

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ФЕРМИ-ЖИДКОСТНАЯ ТЕОРИЯ ТЯЖЕЛОФЕРМИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

А.В.Гольцев, В.В.Красильников*

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН
194021 Санкт-Петербург, Россия

*Харьковский физико-технический институт АН Украины
310108 Харьков, Украина

Поступила в редакцию 28 декабря 1994 г.

Для описания низкотемпературных свойств тяжелофермионных соединений развита феноменологическая ферми-жидкостная теория, дающая результаты в полном согласии с микроскопическими подходами.

Необычные термодинамические и кинетические свойства тяжелофермионных соединений (ТФС) обусловлены сильными электронными корреляциями, а именно взаимодействием электронов проводимости с магнитными моментами ионов редкоземельных элементов или урана, имеющими частично заполненную f -оболочку (см., например, обзор [1]). В области температур T выше температуры Кондо T_K это взаимодействие ведет к эффекту Кондо, то есть к магнитной экранировке локализованных моментов электронами проводимости. При этом на каждом магнитном ионе экранировка происходит независимо (некогерентный эффект Кондо). В низкотемпературной области $T < T_K$ эффект Кондо носит когерентный характер и приводит к формированию немагнитного основного состояния, причем квазичастичные состояния вблизи поверхности Ферми имеют аномально большую массу $m^*/m_0 \sim 10^2$. Согласно экспериментальным данным, при $T \ll T_K$ электроны ведут себя как нормальная ферми-жидкость. С эффектом Кондо конкурирует обменное РККИ-взаимодействие, которое может частично или полностью разрушить кондовскую экранировку и сформировать магнитоупорядоченную фазу.

В настоящей работе мы обобщаем феноменологическую ферми-жидкостную теорию Ландау [2,3] на случай электронов в тяжелофермионных соединениях. Сначала мы дадим общую формулировку феноменологического подхода, а затем рассмотрим тепловые и магнитные свойства ТФС в области $T \ll T_K$. В частности, мы приведем результаты исследования влияния РККИ-взаимодействия на магнитную восприимчивость ТФС и проблему сосуществования когерентного эффекта Кондо и ферромагнетизма. Ранее феноменологический ферми-жидкостной подход или описания электронов в однопримесной модели Кондо был развит Нозьером [4] и дал хорошее согласие с точным решением [5].

Мы будем изучать систему, которая может быть описана решеточной моделью Андерсона. Система состоит из электронов проводимости в энергетической зоне $\epsilon(\mathbf{k})$, а также f -электронов в очень узкой зоне, дисперсией которой мы пренебрегаем. То есть фактически мы имеем f -уровень с энергией $\epsilon_f < \mu$, где μ есть химический потенциал. Наличие сильного одноузельного кулоновского отталкивания U_0 делает энергетически невыгодным двухкратное заполнение f -уровня. Взаимодействие между электронами проводимости и f -электронами обусловлено гибридизацией f -состояний и состояний в зоне проводимости. В предельном случае $\mu - \epsilon_f \gg 0$ и $U_0 \rightarrow \infty$ взаимодействие спина S_f f -электрона

с локальной спиновой плотностью S_c электронов проводимости описывается гамильтонианом Кондо $H = -JS_f S_c$, где J есть энергия антиферромагнитного обменного взаимодействия ($J < 0$). В этом случае число f -электронов на уровне ϵ_f оказывается порядка единицы и слабо зависит от температуры.

Предлагаемый феноменологический подход основан на двух предположениях. Во-первых, мы полагаем, что при $T \ll T_K$ волновая функция квазичастиц вблизи поверхности Ферми есть суперпозиция блоховских волновых функций электронных состояний в зоне проводимости и узкой f -зоне:

$$\Psi_\alpha(\mathbf{k}) = A_{\alpha\mathbf{k}}\Psi_\alpha^c(\mathbf{k}) + B_{\alpha\mathbf{k}}\Psi_\alpha^f(\mathbf{k}), \quad (1)$$

где α есть спиновый индекс спина $s = 1/2$. Во-вторых, мы полагаем, что для фиксирования заполнения f -уровня можно ввести дополнительный химический потенциал λ и таким образом учесть хаббардовское отталкивание U_0 . Эти предположения можно обосновать либо в рамках теории среднего поля [6], либо в рамках вариационного подхода Гуцвиллера [7].

