

# Проявление спин-зарядовых флуктуаций в спектральных и термодинамических свойствах квазидвумерных редкоземельных интерметаллидов

В.В. Вальков, А.О. Злотников

*Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр  
«Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук»  
Академгородок, 50-38, г. Красноярск, 660036, Россия  
E-mail: vvv@iph.krasn.ru*

Статья поступила в редакцию 1 августа 2016 г., опубликована онлайн 26 декабря 2016 г.

В рамках модифицированной периодической модели Андерсона, включающей обменное взаимодействие в подсистеме локализованных состояний, показано, что спиновые и зарядовые флуктуации в квазидвумерных интерметаллидах с редкоземельными ионами, находящимися в состоянии смешанной валентности, существенно влияют как на спектр магнитных возбуждений, так и на область реализации антиферромагнитной фазы. Спектральные характеристики этой фазы находились методом диаграммной техники для операторов Хаббарда при использовании однопетлевого приближения, позволяющего учесть спин-зарядовые флуктуационные вклады в компоненты массового и силового операторов. Развитая теория позволила количественно описать зависимость температуры Нееля от давления, наблюдаемую в квазидвумерном антиферромагнитном интерметаллиде с тяжелыми фермионами  $\text{CeRhIn}_5$ .

В рамках модифікованої періодичної моделі Андерсона, що включає обмінну взаємодію в підсистемі локалізованих станів, показано, що спінові та зарядові флуктуації в квазидвовимірних інтерметалідах з рідкісноземельними іонами, які перебувають у стані змішаної валентності, істотно впливають як на спектр магнітних збуджень, так і на область реалізації антиферомагнітної фази. Спектральні характеристики цієї фази знаходили методом діаграмної техніки для операторів Хаббарда при використанні однопетлевого наближення, що дозволяє врахувати спин-зарядові флуктуаційні вклади в компоненти масового й силового операторів. Розвинена теорія дозволила кількісно описати залежність температури Нееля від тиску, що спостерігається в квазидвовимірному антиферомагнітному інтерметаліді з важкими ферміонами  $\text{CeRhIn}_5$ .

PACS: 71.27.+a Электронные системы с сильной корреляцией, тяжелые фермионы;  
75.50.Ee Антиферромагнетики;  
75.30.Et Обменные и сверхобменные взаимодействия;  
75.40.Gb Динамические свойства (динамическая чувствительность, спиновые волны, спиновая диффузия, динамический скейлинг и т.д.).

Ключевые слова: тяжелые фермионы, антиферромагнетизм, спин-зарядовые флуктуации,  $\text{CeRhIn}_5$ , периодическая модель Андерсона.

## 1. Введение

Значительный интерес, проявляемый к свойствам тяжелофермионных антиферромагнетиков, обусловлен реализацией в них необычной сверхпроводимости, обнаружением квантовых фазовых переходов, а также наличием ярко выраженной конкуренции между тенденцией к магнитному упорядочению и кондовскими

флуктуациями. Квантовые фазовые переходы инициируются внешним или химическим давлением и сопровождаются качественными изменениями структуры основного состояния и, соответственно, наблюдаемых характеристик. Например, в тяжелофермионных металлах  $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$  и  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  прохождение через квантовую критическую точку при изменении контрольных параметров, таких как уровень допирования  $x$  и маг-

нитное поле, сопровождается разрушением дальнего антиферромагнитного (AFM) порядка [1]. В цериевых соединениях типа  $\text{CePd}_2\text{Si}_2$ ,  $\text{CeIn}_3$  [2],  $\text{CeRhIn}_5$  [3],  $\text{CePt}_2\text{In}_7$  [4] в окрестности предполагаемой квантовой критической точки под давлением наблюдается сверхпроводимость.

Механизм возникновения магнитного упорядочения остается одним из основных вопросов физики тяжелофермионных систем. Известно, что дальний AFM порядок, обусловленный косвенным обменным взаимодействием Рудермана–Киттеля–Касуйа–Йосиды (РККИ), и кондовские флуктуации конкурируют друг с другом [5]. Поэтому редкоземельные соединения обычно описываются в рамках модели Кондо, в которой тип основного состояния зависит от результата отмеченной выше конкуренции: либо состояние с дальним магнитным порядком (чаще всего антиферромагнитным), либо немагнитное металлическое состояние. При таком сценарии в квантовой критической точке одновременно с разрушением (возникновением) дальнего AFM порядка может устанавливаться (подавляться) режим Кондо и реализовываться переход от локализованных к делокализованным электронам [6,7]. Следует отметить, что в системах с тяжелыми фермионами в квантовой критической точке наблюдаются аномальные особенности, такие как расходимость эффективной массы электронов и скачкообразное расширение поверхности Ферми. Эти аномалии не могут быть описаны в рамках теории квантовых фазовых переходов Герца–Миллса для зонных магнетиков.

В отмеченных сценариях конкуренции не учитывается тот факт, что  $4f$ -электроны в AFM фазе являются квазилокализованными и образуют когерентное тяжелофермионное состояние. На существование такого состояния указывают экспериментальные данные, демонстрирующие, что, например, в AFM фазе  $\text{CeRhIn}_5$  эффективная и циклотронная массы электронов значительно превышают массу свободных электронов [8,9]. В работе [10] высказывалось предположение о реализации в этом соединении режима смешанной валентности. В этой связи представляется естественным, что формирование магнитного упорядочения следует описывать в рамках периодической модели Андерсона при учете сильной связи между спиновыми и зарядовыми степенями свободы в режиме, когда затравочный локализованный уровень и уровень Ферми близки друг к другу. Существенно, что такой подход позволяет описать как сильную перенормировку электронной массы, так и изменение топологии поверхности Ферми в квантовой критической точке без привлечения сценария, основанного на разрушении режима Кондо [11–13].

