 = 0$ , минимизирует функционал (1). Другой путь снятия этого вырождения — расщепление  $T_c$ . Под воздействием кристаллического поля критическая температура для спаривания с  $l = 2$  расщепляется по трем неприводимым представлениям группы  $D_6$ :

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{k}) &\sim k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2 & - A_1, \\ \Delta(\mathbf{k}) &\sim (k_x \pm ik_y)k_z & - E_1, \\ \Delta(\mathbf{k}) &\sim (k_x \pm ik_y)^2 & - E_2. \end{aligned} \quad (3)$$

Направление  $\hat{z}$  выбрано вдоль поворотной оси шестого порядка, оси  $\hat{x}$  и  $\hat{y}$  лежат в базисной плоскости кристалла.

Таким образом, мы предполагаем, что главным эффектом, определяющим структуру фазовой диаграммы, является расщепление критической температуры  $d$ -спаривания. Влиянием же кристаллического поля на члены четвертой степени и на энергию неоднородности в (1) мы пренебрегаем.

### P-T-фазовая диаграмма

Симметрийные аргументы не накладывают никаких ограничений на соотношение критических температур представлений (3). Оно должно зависеть от давления, и уже небольшие деформации решетки могут изменить порядок расположения  $T_c$ . Перебор всех возможных вариантов показывает, что фазовую диаграмму  $UPt_3$  можно объяснить при единственном расположении критических температур в плоскости  $P - T$ , изображенном на рис.1, a. Поликритическая точка  $(P^*, T^*)$  задается пересечением линий  $T_{A1}(P)$  и  $T_{E1}(P)$ , соответствующим фазовым переходам на неприводимых представлениях  $A_1$  и  $E_1$ . Таким образом, прикладываемое давление как бы “восстанавливает” изотропию, и при  $P = P^*$  расщепляющее влияние кристаллического поля особенно мало.

Для исследования фазовой диаграммы необходимо учесть члены четвертой степени. В окрестности поликритической точки можно пренебречь представлением  $E_2$ . Раскладывая параметр порядка по базисным функциям оставшихся двух представлений, получим вместо (1):

$$\begin{aligned} F = \alpha(T - T_{A1})|a_0|^2 + \alpha(T - T_{E1})(|a_1|^2 + |a_{-1}|^2) + \\ + \beta_1(|a_0|^2 + |a_1|^2 + |a_{-1}|^2)^2 + \beta_2|a_0^2 + 2a_1a_{-1}|^2. \end{aligned} \quad (4)$$

В функционале (4) мы отбросили слагаемое с  $\beta_3$ . Это можно сделать, поскольку вырождение, имевшее место при  $\beta_3 = 0$ , снимается теперь из-за расщепления

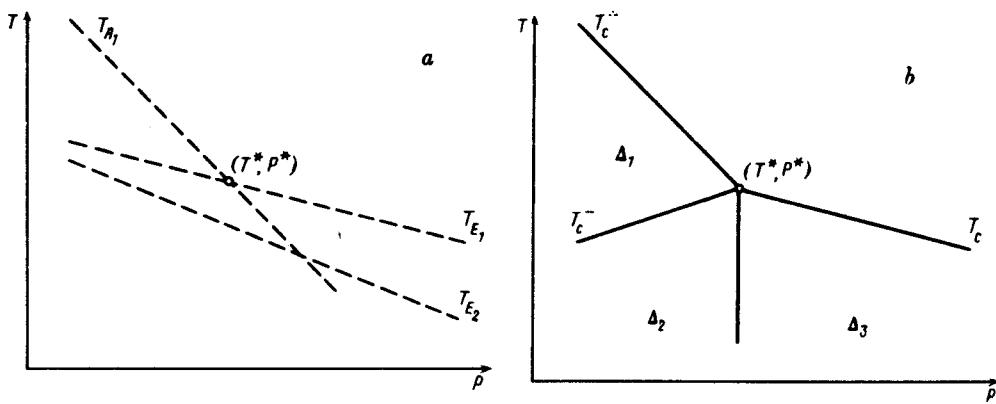


Рис.1. Расщепление критической температуры изотропного *d*-спаривания под действием кристаллического поля с симметрией  $D_6$  (а) и фазовая диаграмма  $UPt_3$  при  $H = 0$  (б)

$T_c$ , а коэффициент  $\beta_3$  хотя и отличен от нуля, но при небольших эффектах сильной связи, вообще говоря, мал.

