

О МЕХАНИЗМЕ СТАБИЛИЗАЦИИ СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ В КОНДО-РЕШЕТКАХ

К.А.Кикоин, М.Н.Киселев, А.С.Мищенко

Российский научный центр "Курчатовский институт"
123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 сентября 1994 г.

Предложен механизм стабилизации спиновой жидкости нейтральных фермионов в кондо-решетках. Показано, что одноузельное кондо-рассеяние электронов проводимости при T больше температуры Кондо T_K не только подавляет антиферромагнитный порядок, но и способствует возникновению состояния типа RVB. При этом кондо-рассеяние "замораживается" при $T^* > T_K$, так что при $T \rightarrow 0$ система ведет себя, как двухкомпонентная ферми-жидкость с нейтральной и заряженной составляющими.

1. Необычное поведение систем с тяжелыми фермионами связано с трансформацией свойств спинов редкоземельных ионов, входящих в их состав, при переходе от "высокотемпературной" области $T > T^*$, где они ведут себя, как обычные локализованные моменты, к области низких температур $T < T_{coh} \ll T^*$, где вся термодинамика определяется фермиевскими ветвями возбуждений. Поскольку число спиновых степеней свободы (~ 2 на элементарную ячейку) значительно превышает число зарядовых степеней свободы, вовлеченных в формирование тяжелых фермионов ($2T^*/\epsilon_F$ на элементарную ячейку), естественно считать, что источником аномально высокой плотности фермионных возбуждений при $T < T^*$ являются именно спиновые степени свободы.

В отличие от традиционной точки зрения (см., например, [1-3]), предполагающей связывание электронов проводимости с f -спинами в состояния "кондо-синглетов", в работах [4,5] был рассмотрен сценарий двухкомпонентной ферми-жидкости, с нейтральной спиновой и заряженной электронной составляющими. В данной статье предлагается микроскопический механизм формирования нейтральной спиновой жидкости и показывается, что одноузельное кондо-рассеяние при высоких температурах $T > T_K$ способствует ее стабилизации как относительно антиферромагнитного упорядочения, так и относительно образования когерентного кондо-синглетного состояния.

2. Тяжелофермионные соединения с целочисленной валентностью описываются эффективным sf -обменным гамильтонианом

$$H_{eff} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + J_{sf} \sum_i s_i S_i. \quad (1)$$

Здесь ϵ_k энергетические уровни электронов проводимости в зоне, ширина которой характеризуется энергией Ферми ϵ_F , S_i и $s_i = c_{i\sigma}^+ \hat{\sigma}_{i\sigma}$ - операторы локализованных f -спинов и спинов электронов проводимости, соответственно, $\hat{\sigma}$ - матрица Паули. Регулярная теория возмущений для решетки Кондо, описываемой гамильтонианом (1), может быть сформулирована только для высоких температур $T > T_K$, где справедливо приближение непересекающихся диаграмм [1], в котором кондо-рассеяние на каждом узле решетки может

рассматриваться независимо, а само это рассеяние учитывается в логарифмическом приближении. Согласно Доньяху [6], это приближение приводит к конкуренции антиферромагнитного состояния, реализующегося при малых значениях эффективной константы связи $\alpha = J_{sf}/\epsilon_F$ и немагнитного состояния кондо-синглета, которое должно формироваться при больших α . Мы, однако, увидим, что в критической области $\alpha_{c0}^2 \approx \exp(-1/2\alpha_{c0})$ или, иными словами, $T_N \approx T_K$, где $T_{N,K}$ – соответственно температуры Нееля и Кондо, реализуется третья возможность – возникает спиновая жидкость типа резонирующей валентной связи (RVB) (см. [7]) с характерной энергией $T^* > T_K$. При этом кондо-рассеяние замораживается при $T \sim T^*$, но остается возможность для заметных антиферромагнитных корреляций.

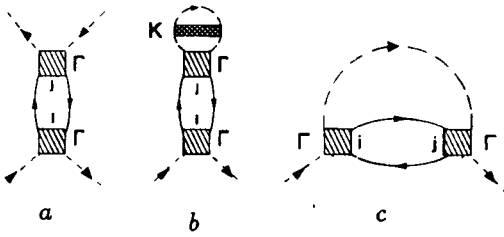


Рис.1. Эффективная вершина (а) и собственно-энергетические части псевдофермионных функций Грина (b и c)