Следует отметить, что в работе [14] анализировался критерий Стонера на фоне состояния Кондо в системах с сильным орбитальным вырождением  $f$ -уровня. Используя подход, основанный на введении вспомогательных

фермионов для сохранения правильных коммутационных соотношений, было показано, что квантовые флуктуации приводят к реализации слабого антиферромагнетизма в подсистеме коллективизированных электронов (типа волны спиновой плотности). При этом за счет гибридизации слабый антиферромагнетизм индуцировался и в локализованной подсистеме. Однако режим смешанной валентности при этом не рассматривался.

Изучение условий формирования AFM упорядочения в периодической модели Андерсона проводилось ранее в приближении Хартри–Фока [15], а также при использовании метода слейв-бозонов [16,17]. Следует, однако, подчеркнуть, что в отмеченных среднеполевых подходах температура Нееля  $T_N$  оказывалась низкой только вблизи квантовых фазовых переходов по параметру гибридизации  $V$  между коллективизированными и локализованными электронами, или по параметру внутриаомного кулоновского отталкивания  $U$  локализованных электронов. Это означало, что даже незначительное изменение внешних условий (таких как давление) способно индуцировать в системе квантовый фазовый переход из AFM в парамагнитную (PM) фазу. Между тем во многих тяжелофермионных соединениях, несмотря на то, что  $T_N$  не превышает нескольких кельвин, антиферромагнетизм является достаточно устойчивым к давлению. Например, в  $\text{CeRhIn}_5$  с  $T_N = 3,8$  К при увеличении давления температура Нееля сначала растет, затем наблюдается линейный спад, и только при давлении около 20 кбар антиферромагнетизм разрушается.

Альтернативный подход для описания магнетизма в рассматриваемых системах связан с расчетом динамической магнитной восприимчивости. Магнитная восприимчивость, определенная в PM фазе, позволяет найти температуру неустойчивости по отношению к формированию того или иного типа магнитного упорядочения. Задача об определении динамической магнитной восприимчивости непосредственно в AFM фазе приводит к необходимости решения самосогласованных уравнений, позволяющих найти как температурную зависимость AFM параметра порядка, так и температуру Нееля. Ранее динамическая магнитная восприимчивость в PM фазе периодической модели Андерсона вычислялась с использованием метода расщепления для уравнений движения неприводимых функций Грина [18] и в рамках приближения хаотических фаз [19] в пределе слабого кулоновского взаимодействия. Теория возмущения по гибридизационному взаимодействию для вычисления динамической магнитной восприимчивости была предложена в работе [20]. Было показано, что в режиме смешанной валентности эффективное взаимодействие, обусловленное гибридизацией между локализованными и коллективизированными электронами, подавляет любые магнитные флуктуации. В пределе  $U \rightarrow \infty$  была разработана методика вычисления

динамической магнитной восприимчивости на основе диаграммной техники для операторов Хаббарда в рамках модели Хаббарда и  $t - J$ -модели [21]. В работе [22] с использованием такого подхода была определена динамическая магнитная восприимчивость в РМ фазе периодической модели Андерсона при  $U \rightarrow \infty$ .

Многие цериевые соединения с тяжелыми фермионами, например соединения группы  $\text{Ce}_n\text{TmIn}_{3n+2m}$  [23], обладают квазидвумерной (квази-2D) структурой, схематически представленной на рис. 1. Известно, что для квази-2D гейзенберговского антиферромагнетика температура Нееля в приближении Тябликова определяется выражением  $T_N = \pi J / [\ln(J/K) + c]$ , в котором  $J$  — параметр обмена между ближайшими ионами в плоскости  $xy$ , параметр  $K$  задает величину обменного взаимодействия между ближайшими соседями вдоль оси  $z$  ( $K \ll J$ ),  $c$  — константа, зависящая от типа решетки [24]. Приведенная формула свидетельствует об уменьшении температуры перехода по сравнению с пространственно изотропным случаем обменной связи. Для соединения  $\text{CeRhIn}_5$  на основе данных экспериментов по нейтронной спектроскопии были оценены параметры обмена между ионами Ce  $J = 0,74$  мэВ,  $K = 0,1$  мэВ [25]. В работе [25] также учитывался слабый обмен между следующими за ближайшими соседями вдоль оси  $z$ , что позволило описать несоразмерную магнитную структуру при атмосферном давлении. Поскольку под действием давления AFM структура  $\text{CeRhIn}_5$  становится соразмерной [26], в этом случае дальними обменными параметрами можно пренебречь.

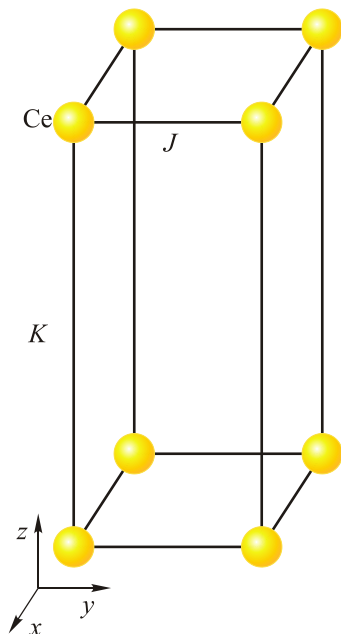


Рис. 1. Схематичное изображение квазидвумерной структуры соединений группы Ce115. Обозначения  $J$ ,  $K$  определяют параметры обменного взаимодействия между различными ионами Ce.

Для редкоземельных интерметаллидов с магнитным упорядочением существенным является то обстоятельство, что в наиболее интересном случае реализации режима сильных электронных корреляций, а также когда энергия одноэлектронного возбуждения близка к уровню Ферми (ситуация смешанной валентности), процессы гибридизации разделяются на высокоэнергетические и низкоэнергетические [27]. К первым относятся переходы, при которых из-за сильных корреляций энергия системы изменяется на величину много большую, чем параметр гибридизационного взаимодействия. Наличие такой большой энергетической разности позволяет учесть отмеченное гибридизационное взаимодействие по операторной форме теории возмущений в атомном представлении и получить эффективный гамильтониан, описывающий, в частности, обменную связь между квазилокализованными состояниями редкоземельных ионов. Параметр такого взаимодействия определяется соотношением  $J \sim V^4/U^3$ , где  $U$  — энергия внутриаомного отталкивания,  $V$  — интенсивность гибридизации между локализованными и коллективизированными электронами. Оставшиеся низкоэнергетические гибридизационные вклады определяют свойства режима смешанной валентности. Следует отметить, что в соединениях Ce115 (например,  $\text{CeRhIn}_5$ ) роль локализованных электронов играют  $4f$ -электроны Ce, а коллективизированные состояния формируются преимущественно  $p$ -электронами In.