При давлениях меньших, чем  $P^*$ , сверхпроводящий переход происходит при температуре  $T_c^+ = T_{A1}$  в фазу

$$\Delta_1(\mathbf{k}) = \frac{a_0}{\sqrt{6}}(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad a_0^2 = \frac{\alpha(T_{A1} - T)}{2(\beta_1 + \beta_2)}. \quad (5)$$

При этом нарушается только калибровочная симметрия системы. Решение  $\Delta_1(\mathbf{k})$  инвариантно относительно группы  $D_6 \times E$ . Следующий фазовый переход происходит при  $T = T_c^-$ :

$$T_c^- = \frac{1}{2} \left( T_{A1} \left( 1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} \right) + T_{E1} \left( 1 + \frac{\beta_1}{\beta_2} \right) \right), \quad (6)$$

и ниже  $T_c^-$  минимуму энергии соответствует фаза

$$\Delta_2(\mathbf{k}) = \frac{a_0}{\sqrt{6}}(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) + \sqrt{2}a_1 ik_x k_z, \quad a_1^2 = \frac{\alpha(T_c^- - T)}{4\beta_1}, \quad a_0^2 = a_1^2 + \frac{\alpha(T_{A1} - T_{E1})}{4\beta_2}. \quad (7)$$

Симметрия фазы  $\Delta_2(\mathbf{k})$ :  $D_2(U_{2y})$ . Для отношения скачков теплоемкости получаем обычное выражение:

$$\frac{\delta(C/T)(T_c^-)}{\delta(C/T)(T_c^+)} = \frac{\beta_2}{\beta_1}. \quad (8)$$

В случае, когда  $P > P^*$ , имеется всего один фазовый переход при  $T_c = T_{E1}$  в фазу:

$$\Delta_3(\mathbf{k}) = a_1(k_x + ik_y)k_z, \quad a_1^2 = \frac{\alpha(T_c - T)}{2\beta_1}, \quad (9)$$

которой отвечает группа симметрии  $D_6(E)$ . Так как  $D_2(U_{2y}) \not\subset D_6(E)$ , на диаграмме в плоскости  $P - T$  между фазами  $\Delta_2(\mathbf{k})$  и  $\Delta_3(\mathbf{k})$  существует

вертикальная (в пренебрежении коэффициентом  $\beta_3$ ) линия переходов первого рода. На ней происходит скачок объема (длины) образца:

$$\frac{\delta V}{V} = \frac{\alpha^2(T^* - T)}{4\beta_1} \left( \frac{\partial T_{A1}}{\partial P} - \frac{\partial T_{E1}}{\partial P} \right). \quad (10)$$

Открытие такого скачка, например по аномалии в упругих свойствах, может стать решающим аргументом в пользу предложенной модели. Результирующая фазовая диаграмма изображена на рис.1, б.

Симметрия фазы  $\Delta_2(k)$  допускает непрерывное примешивание к (7) компонент представления  $E_2$ , которое начинается непосредственно от температуры  $T_c^-$ . Поэтому при охлаждении до критической температуры  $T_{E2}(P)$  дополнительного фазового перехода, связанного с представлением  $E_2$ , не происходит. Вместо этого должна возникнуть размытая по температуре аномалия в теплоемкости относительной величины порядка  $\beta_3/\beta_1$ . (Примешивание компонент  $E_2$  происходит за счет слагаемого с  $\beta_3$  в функционале энергии (1).)

Отличное от нуля значение  $\beta_3$  делает энергетически невыгодными фазы  $\Delta_2(k)$  и  $\Delta_3(k)$  по сравнению с одной из фаз (2) в том случае, если можно пренебречь расщеплением  $T_c$ . Однако при  $|\beta_3| \leq (T_{E1} - T_{E2})/T_{E1}$ , этого не происходит вплоть до самых низких температур.