Воспользуемся стандартной техникой температурных функций Грина, введя представление псевдофермионов Абрикосова для спиновых операторов, $S_i = f_{i\alpha}^+ \hat{\sigma}_{\alpha\beta} f_{i\beta}$, и применим при $T > T_K$ приближение непересекающихся диаграмм (NCA), в котором одноузельные кондовские процессы можно рассмотреть независимо от наличия других узлов. В этом приближении межузельное взаимодействие описывается косвенным РККИ-обменом (см. рис. 1а, где сплошными и пунктирными линиями обозначены электронные и псевдофермионные пропагаторы, соответственно). Влияние многократного кондо-рассеяния проявляется в перенормировке одноузельных вершинных частей, усиление которых в логарифмическом приближении имеет известный вид [8] $\Gamma(\epsilon) = J_{sf} (1 - 2\alpha \ln[\epsilon_F / \max\{\epsilon, T\}])^{-1}$. При вычислении межузельного косвенного обмена мы ограничились в поляризационном операторе учетом только ближайших соседей, $\Pi_q(i\omega_n) = \Pi_R(i\omega_n) S^{(1)}(q)$, где $S^{(1)}(q) = \sum_j \exp i q(j-1)$ – структурный фактор, $R = |j-1|$. В этом приближении фурье компонента статического РККИ-взаимодействия $\tilde{J}(R, T) S^{(1)}(q)$ выражается через эффективную константу

$$\tilde{J}(R, T) = T \sum_n G^2(R, \epsilon_n) \Gamma^2(\epsilon_n, T), \quad (2)$$

где электронная функция Грина в координатном представлении на мнимых частотах берется в асимптотической форме [9]

$$G(R, \epsilon) = -\frac{v_F}{2\pi p_F R} \exp\left(-\frac{|\epsilon|R}{v_F} + i p_F R \operatorname{sgn} \epsilon\right). \quad (3)$$

Подставляя (3) в (2), находим

$$\tilde{J}(R, T) \approx \Phi(p_F R) \alpha^2 \int_T^{\epsilon_F} d\epsilon \frac{\exp(-\frac{\epsilon}{\epsilon_F} p_F R)}{\left[1 + 2\alpha \ln \frac{\epsilon}{\epsilon_F}\right]^2}. \quad (4)$$

Здесь $\Phi(x)$ осциллирующая функция РККИ. Энергетическая зависимость одноузельных вершинных частей $\Gamma(\varepsilon)$ приводит к резкому изменению температурной зависимости РККИ-взаимодействия при $T \ll \varepsilon_F$. Вместо практически не зависящего от температуры множителя $\exp\left(-\frac{T}{\varepsilon_F} p_F R\right) \approx 1$ в окрестности температуры Кондо появляется логарифмическое усиление вида $\ln^{-n}(T/T_K)$. Асимптотические оценки и численные расчеты выражения (4) показывают, что показатель $n \approx 1$.

Таким образом, в псевдофермионном представлении Абрикосова взаимодействие в спиновой подсистеме описывается эффективной четырехфермионной вершиной (рис.1а). Возможные коррелированные состояния этой подсистемы могут быть описаны массовыми операторами, изображенными на рис.1б и 1с (ср.[2]). Диаграмме рис.1б, в которой псевдофермионные линии замкнуты на одном узле, отвечает соизмеримый магнитный порядок с антиферромагнитным вектором Q таким, что $QR_{ij} = \pi$. Параметром порядка антиферромагнитной фазы является неелевское молекулярное поле $B_N(T) = \lambda_1 \bar{J}(R, T) \langle S_z \rangle$, где средний спин узла стандартным образом выражается через среднее от псевдофермионных операторов $\langle S_z \rangle = \langle f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} \rangle$ (замкнутая петля на диаграмме рис.1б). Здесь λ_1 – численный множитель, определяемый геометрией решетки. В рамках NCA кондовские процессы приводят к зависящей от температуры экранировке среднего спина $\langle S_z \rangle$ [10, 8] на каждом узле решетки, вставка K рис.1б. Результатом точного решения одноузельной задачи Кондо [8] является монотонно убывающая с понижением температуры функция $K(T)$, имеющая при температуре Кондо конечное значение ($K(T_K) \approx 0,37$). Самосогласованное уравнение для температуры перехода в антиферромагнитное состояние отличается от обычного уравнения для параметра порядка наличием экранирующей поправки $K(T)$

$$\langle S_z(T_N) \rangle = \frac{1}{2} K(T_N) \tanh \frac{B_N(T_N)}{2T_N}. \quad (5)$$

Здесь T_N определяется как температура, при которой появляется нетривиальное решение уравнение для $\langle S_z \rangle$.

Резонирующие валентные связи являются альтернативной возможностью возникновения коррелированного состояния спиновой подсистемы, а именно, состояния спиновой жидкости. В этой фазе спины соседних f -электронов попарно связываются в синглетные состояния, характеризующиеся в приближении среднего поля отличным от нуля значением "параметра порядка" $\Delta_{RVB} = \sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^+ f_{j\sigma} \rangle$ (см., например, [2, 7, 11]). Отличное от нуля "аномальное" среднее соответствует замыканию псевдофермионных линий разных узлов на рис.1с. Определенный таким образом параметр порядка описывает однородную спиновую жидкость.