Принимая во внимание отмеченные выше особенности электронной структуры редкоземельных интерметаллидов, в данной работе на основе расширенной периодической модели Андерсона, в которой явно учитывается обменное взаимодействие между  $4f$ -электронами, исследована AFM фаза квази-2D цериевых интерметаллидов с тяжелыми фермионами. Для получения уравнений самосогласования применена диаграммная техника для операторов Хаббарда. Вычисление поперечной спиновой функции Грина осуществлялось в однопетлевом приближении, позволяющем получить выражения для компонент массового и силового операторов при учете вкладов спин-зарядовых флуктуаций. Эффективное взаимодействие между квазилокализованными электронами способствует формированию AFM состояния, а гибридизационное взаимодействие между локализованной и коллективизированной электронными подсистемами рассматривается в качестве возмущения. Показано, что в таком подходе возможна реализация дальнего AFM порядка в режиме смешанной валентности. В результате численного решения уравнений самосогласования получена зависимость температуры Нееля от давления для квази-2D цериевых интерметаллидов. Эта зависимость не только качественно согласуется с экспериментальными данными [3], но и количественно хорошо описывает результаты эксперимента. Выяснено, что за разрушение антиферромаг-

нетизма ответственны низкоэнергетические гибридационные процессы. При этом выделяются два вклада, влияющие на реализацию магнитного упорядочения: сверхобменное взаимодействие  $4f$ -электронов стремится установить дальний AFM порядок, а спин-зарядовые флуктуации, обусловленные низкоэнергетическими гибридационными процессами  $f$ - и  $p$ -электронов, могут как способствовать антиферромагнетизму, так и подавлять его. Оценены парциальные вклады, обусловленные этими микроскопическими механизмами, в эффективные параметры обменных взаимодействий соединения CeRhIn<sub>5</sub>.

## 2. Расширенная модель Андерсона в атомном представлении

Гамильтониан расширенной периодической модели Андерсона, в которой учитывается сверхобменное взаимодействие между  $4f$ -электронами и используется двухподрешеточное описание квази-2D электронной структуры, можно представить в виде

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}. \quad (1)$$

Первое слагаемое описывает невзаимодействующие локализованные и коллективизированные электроны:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{j=1,2} \left\{ \sum_{k\sigma} \xi_{\alpha k} \alpha_{jk\sigma}^\dagger \alpha_{jk\sigma} + \sum_{k\sigma} \xi_{\beta k} \beta_{jk\sigma}^\dagger \beta_{jk\sigma} + \sum_{f\sigma} \xi_{\sigma}^F X_{jf}^{\sigma\sigma} + \sum_{g\sigma} \xi_{\sigma}^G Y_{fg}^{\sigma\sigma} \right\}. \quad (2)$$

Оператор  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mix}}$  — оператор гибридационного взаимодействия между локализованными и коллективизированными электронами:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} = \sum_{j,k\sigma} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ (V_k + W_k) \alpha_{jk\sigma}^\dagger (X_{jk\sigma} + Y_{jk\sigma}) + (W_k - V_k) \beta_{jk\sigma}^\dagger (X_{jk\sigma} - Y_{jk\sigma}) \right\} + \text{h.c.} \quad (3)$$

Эффективная AFM связь между локализованными электронами определяется третьим слагаемым гамильтониана:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}} = \sum_j \sum_{\langle fg \rangle} J_{fg} \left( \mathbf{s}_{jf} \mathbf{s}_{jg} - \frac{1}{4} \hat{N}_{jf} \hat{N}_{jg} \right) + \sum_{i \neq j} \sum_{\langle fg \rangle} K_{fg} \left( \mathbf{s}_{if} \mathbf{s}_{jg} - \frac{1}{4} \hat{N}_{if} \hat{N}_{jg} \right). \quad (4)$$

Здесь для описания квазидвумерности редкоземельных интерметаллидов введено суммирование по индексу  $j = 1, 2$ , который нумерует плоскости вдоль оси  $z$  в элементарной ячейке. Рассматривается AFM структура  $G$ -типа. Операторы  $\alpha_{jk\sigma}$  и  $\beta_{jk\sigma}$  описывают боголюбовские квазичастицы, формирующиеся в коллек-

тивизированной электронной подсистеме за счет перехода к двухподрешеточному представлению. Затравочные энергии квазичастиц определяются выражениями  $\xi_{\alpha k} = \xi_k + \Gamma_k$  и  $\xi_{\beta k} = \xi_k - \Gamma_k$ , где  $\xi_k = \varepsilon_0 + t_k - \mu$ ,  $\varepsilon_0$  — одноузловая энергия коллективизированного электрона,  $\mu$  — химический потенциал, функции  $t_k$  и  $\Gamma_k$  определяются как фурье-образы интегралов перескока внутри одной подрешетки и между подрешетками соответственно. Предполагается, что перескоки возможны только в плоскости  $xy$ .