Введем функцию распределения, являющуюся в нашем случае матрицей по спиновым (α, β) и зонным (c, f) индексам:

$$N = \begin{pmatrix} N_{\alpha\beta}^c(\mathbf{k}) & N_{\alpha\beta}^{cf}(\mathbf{k}) \\ N_{\alpha\beta}^{fc}(\mathbf{k}) & N_{\alpha\beta}^f(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Диагональные элементы матрицы описывают распределение электронов по импульсам в зоне проводимости и в f -зоне. Введение недиагональных элементов N^{cf} и N^{fc} есть следствие предположения (1). Согласно общим принципам теории Ландау [8], энтропия неравновесной электронной жидкости равна

$$S(N) = -\text{Sp}(N \ln N + (1 - N) \ln(1 - N)). \quad (3)$$

Определим функционал энергии, учитывая только обменное взаимодействие между электронами проводимости и f -электронами:

$$E(N) = \sum_{\alpha\mathbf{k}} (\epsilon(\mathbf{k}) N_{\alpha\alpha}^c(\mathbf{k}) + \epsilon_f N_{\alpha\alpha}^f(\mathbf{k})) + \\ + \frac{1}{N_u} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (N_{\beta\alpha}^f(\mathbf{k}) F_{\alpha\gamma,\beta\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) N_{\delta\gamma}^c(\mathbf{p}) + N_{\beta\alpha}^{fc}(\mathbf{k}) K_{\alpha\gamma,\beta\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) N_{\delta\gamma}^{cf}(\mathbf{p})), \quad (4)$$

где N_u есть число элементарных ячеек в системе, а

$$F_{\alpha\gamma,\beta\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = G(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \vec{\sigma}_{\gamma\delta}, \quad K_{\alpha\gamma,\beta\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}. \quad (5)$$

Мы будем изучать только изотропный случай. Тогда при \mathbf{k} и \mathbf{p} , лежащих на поверхности Ферми, функции $G(\mathbf{k}, \mathbf{p})$ и $\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{p})$ можно разложить в ряды по полиномам Лежандра

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) G_l P_l(\cos \nu), \quad \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \varphi_l P_l(\cos \nu). \quad (6)$$

Свободная энергия системы равна

$$\Omega(N) = E(N) - TS(N) - \mu N_t - \lambda N_f. \quad (7)$$

Химический потенциал μ определяется заданием полного числа электронов N_t в одной элементарной ячейке:

$$N_t = \frac{1}{N_u} \sum_{\alpha \mathbf{k}} (N_{\alpha\alpha}^c(\mathbf{k}) + N_{\alpha\alpha}^f(\mathbf{k})) = \text{const}. \quad (8)$$

Дополнительный химический потенциал λ определяется заданием числа f -электронов:

$$N_f = \frac{1}{N_u} \sum_{\alpha \mathbf{k}} N_{\alpha\alpha}^f(\mathbf{k}) = \text{const}. \quad (9)$$

Параметр λ перенормирует энергию f -уровня: $\epsilon_f^* = \epsilon_f - \lambda$. Поэтому удобно функционал энергии определить как $E^*(N) = E(N) - \lambda N_f$. Вариация $E^*(N)$ по N дает матрицу квазичастичных энергий ϵ с компонентами:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha\beta}^c(\mathbf{k}) &= \frac{\delta E^*}{\delta N_{\beta\alpha}^c(\mathbf{k})} = \epsilon(\mathbf{k})\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{N_u} \sum_{\gamma\delta\mathbf{p}} F_{\alpha\gamma,\beta\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) N_{\delta\gamma}^f(\mathbf{p}), \\ \epsilon_{\alpha\beta}^f(\mathbf{k}) &= \frac{\delta E^*}{\delta N_{\beta\alpha}^f(\mathbf{k})} = \epsilon_f^*\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{N_u} \sum_{\gamma\delta\mathbf{p}} F_{\alpha\gamma,\beta\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) N_{\delta\gamma}^c(\mathbf{p}), \\ \epsilon_{\alpha\beta}^{cf}(\mathbf{k}) &= \frac{\delta E^*}{\delta N_{\beta\alpha}^{fc}(\mathbf{k})} = \frac{1}{N_u} \sum_{\gamma\delta\mathbf{p}} K_{\alpha\gamma,\beta\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) N_{\delta\gamma}^{cf}(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (10)$$