В приближении ближайших соседей RVB-состоянию отвечает фермиевский спектр элементарных возбуждений с законом дисперсии $u(k) \sim \Delta_{RVB} \alpha^2 \varepsilon_F S^{(1)}(k)$. В общем случае величина молекулярного поля определяется выражением $B_{RVB}(T) = \sum_m \bar{J}^{(m)}(R_m, T) \Delta_{RVB}^{(m)} S^{(m)}(k)$, где суммирование идет по координационным сферам (m), для которых косвенный обмен имеет антиферромагнитный знак [11]. Диаграмма рис.1с дает самосогласованное

уравнение для температуры перехода системы в состояние спиновой жидкости:

$$\Delta_{RVB}(T^*) = (zN)^{-1} \sum_{\mathbf{k}} S^{(1)}(\mathbf{k}) \tanh \frac{B_{RVB}(T^*)}{2T^*} \quad (6)$$

(ср.[2,11]). Здесь T^* определяется как температура, при которой появляется нетривиальное решение уравнения для Δ_{RVB} с $m = 1$ и координационным числом z .

Вычисляя молекулярные поля $B_N(T)$ и $B_{RVB}(T)$ с помощью (2) и (4), находим

$$\begin{aligned} B_N(T) &\simeq B_N^0(T) K(T) \ln^{-n}(T/T_K), \\ B_{RVB}(T) &\simeq B_{RVB}^0(T) \ln^{-n}(T/T_K) \end{aligned} \quad (7)$$

(индекс 0 отвечает чисто гайзенберговскому взаимодействию J_{ij} ; без кондо-перенормировок). Сравнивая эти выражения, мы видим, что логарифмическое усиление обмена вследствие кондо-рассеяния благоприятствует возникновению обеих фаз, но экранирование спина ($K(T)$) влияет только на T_N , ослабляя тенденцию к антиферромагнитному спариванию.

В результате фазовая диаграмма Доньяха (T_N^0, T_K vs α) [6] сильно модифицируется в критической области $\alpha \sim \alpha_c$ и превращается в диаграмму (T_N, T^* vs α) с обширной областью существования RVB-фазы. Вид этой диаграммы зависит от геометрии решетки, формы ферми-поверхности и других факторов. Мы рассчитали температуры перехода для сферической и цилиндрической ферми-поверхностей с функциями РККИ вида $\Phi(x) \approx \pi x^{-3} \cos 2x$ и $\Phi(x) \approx -2x^{-2} \sin 2x$, соответственно, и нашли, что область существования RVB-фазы шире в последнем случае, который близок к реальной ситуации в тяжелофермионном соединении CeRu_2Si_2 [12]. Результат расчета для цилиндрической поверхности Ферми приведен на рис.2. При этом для молекулярного поля B_{RVB} использовалось приближение $B_{RVB}(T) = \lambda_2 \tilde{J}^{(1)}(R, T) \Delta_{RVB}^{(1)} S^{(1)}(\mathbf{k})$ где λ_2 - геометрический фактор. В трехмерных гайзенберговских решетках, как правило, $\lambda_2 < \lambda_1$ и RVB-фаза не реализуется, но влияние кондо-рассеяния приводит к появлению фазы спиновой жидкости вместо магнитной фазы для $\alpha > \alpha_c$.

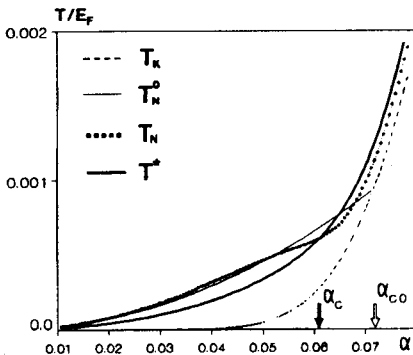


Рис.2. Модифицированная диаграмма Доньяха для конкурирующих фаз Нееля и RVB при значениях параметров $z = 6$, $\lambda_1/\lambda_2 = 2,1$, $p_F R = 2,88$. α_{c0} и α_c — критические точки, в которых на традиционной и модифицированной диаграмме Доньяха исчезает антиферромагнитное решение

Критическая область характеризуется иерархией температур $T^* > T_N > T_K$. Это означает, во-первых, что спины, участвующие в RVB-парах, в