Локализованные  $4f$ -электроны, относящиеся к узлу  $l$ , описываются в атомном представлении с помощью операторов Хаббарда  $X_l^{nn'} = |n; l\rangle \langle l; n'|$ , где  $|n; l\rangle$  — одно из атомных состояний. Состояние  $|0; l\rangle$  определяет состояние без локализованных электронов на узле  $l$ . Состояние с одним электроном на узле, обладающим проекцией спина  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ , обозначается  $|\sigma; l\rangle$ . Узлы, обозначаемые индексом  $f$ , относятся к  $F$ -подрешетке, для которой при наличии антиферромагнетизма  $\langle S_{jf}^z \rangle = R > 0$ . Узлы  $G$ -подрешетки нумеруются индексом  $g$  и для них справедливо равенство  $\langle S_{jg}^z \rangle = -R$ . Затравочная энергия  $4f$ -электрона перенормируется при учете самосогласованного среднего поля  $\xi_{\sigma}^F = E_0 - \mu - (J_0 + K_0)n_L / 4 - \eta_{\sigma} \tilde{h}$ ,  $\tilde{h} = (J_0 + K_0)R / 2$ ,  $\xi_{\sigma}^G = \xi_{\sigma}^F$ , где  $n_L$  — среднее число локализованных электронов на узле,  $J_0 = 4J$ ,  $K_0 = 2K$ . Зависящая от  $\sigma$  функция  $\eta_{\sigma}$  определяется обычным образом:  $\eta_{\sigma} = 1$ , если  $\sigma = \uparrow$ , и  $\eta_{\sigma} = -1$ , если  $\sigma = \downarrow$ .

В слагаемом  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mix}}$  величины  $V_k$  и  $W_k$  обозначают фурье-образы интегралов гибридации в плоскости  $xy$  между электронами, находящимися в одной подрешетке и между подрешетками соответственно.

Величина обменного взаимодействия между локализованными электронами в плоскости  $xy$  задается параметром  $J_{fg}$ , а вдоль оси  $z$  — параметром  $K_{fg}$ . Предполагается, что обменное взаимодействие реализуется только между ближайшими соседями. Это отражено посредством заключения индексов узлов  $f$  и  $g$  у знака суммы в угловые скобки.  $\mathbf{S}_{jm}$  — квазиспиновый векторный оператор локализованной подсистемы, компоненты которого связаны с операторами атомного представления формулами  $S_{jm}^+ = X_{jm}^{\uparrow\downarrow}$ ,  $S_{jm}^- = X_{jm}^{\downarrow\uparrow}$ ,  $S_{jf}^z = \sum_{\sigma} (\eta_{\sigma} / 2) X_{jf}^{\sigma\sigma}$ . Оператор числа локализованных электронов на узле  $f$  определяется в виде  $\hat{N}_{jf} = \sum_{\sigma} X_{jf}^{\sigma\sigma}$ .

## 3. Массовый и силовой операторы для поперечной спиновой функции Грина

Для нахождения спектра магнитных возбуждений при учете спин-зарядовых флуктуаций, а также для получения уравнения самосогласования в AFM фазе, воспользуемся диаграммной техникой для операторов Хаббарда [28,29]. Введем поперечную спиновую мацубаровскую функцию Грина в атомном представлении:

$$D_{\perp}^{Aj, Bj_1}(m\tau; m'\tau') = - \left\langle T_{\tau} X_{jm}^{\uparrow\downarrow}(\tau) X_{j_1 m'}^{\downarrow\uparrow}(\tau') S(\beta) \right\rangle_{0,c}, \quad (5)$$

с помощью которой будут описываться магнитные свойства системы. Зависящие от времени операторы Хаббарда записаны в представлении взаимодействия,  $T_{\tau}$  — оператор упорядочения по времени. Обозначение « $Aj$ » введено для того, чтобы показать, что хаббардовский оператор, стоящий на первом месте в определении функции Грина, относится к плоскости  $j$  элементарной ячейки и принадлежит к той или иной подрешетке:  $A = F$ , если  $\mathbf{R}_m = \mathbf{R}_f$ , и  $A = G$ , если  $\mathbf{R}_m = \mathbf{R}_g$ . Аналогичным образом индекс « $Bj_1$ » однозначно определяет, к какой подрешетке и плоскости относится второй оператор функции Грина. Усреднение ведется по статистическому ансамблю, определяемому гамильтонианом  $\hat{\mathcal{H}}_0$ . Матрица рассеяния имеет обычный вид

$$S(\beta) = T_{\tau} \exp \left( - \int_0^{\beta} \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}(\tau) d\tau \right),$$

где оператор взаимодействия  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$  включает операторы гибридизационного и обменного взаимодействий,  $\beta = 1/T$  — обратная температура.

Фурье-преобразование и разложение по квазиимпульсам мацубаровской функции Грина записывается в виде

$$D_{\perp}^{Aj, Bj_1}(m\tau, m'\tau') = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, i\omega_l} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'}) - i\omega_l(\tau - \tau')} D_{\perp}^{Aj, Bj_1}(\mathbf{q}, i\omega_l), \quad (6)$$

где  $i\omega_l$  — четные мацубаровские частоты. В дальнейшем используется четырехмерный вектор  $q = (\mathbf{q}, i\omega_l)$ .

Для сокращения записи вводится матричная функция Грина  $\hat{D}_{\perp}$  в блочном виде

$$\hat{D}_{\perp} = \begin{bmatrix} \hat{D}_{\perp}^{FF} & \hat{D}_{\perp}^{FG} \\ \hat{D}_{\perp}^{GF} & \hat{D}_{\perp}^{GG} \end{bmatrix}, \quad \hat{D}_{\perp}^{AB} = \begin{bmatrix} D_{\perp}^{A1, B1}(q) & D_{\perp}^{A1, B2}(q) \\ D_{\perp}^{A2, B1}(q) & D_{\perp}^{A2, B2}(q) \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Эта функция может быть записана через произведение  $\hat{D}_{\perp} = \hat{G}_{\perp} \hat{P}$ , где  $\hat{P}$  — матрица для компонент силового оператора [30,31]. Уравнение Дайсона для матричной функции  $\hat{G}_{\perp}$  имеет вид

$$\hat{G}_{\perp} = \hat{G}_{\perp}^{(0)} + \hat{G}_{\perp}^{(0)} \hat{\Sigma} \hat{G}_{\perp}, \quad (8)$$

где функция  $\hat{G}_{\perp}^{(0)}$  определяется через силовой оператор из уравнения

$$\hat{G}_{\perp}^{(0)} = \hat{G}^{(0)} + \hat{G}^{(0)} \hat{P} \hat{I} \hat{G}_{\perp}^{(0)}. \quad (9)$$

Компоненты диагональной матричной функции  $\hat{G}^{(0)}$  определяют затравочные квазиспиновые функции Грина для  $F$ - и  $G$ -подрешеток,  $\hat{\Sigma}$  — матричный массовый оператор,  $\hat{I}$  — матрица, составленная из фурье-образов обменных интегралов.