### Н-Т-фазовая диаграмма

Покажем, что излом (kink) в зависимости  $H_{c2}(T)$  должен иметь место как для  $\mathbf{H} \perp \hat{z}$ , так и для  $\mathbf{H} \parallel \hat{z}$ . При этом мы будем действовать в рамках симметрийного подхода [11], приписывая вихревым решеткам вблизи  $H_{c2}$  различные квантовые числа.

В случае  $\mathbf{H} \parallel \hat{z}$  градиентная энергия для представлений  $A_1$  и  $E_1$ , получаемая из (1), имеет вид:

$$F_{grad} = (K_1 + \frac{1}{4} K_{23}) |\nabla_z a_{\pm 1}|^2 - \frac{1}{4} K_{23} (a_{-1}^* \nabla_+^2 a_{+1} + a_{+1}^* \nabla_-^2 a_{-1}) - \\ - \frac{eH}{2\hbar c} \tilde{K}_{23} (|a_{+1}|^2 - |a_{-1}|^2) + (K_1 + \frac{1}{6} K_{23}) |\nabla_z a_0|^2. \quad (11)$$

Здесь мы положили  $\nabla_z a_m = 0$ ,  $\nabla_{\pm} = \nabla_x \pm i\nabla_y$ ,  $K_{23} = K_2 + K_3$ ,  $\tilde{K}_{23} = K_2 - K_3$ .

Критическое поле максимально для следующих решений линеаризованных уравнений Гинзбурга - Ландау:

$$\Delta^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \sim f_0(\mathbf{r})(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad H^{(1)} \sim \frac{T_{A1} - T}{\lambda_1}, \quad \lambda_1 = K_1 + K_{23}/6, \\ \Delta^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \sim f_2(\mathbf{r})(k_x - ik_y)k_z + f_0(\mathbf{r})(k_x + ik_y)k_z, \quad (12)$$

$$H^{(2)} \sim \frac{T_{E1} - T}{\lambda_2}, \quad \lambda_2 = 3(K_1 + K_{23}/4) - \sqrt{K_{23}^2/2 + (2K_1 + K_{23}/2 - \tilde{K}_{23}/4)^2},$$

$f_n(\mathbf{r})$  — волновая функция  $n$ -го уровня Ландау. Сверхпроводящим зародышам  $\Delta^{(1)}$  и  $\Delta^{(2)}$  соответствуют разные квантовые числа  $N$  ( $N = n + m$ , [11]) и разная четность относительно отражений в плоскости  $x - y$ . Поэтому решения (12) не смешиваются в любом порядке разложения энергии по градиентам. В отсутствие внешнего давления, когда  $T_{A1} > T_{E1}$ , линии  $H^{(1)}(T)$  и  $H^{(2)}(T)$