Вариация свободной энергии (7) по N дает вариационное уравнение

$$\epsilon - \mu \hat{1} = T \ln(N^{-1} - \hat{1}), \quad (11)$$

где $\hat{1}$ — единичная матрица. Подстановка (10) в (11) дает интегральное уравнение для определения N .

Рассмотрим решение этих уравнений для парамагнитного состояния. В этом случае решение ищем в виде, не зависящем от спина: $\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon\delta_{\alpha\beta}$, $N_{\alpha\beta} = N\delta_{\alpha\beta}$. Матрицу ϵ можно представить в виде

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & b \\ b^* & \epsilon_f^* \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где мы ввели параметр

$$b = \frac{2\varphi_0}{N_u} \sum_{\mathbf{k}} N^{cf}(\mathbf{k}), \quad (13)$$

который для простоты полагаем вещественным. Матрицу квазичастичных энергий ϵ можно привести к диагональному виду с помощью унитарного преобразования \mathcal{U} :

$$\epsilon = \mathcal{U}^{-1} \begin{pmatrix} E_1(k) & 0 \\ 0 & E_2(k) \end{pmatrix} \mathcal{U}, \quad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{\mathbf{k}} & -\sin \theta_{\mathbf{k}} \\ \sin \theta_{\mathbf{k}} & \cos \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Диагональные элементы представляют собой квазичастичные энергии:

$$E_1(\mathbf{k}) = \epsilon_f^* - b \operatorname{ctg} \theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\epsilon_f^* + \epsilon(\mathbf{k}) - [(\epsilon_f^* - \epsilon(\mathbf{k}))^2 + 4b^2]^{1/2}),$$

$$E_2(\mathbf{k}) = \epsilon_f^* + b \operatorname{tg} \theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\epsilon_f^* + \epsilon(\mathbf{k}) + [(\epsilon_f^* - \epsilon(\mathbf{k}))^2 + 4b^2]^{1/2}). \quad (15)$$

Используя (11), функцию распределения N можно также представить в диагональном виде $N = U^{-1} N_d U$ с диагональными элементами $N_d^c = f(E_1(\mathbf{k}))$, $N_d^f = f(E_2(\mathbf{k}))$, где $f(E) = [\exp((E - \mu)/T) + 1]^{-1}$. Подстановка этого решения для N в уравнения (8), (9) и (13) приводит к следующей полной и самосогласованной системе уравнений:

$$N_t = \frac{2}{N_u} \sum_{\mathbf{k}} [f(E_1(\mathbf{k})) + f(E_2(\mathbf{k}))],$$

$$N_f = \frac{2}{N_u} \sum_{\mathbf{k}} [f(E_1(\mathbf{k})) \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} + f(E_2(\mathbf{k})) \cos^2 \theta_{\mathbf{k}}],$$

$$1 = (2\varphi_0/N_u) \sum_{\mathbf{k}} [f(E_1(\mathbf{k})) - f(E_2(\mathbf{k}))]/[E_1(\mathbf{k}) - E_2(\mathbf{k})], \quad (16)$$

которая позволяет определить три независимых параметра: химический потенциал μ , перенормированную энергию f -уровня ϵ_f^* и параметр b . Сравнивая уравнения (16) с результатами работы [6], легко убеждаемся, что эти уравнения полностью совпадают с уравнениями теории среднего поля, если параметр взаимодействия φ_0 положить равным энергии обменного взаимодействия J . Пусть полное число электронов $N_t < 2$, тогда при $T = 0$ основное состояние характеризуется параметрами

$$T_0 \equiv \epsilon_f^* - \mu = \mu \exp(-1/2|\varphi_0|\rho_0), \quad b = (N_f T_0 / 2\rho_0)^{1/2}. \quad (17)$$

Эффективная масса квазичастиц в нижней зоне $E_1(\mathbf{k})$ и плотность состояний ρ^* вблизи поверхности Ферми значительно увеличиваются по сравнению с начальными параметрами: $m^*/m_0 = \rho^*/\rho_0 = 1 + N_f/2T_0\rho_0 \gg 1$, где ρ_0 – плотность состояний в зоне $\epsilon(\mathbf{k})$. В свою очередь увеличение плотности состояний приводит к увеличению линейного коэффициента теплоемкости $\gamma = 2\pi^2\rho^*/3$.