Если локализованный уровень полностью заполнен (уровень Ферми лежит выше  $f$ -уровня), то система близка к поведению гейзенберговского антиферромагнетика. В этом случае дальний AFM порядок полностью определяется эффективным обменным взаимодействием в локализованной подсистеме. В случае частичного заполнения локализованного уровня (но близком к режиму, когда  $n_L = 1$ ) важными становятся ренормировки, связанные со спин-зарядовыми флуктуациями. Эти ренормировки проявляются в основных характеристиках антиферромагнетика, таких как спектр спин-волновых возбуждений, AFM параметр порядка, температура Нееля. В дальнейшем в уравнениях (8), (9) вклады обменного взаимодействия будут учитываться в простейшем беспетлевом приближении (приближение Тябликова). При этом в массовом и силовом операторах будут рассматриваться поправки только от гибридизационного взаимодействия в однопетлевом приближении [32].

На рис. 2, 3 приведены типы диаграмм для произвольных компонент  $A_j B_j$  матричных массового и силового операторов соответственно. Диаграммы получены при использовании принципа топологической непрерывности [33]. Следует отметить, что выражения не зависят от номера  $j$  плоскости в квази-2D элементарной ячейке, так как гибридизация возможна только в плоскости  $xy$ , и в дальнейшем данный индекс опускается. На рисунках сплошные линии с двумя стрелками  $\triangleright$  или  $\blacktriangleright$  обозначают пропагаторы в приближении Хаббард-I для локализованных электронов с проекцией спинового момента  $\uparrow$  и  $\downarrow$  соответственно в двухподрешеточном представлении. Затравочные функции Грина  $f$ -электронов обозначены сплошными линиями с одной стрелкой  $\triangleright$  ( $\blacktriangleright$ ). Сплошные линии с двумя тонкими стрелками определяют любой из четырех пропагаторов для коллективизированных электронов, полученных при переходе к боголюбовским операторам. Точка пересечения различных линий на диаграмме свидетельствует о наличии гибридизационного взаимодействия. Символы  $\circ$ ,  $\bullet$  обозначают хаббардовские концевые множители  $F_{A\sigma} = \langle X_m^{00} + X_m^{\sigma\sigma} \rangle$  для соответ-

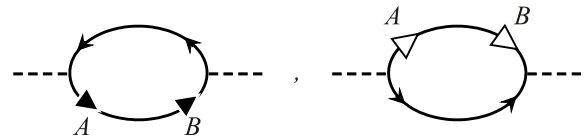


Рис. 2. Однопетлевые диаграммы для  $AB$ -компоненты массового оператора поперечной спиновой функции Грина.

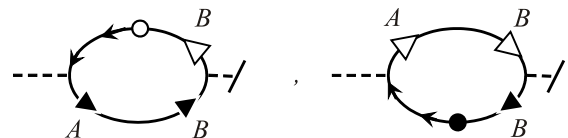


Рис. 3. Однопетлевые диаграммы для  $AB$ -компоненты силового оператора поперечной спиновой функции Грина.

ствующих направлений спина электрона, где узел  $m$  принадлежит подрешетке  $A$ . Общее число диаграмм для массового и силового операторов в однопетлевом приближении при учете двухподрешеточной структуры равно 64.

Сопоставляя графикам аналитические выражения, получаем явный вид для компонент массового и силового операторов:

$$\Sigma^{AB}(q) = -\frac{T}{2N} \sum_p \left[ G_{0\downarrow,0\downarrow}^{AB}(q+p) L_{\uparrow}^{BA}(p) + G_{\uparrow,0\uparrow}^{AB}(q-p) L_{\downarrow}^{AB}(p) \right], \quad (10)$$

$$\delta P^{AB}(q) = -\frac{T}{2N} \sum_p \left[ G_{0\downarrow,0\downarrow}^{AB}(q+p) G_{0\uparrow}^{(0)B}(p) F_{B\uparrow} L_{\uparrow}^{BA}(p) - G_{\uparrow,0\uparrow}^{AB}(q+p) G_{\downarrow 0}^{(0)B}(p) F_{B\downarrow} L_{\downarrow}^{AB}(-p) \right], \quad (11)$$

где

$$L_{\sigma}^{FF}(p) = (V_{\mathbf{p}} + W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\alpha}(p) + (V_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\beta}(p) - (V_{\mathbf{p}}^2 - W_{\mathbf{p}}^2) [G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\beta}(p) + G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\alpha}(p)], \quad (12)$$

$$L_{\sigma}^{GG}(p) = (V_{\mathbf{p}} + W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\alpha}(p) + (V_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\beta}(p) + (V_{\mathbf{p}}^2 - W_{\mathbf{p}}^2) [G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\beta}(p) + G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\alpha}(p)], \quad (13)$$

$$L_{\sigma}^{GF}(p) = (V_{\mathbf{p}} + W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\alpha}(p) - (V_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\beta}(p) - (V_{\mathbf{p}}^2 - W_{\mathbf{p}}^2) [G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\beta}(p) - G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\alpha}(p)], \quad (14)$$

$$L_{\sigma}^{FG}(p) = (V_{\mathbf{p}} + W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\alpha}(p) - (V_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}})^2 G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\beta}(p) + (V_{\mathbf{p}}^2 - W_{\mathbf{p}}^2) [G_{0\sigma,0\sigma}^{\alpha\beta}(p) - G_{0\sigma,0\sigma}^{\beta\alpha}(p)]. \quad (15)$$