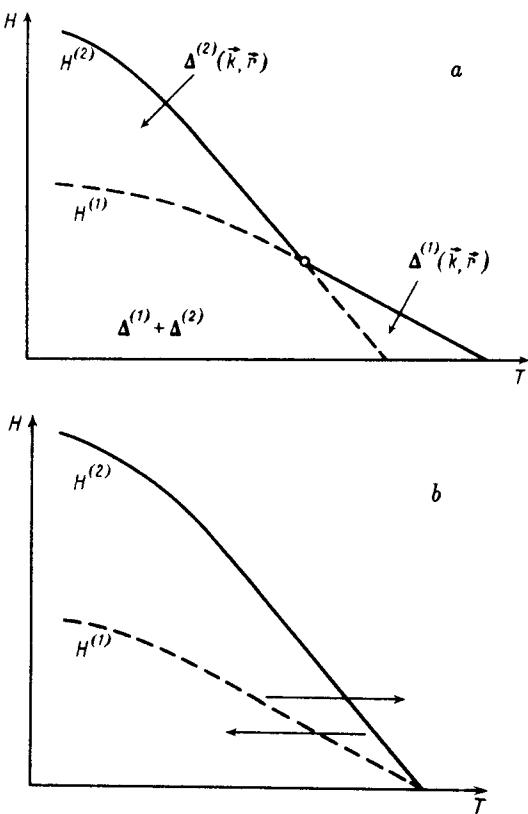


Рис. 2. Критические поля и сверхпроводящие фазы в случае  $\mathbf{H} \parallel \hat{z}$ ,  $P < P^*$ . (При  $\mathbf{H} \perp \hat{z}$  фазовая диаграмма имеет аналогичную структуру.) (а) и критические поля для изотропного  $d$ -спаривания (б). Стрелками показано расщепление ветвей  $H^{(1)}(T)$  и  $H^{(2)}(T)$  под действием кристаллического поля при  $P < P^*$ .

пересекаются при  $\lambda_1 > \lambda_2$  (см. рис. 2, а). Это условие выполняется в теории слабой связи ( $\lambda_1 = 1,67K_1$ ,  $\lambda_2 = 1,1K_1$ ) и должно сохраняться при не очень больших отклонениях от нее.

Рассмотрим случай  $\mathbf{H} \perp \hat{z}$ . В силу одноосной анизотропии исходного функционала энергии,  $H_{c2}$  изотропно в базисной плоскости кристалла. При  $\mathbf{H} \parallel \hat{z}$  градиентные члены имеют вид:

$$\begin{aligned}
 F_{grad} = & K_1 |\nabla_y \eta_x|^2 + (K_1 + \frac{1}{2} K_{23}) |\nabla_z \eta_x|^2 + (K_1 + \frac{1}{2} K_{23}) |\nabla_z \eta_y|^2 + \\
 & + (K_1 + \frac{1}{6} K_{23}) |\nabla_y a_0|^2 + (K_1 + \frac{2}{3} K_{23}) |\nabla_z a_0|^2 - \\
 & - \frac{1}{2\sqrt{3}} (\eta_y^* ((2K_2 - K_3) \nabla_y \nabla_z + (2K_3 - K_2) \nabla_z \nabla_y) a_0 + \text{к.с.}),
 \end{aligned} \quad (13)$$

где  $a_{\pm 1} = (\eta_x \pm i\eta_y)/\sqrt{2}$ . Верхнему критическому полю соответствуют следующие решения, различающиеся четностью относительно отражений в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

$$\begin{aligned}
 \Delta^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \sim & a_0(\mathbf{r})(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) + \eta_y(\mathbf{r})k_y k_z, \quad H^{(3)} \sim \frac{T_{A1} - T}{\lambda_3(T)}, \\
 \Delta^{(4)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \sim & \eta_x(\mathbf{r})k_x k_z, \quad H^{(4)} \sim \frac{T_{E1} - T}{\lambda_4}.
 \end{aligned} \quad (14)$$

Значение  $\lambda_4$  можно найти точно:  $\lambda_4 = \sqrt{K_1(K_1 + K_{23}/2)}$ . Наклон кривой  $H^{(3)}(T)$  зависит от температуры и вблизи  $T_c^+$ , когда можно пренебречь примешиванием компоненты  $k_y k_z$ ,  $\lambda_3 = \sqrt{(K_1 + K_{23}/6)(K_1 + 2K_{23}/3)} > \lambda_4$ . Численный расчет показывает, что зависимость  $H^{(3)}(T)$  в режиме Гинзбурга-Ландау слабо отличается от линейной. Таким образом, для  $H \perp z$  также должен существовать излом. Сопоставляя приведенные выше формулы с экспериментальными данными [11], мы получили следующее соотношение параметров:  $K_2 = K_3 = 2.2K_1$ .