Рассмотрим магнитные свойства ТФС в рамках феноменологического подхода. Во внешнем магнитном поле H_0 , направленном вдоль оси z , электроны проводимости и f -электроны со спином $\pm 1/2$ приобретают энергию $\mp g_c \mu_B H_0/2$ и $\mp g_f \mu_B H_0/2$, соответственно. Решая уравнения (8)–(11), мы нашли, что при $T = 0$ статическая магнитная восприимчивость равна

$$\chi = g_f^2 \mu_B^2 N_f / 4(T_0 - T_m), \quad (18)$$

где параметр T_m равен $2N_f G_0^2 \rho_0$. Основной вклад в χ вносят f -электроны. Чтобы понять физический смысл параметра T_m , необходимо заметить, что он обусловлен обменным взаимодействием между f -электронами и электронами проводимости. Именно это взаимодействие приводит к косвенному обменному РККИ-взаимодействию между спинами локализованных f -электронов. Нетрудно показать, что параметр T_m есть характерная энергия РККИ-взаимодействия.

Согласно (18) РККИ-взаимодействие усиливает магнитную восприимчивость и приводит к нестабильности тяжелофермионного состояния относительно магнетизма. В области параметров $T_0 < T_m$ основное состояние системы является магнитоупорядоченным, а эффект Кондо полностью подавлен. Этот критерий совпадает с общеизвестным критерием, обсуждавшимся, например, в [1], если параметр G_0 положить пропорциональным энергии J . Если $T_0 > T_m$, то при $T = 0$ система находится в парамагнитном тяжелофермионном состоянии. Таким образом, при $T = 0$ сосуществование ферромагнетизма и когерентного эффекта Кондо невозможно. Однако это становится возможным при $T \neq 0$, если низкотемпературный кондовский масштаб $T_0(17)$ чуть больше T_m . Анализ температурного поведения магнитной восприимчивости $\chi(T)$ показывает, что при повышении температуры от нуля $\chi(T)$ растет и расходится при критической температуре $T_c = (\sqrt{2}/\pi)T_0(T_0/T_m - 1)^{1/2}$, что является признаком ферромагнитного перехода. При $T > T_c$ формируется ферромагнитное тяжелофермионное состояние, в котором когерентный эффект Кондо не разрушается ($b \neq 0$), а лишь частично подавляется. Конечно, при дальнейшем повышении температуры выше некоторой критической температуры T_c^* ферромагнитный порядок разрушается и система опять переходит в парамагнитное состояние, но с некогерентным эффектом Кондо. Подобный сценарий температурного поведения обсуждался недавно в [9] в рамках микроскопической теории.

-
1. N.V.Brandt and V.V.Moshchalkov, Adv. Phys. **33**, 373 (1984).
 2. Л.Д.Ландау, ЖЭТФ **30**, 1058 (1956).
 3. В.П.Силин, ЖЭТФ **33**, 495 (1957).
 4. P.A.Nozières, J. Low. Temp. Phys. **17**, 31 (1974).
 5. A.M.Tsvelik and P.B.Wiegman, Adv. Phys. **32**, 453 (1983).
 6. D.M.News and N.Read, Adv. Phys. **36**, 799 (1987).
 7. T.M.Rice and K.Ueda, Phys. Rev. **B34**, 6420 (1986).
 8. А.И.Ахиезер, В.В.Красильников, С.В.Пелетминский, А.А.Яценко, УФН **163**, 1 (1993); Phys. Rep. **245**, 1 (1994).
 9. A.V.Goltsev, Physica **B192**, 403 (1993).