В данных выражениях суммирование проводится по четырем импульсам  $p = (\mathbf{p}, i\omega_n)$ , где  $i\omega_n$  — нечетные мацубаровские частоты. Функции  $G_{0\sigma,0\sigma}^{AB}(p)$ ,  $G_{0\sigma,0\sigma}^{\nu\mu}(p)$  ( $A, B = F, G$ ;  $\nu, \mu = \alpha, \beta$ ) — пропагаторы для локализованных и коллективизированных электронов соответственно в приближении Хаббард-I,  $G_{0\sigma}^{(0)A}$  — затравочные функции Грина для локализованных электронов из различных подрешеток. Видно, что в выражения для массового и силового операторов также входят пропагаторы  $G_{\sigma 0, \sigma 0}^{AB}$  и затравочные функции  $G_{\sigma 0}^{(0)A}$ , при определении которых в качестве производящего оператора выбирается оператор рождения локализованного фермиона Хаббарда со спином  $\sigma$ . Для вычисления данного набора пропагаторов удобно воспользоваться соотношением для функций Грина

$$D_{\sigma 0, \sigma 0}^{AB}(p) = -D_{0\sigma, 0\sigma}^{BA}(-p). \quad (16)$$

Введем обозначения:

$$d_{AB}(q) = \Sigma^{AB}(q) + J_{\mathbf{q}} \delta P^{A\bar{B}}(q) / 2, \quad (17)$$

$$K_{AB}(q) = \delta P^{AB}(q) K_{\mathbf{q}} / 2, \quad (18)$$

где  $\bar{F} \equiv G$ ,  $\bar{G} \equiv F$ . В компонентах  $FF$  и  $GG$  силового оператора учитываются затравочные концевые множители и поправки, обусловленные гибридизационным взаимодействием:  $P^{FF} = 2R + \delta P^{FF}$ ,  $P^{GG} = -2R + \delta P^{GG}$ . Учет массового и силового операторов приводит к следующему выражению для искомой обратной матрицы  $\hat{G}_{\perp}^{-1}$ :

$$\hat{G}_{\perp}^{-1} = \begin{bmatrix} i\omega_l - 2\tilde{h} - d_{FF} & -K_{FG} & -J_{\mathbf{q}}R - d_{FG} & -K_{\mathbf{q}}R - K_{FF} \\ -K_{FG} & i\omega_l - 2\tilde{h} - d_{FF} & -K_{\mathbf{q}}R - K_{FF} & -J_{\mathbf{q}}R - d_{FG} \\ J_{\mathbf{q}}R - d_{GF} & K_{\mathbf{q}}R - K_{GG} & i\omega_l + 2\tilde{h} - d_{GG} & -K_{GF} \\ K_{\mathbf{q}}R - K_{GG} & J_{\mathbf{q}}R - d_{GF} & -K_{GF} & i\omega_l + 2\tilde{h} - d_{GG} \end{bmatrix}.$$

Тогда знаменатель функций Грина можно представить в виде

$$\Delta(q) = \left[ (i\omega_l - 2\tilde{h} - d_{FF} - K_{FG})(i\omega_l + 2\tilde{h} - d_{GG} - K_{GF}) + (J_{\mathbf{q}}R + K_{\mathbf{q}}R + K_{FF} + d_{FG})(J_{\mathbf{q}}R + K_{\mathbf{q}}R - K_{GG} - d_{GF}) \right] \times \left[ (i\omega_l - 2\tilde{h} - d_{FF} + K_{FG})(i\omega_l + 2\tilde{h} - d_{GG} + K_{GF}) + (K_{\mathbf{q}}R - J_{\mathbf{q}}R + K_{FF} - d_{FG})(K_{\mathbf{q}}R - J_{\mathbf{q}}R - K_{GG} + d_{GF}) \right]. \quad (19)$$

#### 4. Спин-зарядовые ренормировки спектра магнитных возмущений

Спин-волновой спектр определяется полюсами мацубаровской функции Грина (5) после аналитического продолжения. Поэтому уравнение, определяющее спектр спин-волновых возмущений в AFM фазе, задается выражением  $\Delta(\mathbf{q}, \omega) = 0$ . Его важное свойство связано с выполнимостью теоремы Голдстоуна:  $\Delta(\mathbf{q} = 0, \omega = 0) = 0$ .

Продемонстрируем существование голдстоуновского бозона в режиме смешанной валентности при развитых спиновых и зарядовых флуктуациях. Нетрудно

убедиться в справедливости следующих соотношений между компонентами массового и силового операторов:  $\Sigma^{AB}(0) = -\Sigma^{AB}(0)$ ,  $\delta P^{AB}(0) = -\delta P^{AB}(0)$ . С учетом этого получаем

$$\Delta(\mathbf{q} = 0, \omega = 0) = \Sigma^{FF}(0) - \Sigma^{FG}(0) - \left(\frac{J_0 + K_0}{2}\right) [\delta P^{FF}(0) - \delta P^{FG}(0)] = 0. \quad (20)$$

Существенно, что приведенное равенство получено без использования каких-либо приближений. В отсутствие обменного взаимодействия ( $J = 0$ ,  $K = 0$ ) выполнение теоремы Голдстоуна следует из того, что, как показывают численные расчеты, для компонент массового оператора имеет место равенство  $\Sigma^{FF}(0) = \Sigma^{FG}(0)$ , выполняемое для любых параметров. Это соответствует случаю, когда механизм AFM упорядочения связан только с низкоэнергетическими гибридизационными процессами (диаграммы на рис. 2).

Если обменное взаимодействие отлично от нуля, то оно ренормирует затравочные энергии локализованных электронов из разных подрешеток  $\xi_\sigma^F$ ,  $\xi_\sigma^G$  и  $\Sigma^{FF}(0) \neq \Sigma^{FG}(0)$ . Тем не менее равенство (20) выполняется для любых параметров, поскольку в этом случае обращение правой части уравнения в нуль достигается за счет конечности вкладов компонент силового оператора. Отсюда следует вывод о важности учета силового оператора, происхождение которого связано с кинематическим взаимодействием фермионов Хаббарда. При этом необходимо учитывать диаграммы одного порядка (например, только однопетлевые) как для массового, так и для силового операторов в ансамбле хаббардовских фермионов, так как невыполнение этого требования приводило бы к нарушению теоремы Голдстоуна.