существенной степени закраиваются кондо-взаимодействием, а во-вторых, что нейтральная спиновая жидкость близка к антиферромагнитной неустойчивости. В то же время, кондо-рассеяние "замораживается" при $T \approx T^* > T_K$, так что одноузельные кондо-синглеты не образуются, и соответствующие аномальные средние $\langle c_i^\dagger f_i \rangle$, вводимые в теориях среднего поля [2, 3] с гамильтонианом (1), в действительности равны нулю. Температура Кондо более не является точкой сингулярности, и мы можем перейти в область низких температур $T < T_K$ и рассмотреть задачу о двухкомпонентной ферми-жидкости, в которой медленные электроны с $\epsilon < T_K$ взаимодействуют с нейтральными спин-фермионами, спектр которых характеризуется энергией T^* . Константу этого взаимодействия можно оценить как $\tilde{J}(T^*)$. Именно такая картина предлагалась в [4, 5] для описания низкотемпературных свойств систем с тяжелыми фермионами (см. также [13, 14]).

3. За пределами приближения среднего поля остаются многие существенные эффекты. Прежде всего, "аномальные" средние Δ_{RVB} калибровочно неинвариантны, и учет флуктуаций фазы псевдофермионов должен привести к превращению фазового перехода в кроссовер. Известно, что в двумерной $t-J$ модели учет однородных флуктуаций калибровочных полей (флуктуаций киральности) приводит к инфракрасной расходимости [15, 16]. В трехмерной sf -обменной модели эта расходимость отсутствует и, кроме того, как видно из рис.2, переход в RVB-фазу происходит в условиях близости к антиферромагнитной неустойчивости, так что флуктуации фазы носят существенно неоднородный характер и имеют спектральную плотность антипарамагнетного типа. Учет запаздывания в РККИ-взаимодействии в диаграмме рис.1b приведет к "поляронным" перенормировкам $\sim \alpha^2 \omega \ln \frac{\epsilon_F}{T}$ и затуханию $\sim \alpha^2 T$ спин-фермионов при T . Сами спин-фермионы, в свою очередь, существенно повлияют на низкочастотный спектр электронов [4, 5, 14, 17]. Однако можно полагать, что все эти явления не изменят существенным образом общую картину возникновения двухкомпонентной ферми-жидкости, индуцированной кондо-рассеянием, согласно которой кондо-процессы в решетке предотвращают возникновение антиферромагнитной фазы в критической области параметров $\alpha \sim \alpha_c$ и одновременно стабилизируют состояние спиновой жидкости. При этом величина T^* играет роль универсальной температуры, шкалирующей свойства тяжелых фермионов, но сами спин-фермионы становятся хорошо определенными квазичастицами лишь при $T < T_{coh} \ll T^*$, когда их затухание приобретает ферми-жидкостный характер. В кроссоверной области $T^* > T > T_{coh}$ происходит превращение локализованных спинов в нейтральные элементарные возбуждения с ферми-статистикой.

Авторы признательны С.Н.Бурмистрову, Ю.М.Кагану, Г.Г.Халиуллину и Д.И.Хомскому за критические дискуссии. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 93-02-02538), Международного научного фонда (грант МВН000) и Нидерландской организации для научных исследований (NWO).

-
1. A.Millis and P.Lee, Phys. Rev. B **35**, 3394 (1986).
 2. P.Coleman and N.Andrei, J. Phys. Cond. Mat. **1**, 4057 (1989).
 3. K.Miura, T.Matsuura, and Y.Kuroda, Physica C **179**, 411 (1991).
 4. Yu.Kagan, K.A.Kikoin and N.V.Prokof'ev, Physica B **182**, 201 (1992).
 5. Ю.Каган, К.А.Кикоин, Н.В. Прокофьев, Письма в ЖЭТФ **56**, 221 (1992).

6. S.Doniach, *Physica B* **91**, 231 (1977).
7. P.W.Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987)., G.Baskaran, Z.Zou, and P.W.Anderson, *Solid State Commun.* **69**, 973 (1987)., G.Baskaran and P.W.Anderson, *Phys.Rev.B* **37**, 580 (1988).
8. A.M.Tsvelik and P.B.Wiegmann, *Adv. Phys.* **32**, 453 (1983).
9. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, ГИФМЛ, Москва, 1962г.
10. A.A.Abrikosov and A.A.Migdal, *J. Low Temp. Phys.* **3**, 519 (1970).
11. T.Tanamoto, H.Kohno and H.Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **62**, 617 (1993).
12. H.Yamagami and A.Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **62**, 592 (1993).
13. A.Tsvelik, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2142 (1992)
14. P.Coleman, E.Miranda and A.Tsvelik, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2960 (1993).
15. P.A.Lee and N.Nagaosa, *Phys. Rev. B* **46**, 5621 (1992).
16. B.L.Ioffe and A.I.Larkin, *Phys. Rev.* **39**, 8988 (1989).
17. Г.М.Элиашберг, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 28 (1987).