Необходимость существования дополнительных линий переходов в  $H - T$  плоскости, подходящих к точке излома  $H_{c2}(T)$ , а также возможные типы нарушений симметрии при переходах в вихревых решетках рассматривались в [11]. При давлениях  $P > P^*$  излом в зависимости  $H_{c2}(T)$  пропадает одновременно с исчезновением расщепления сверхпроводящего перехода. Структура  $H - T$  диаграммы аналогична фазовой диаграмме для изотропного  $d$ -спаривания (рис. 2,*b*)

В [13] было отмечено, что угловая зависимость нижней (по отношению к излому) ветви  $H_{c2}$  намного сильнее, чем анизотропия верхней ветви. Этот факт естественно объясняется в рамках предлагаемой модели: анизотропия  $H_{c2}$ , в малых полях вызвана расщеплением  $T_c$  и дается формулами (12), (14), в то время как в области больших полей слабый эффект расщепления  $T_c$  в изотропном функционале (1), очевидно, несуществен, и  $H_{c2}$  слабо зависит от направления. Предположение о слабости эффектов кристаллического поля и почти изотропном нетривиальном спаривании объясняет наблюдаемую изотропию  $H_{c2}$  и в другом тяжелофермionном сверхпроводнике  $UBe_{13}$ , имеющем кубическую решетку. (Если эффекты кристаллического поля сильны,  $H_{c2}$  в кубическом нетривиальном сверхпроводнике должно быть существенно анизотропным [14].)

Косвенным подтверждением предлагаемой модели является также изотропизация сопротивления (а соответственно, и тензора эффективной массы электронов проводимости) под давлением [15].

Некоторые особенности фазовой диаграммы  $UPt_3$  такие, как расщепление  $T_c$  и излом  $H_{c2}(T)$ , можно объяснить, предполагая "случайное" вырождение критических температур двух неприводимых представлений группы  $D_{6h}$  (пример с  $A_{1g}$  и  $E_{1g}$  рассмотрен в [14]). Однако для объяснения вертикальной линии переходов между фазами  $\Delta_2(k)$  и  $\Delta_3(k)$  в этом случае требуется строго определенное, и тем самым, еще одно "случайное" соотношение между коэффициентами, описывающими взаимодействие параметров порядка. Таким образом, с этой точки зрения также более предпочтительной является предложенная модель.

Работа частично финансировалась фондом BMFT (Bonn, grant 13 # 5750) и Американским Физическим Обществом через Международный Научный Фонд. И. Л. благодарен М. Сигристу (M. Sigrist) за полезное обсуждение работы.

1. R. A. Fisher, S. Kim, B. F. Woodfield et al., Phys. Rev. Lett. **62**, 1411 (1989).
2. D. W. Hess, T. Tokuyasu, and J. A. Sauls, J. Phys. Cond. Matt. **1**, 8135 (1989).
3. K. Machida, M. Ozaki, and T. Ohmi, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 4116 (1989).
4. R. Joynt, V. P. Mineev, G. E. Volovik, and M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. B **42**, 2014 (1990).
5. L. Taillefer, J. Flouquet, and G. G. Lonzarich, Physica B **169**, 257 (1991).

6. B.G. Demeszyk, M.C. Aronson, B.R. Coles, and J.L. Smith, *Philos. Mag. Lett.* **67**, 85 (1993).
7. P.A. Madgley, S.M. Hayden, L. Taillefer et al., *Phys. Rev. Lett.* **70**, 678 (1993).
8. A. Zangwill and R. Bruinsma, *Comments Cond. Matter Phys.* **13**, 1 (1987).
9. K. Scharnberg and R.A. Klemm, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2445 (1985).
10. N.D. Mermin, *Phys. Rev. A* **9**, 868 (1974).
11. М. Е. Житомирский, И. А. Лукьянчук, *ЖЭТФ* **101**, 1954 (1992); I.A. Luk'yanchuk and M.E. Zhitoimirsky, *Physica C* **206**, 373 (1993).
12. N.H. van Dijk, A. de Visser, J.J.M. Franse et al., Proc. of the Intern. Conf. on Strongly Correlated Systems, Sendai (1992).
13. G. Bruls, D. Weber, B. Wölf et al., *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2294 (1990).
14. Л. И. Бурлачков, *ЖЭТФ*, **89**, 1384 (1985).
15. L. Taillefer, J. Flouquet, Yu.P. Gaydukov, and N.P. Danilova, *J. Magn. & Magn. Mater.* **108**, 138 (1992).