В дальнейшем при вычислении спектра спин-волновых возбуждений достаточно ограничиться учетом гибридизационных процессов между локализованными и коллективизированными электронами в однопетлевом приближении. При этом, чтобы не превысить точность вычислений, в выражениях для компонент массового и силового операторов в качестве энергии магнонов необходимо использовать энергию, определяемую без учета гибридизационных эффектов:

$$\Sigma^{AB}(q) \rightarrow \Sigma^{AB}(\mathbf{q}, \omega_{0i}(\mathbf{q})), \quad \delta P^{AB}(q) \rightarrow \delta P^{AB}(\mathbf{q}, \omega_{0i}(\mathbf{q})),$$

где

$$\omega_{0,2}(\mathbf{q}) = R\gamma_{0,2}(\mathbf{q}), \quad \gamma_{0,2}(\mathbf{q}) = \sqrt{(J_0 + K_0)^2 - (J_{\mathbf{q}} \pm K_{\mathbf{q}})^2}. \quad (21)$$

Слагаемые дисперсионного уравнения, содержащие произведение компонент массового и силового операторов, не учитываются. В результате спектр спин-вол-

новых возбуждений при учете спин-зарядовых флуктуаций определяется аналитическим выражением

$$\omega_{1,2\mathbf{q}} = \omega_{0,2}(\mathbf{q}) + \delta\omega_{1,2\mathbf{q}}, \quad (22)$$

в котором поправки к затравочному спектру задаются в виде

$$\delta\omega_{1,2\mathbf{q}} = \frac{1}{2} [d_{1,2FF} + d_{1,2GG} \pm (K_{1,2FG} + K_{1,2GF})] - \frac{1}{2\omega_{0,2}(\mathbf{q})} \times \{ (J_0 + K_0)R[d_{1,2GG} - d_{1,2FF} \pm (K_{1,2GF} - K_{1,2FG})] + (J_{\mathbf{q}} \pm K_{\mathbf{q}})R[d_{1,2FG} - d_{1,2GF} \pm (K_{1,2FF} - K_{1,2GG})] \}. \quad (23)$$

Здесь были введены следующие обозначения:

$$d_{iAB} = \Sigma^{AB}(\mathbf{q}, \omega_{0i}(\mathbf{q})) + J_{\mathbf{q}} \delta P^{AB}(\mathbf{q}, \omega_{0i}(\mathbf{q})) / 2, \quad (24)$$

$$K_{iAB} = K_{\mathbf{q}} \delta P^{AB}(\mathbf{q}, \omega_{0i}(\mathbf{q})) / 2. \quad (25)$$

Оказалось, что в случае, когда локализованная подсистема электронов близка к полному заполнению ( $n_L \approx 1$ ), спектр спин-волновых возбуждений практически не зависит от интенсивности гибридизации и определяется исходными выражениями для гейзенберговского антиферромагнетика (21).

Иная ситуация имеет место для AFM фазы, если уровень Ферми лежит в непосредственной близости от локализованного уровня  $E_0$  и может происходить формирование тяжелых фермионов в магнитоупорядоченной фазе. Отмеченное состояние реализуется в CeRhIn<sub>5</sub> вблизи атмосферного давления. Спин-волновой спектр для главного направления AFM зоны Бриллюэна и концентрации  $n_L \approx 0,7$  приведен на рис. 4. Введены обозначения:  $q_\alpha$  — компонента волнового вектора,

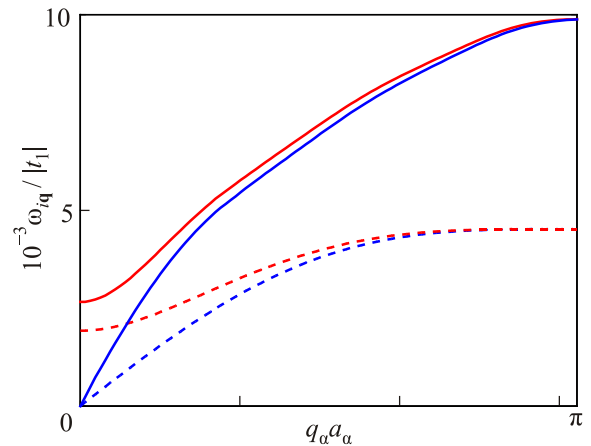


Рис. 4. Спин-волновой спектр для квазидвумерной структуры при учете гибридизации локализованных электронов с коллективизированными (сплошные линии) и затравочный спектр для локализованных электронов (штриховые линии) вдоль направления (111) антиферромагнитной зоны Бриллюэна. Концентрация квазилокализованных электронов  $n_L \approx 0,7$ .

$\alpha = x, y, z$ ;  $a_\alpha$  — соответствующий параметр элементарной ячейки. Штриховые линии определяют энергии магнов  $\omega_{0i}(\mathbf{q})$  для квази-2D структуры без учета гибридизационных процессов между  $f$ - и  $p$ -электронами. Сплошные линии — ветви  $\omega_{i\mathbf{q}}$  спин-волнового спектра при учете гибридизационного взаимодействия с  $p$ -электронами. Параметры взаимодействий выбраны в виде  $V = 0,3|t_1|$  (эффективный одноузельный параметр гибридизации),  $J = 0,004|t_1|$ ,  $K = J/10$ , где  $t_1$  — параметр перескока коллективизированных электронов между ближайшими узлами ( $t_1 < 0$ ). Энергия  $f$ -уровня  $E_0 = 1,5t_1$ , полная концентрация электронов  $n_e = 1,2$ . Из сравнения модельного закона дисперсии коллективизированных электронов  $\xi_k$  и дисперсионных зависимостей для  $p$ -электронов In в CeRhIn<sub>5</sub>, полученных в рамках первопринципных расчетов [34], следует, что  $|t_1| \sim 0,1-0,3$  эВ. Выбранным параметрам соответствует спектр фермиевских возбуждений, представленный на рис. 5. Видно, что химпотенциал  $\mu$  (штриховая линия) пересекает слабодисперсную зону тяжелых фермионов.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что в рассмотренном режиме низкоэнергетические гибридизационные процессы приводят к значительному росту скорости спиновых волн  $k$  для голдстоуновской моды  $\omega_{1q} = kq$  (при малых  $q$ ) и энергии магнов. В свою очередь это приводит к увеличению величины AFM параметра порядка и температуры Нееля по сравнению со случаем полностью локализованных  $f$ -электронов.

Модификацию спин-волнового спектра можно объяснить появлением дополнительного эффективного обменного взаимодействия за счет низкоэнергетических гибридизационных процессов. Действительно, сравнение уравнения (8), содержащего массовый оператор, и уравнения (9), в котором учитывается обменное взаимодействие между  $4f$ -электронами, показывает, что компоненты массового оператора можно рассматривать как эффективное обменное взаимодействие. При

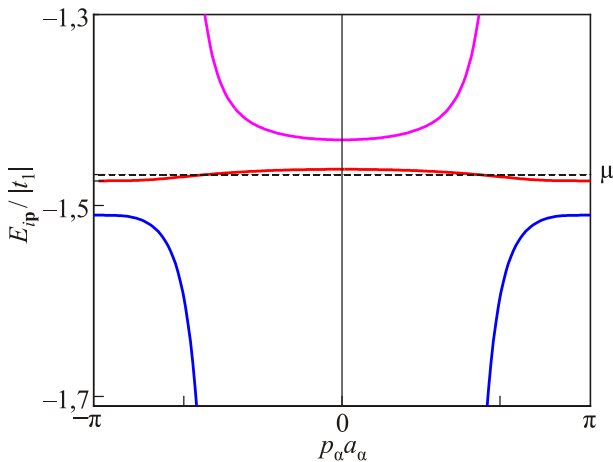


Рис. 5. Спектр фермиевских возбуждений для  $n_L \approx 0,7$ . Уровень Ферми показан штриховой линией.

этом компоненты силового оператора, обусловленные учетом гибридизации, перенормируют исходное значение AFM параметра порядка и также влияют на энергетический спектр магнов.

Параметры эффективного обменного взаимодействия между различными узлами решетки можно оценить по формулам

$$A_{f,g} = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g)} \Sigma^{FG}(\mathbf{q}, \omega_{01}(\mathbf{q})), \quad (26)$$

$$A_{f,f'} = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_{f'})} \Sigma^{FF}(\mathbf{q}, \omega_{01}(\mathbf{q})), \quad (27)$$

где узлы, обозначаемые индексами  $f, f'$ , принадлежат  $F$ -подрешетке, а узлы с индексами  $g$  —  $G$ -подрешетке. Следует отметить, что эффективное взаимодействие возникает только между ионами, расположенными в плоскости  $xu$ , так как низкоэнергетические гибридизационные процессы ограничиваются этой плоскостью. Таким образом, обменное взаимодействие вдоль оси  $z$  с параметром  $K$  определяет квазидвумерный характер исследуемых систем, а обменный параметр  $J$  в плоскости  $xu$  ренормируется за счет гибридизационного взаимодействия. При этом за счет эффективного взаимодействия в плоскости  $xu$  формируется обмен также между следующими за ближайшими соседями.

Качественно характер влияния гибридизации между  $p$ - и  $f$ -электронами на характеристики AFM фазы (такие как скорость спиновых волн, AFM параметр порядка, температура Нееля) определяется знаками параметров  $A_{f,g}$ ,  $A_{f,f'}$ . Если  $A_{f,g} > 0$ ,  $A_{f,f'} < 0$ , то гибридизационные процессы способствуют AFM упорядочению и спин-волновой спектр принимает вид, представленный на рис. 5. Если энергия магнов уменьшается при учете гибридизации, то суммарная величина AFM обмена уменьшается за счет фрустраций, когда  $A_{f,g} < 0$  и  $A_{f,f'} > 0$ . Таким образом, существенно, что параметры эффективного взаимодействия зависят от положения локализованного уровня, концентрации и температуры.

### 5. Зависимость температуры Нееля от давления в слоистых редкоземельных интерметаллидах

Среднее значение  $z$ -проекции спина в подрешетке можно вычислить, воспользовавшись соотношениями

$$R = n_L / 2 - \langle X_{f_1}^{\downarrow\downarrow} \rangle, \quad \langle X_{f_1}^{\downarrow\downarrow} \rangle = -\frac{T}{N/2} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\omega_n \delta} D_{\perp}^{F_1 F_1}(\mathbf{q}), \quad \delta \rightarrow +0. \quad (28)$$

Подставляя найденное выше выражение для поперечной спиновой функции Грина и проводя суммирование



вание по мацубаровским частотам, находим уравнение самосогласования для параметра порядка:

$$R = \frac{n_L}{2} \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{2\tilde{h}}{\omega_{1\mathbf{q}}} \frac{2J_{\mathbf{q}}K_{\mathbf{q}}R^2 - A_{1\mathbf{q}}}{\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} \operatorname{cth} \left( \frac{\omega_{1\mathbf{q}}}{2T} \right) + \frac{2\tilde{h}}{\omega_{2\mathbf{q}}} \frac{2J_{\mathbf{q}}K_{\mathbf{q}}R^2 - A_{2\mathbf{q}}}{\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} \operatorname{cth} \left( \frac{\omega_{2\mathbf{q}}}{2T} \right) \right] + C_1 + C_2 + \Lambda + \sum_{\mathbf{q}} \frac{2J_{\mathbf{q}}K_{\mathbf{q}}R^2}{(\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2)} \times \left[ \frac{1}{\omega_{1\mathbf{q}}} \frac{\Theta_1(\mathbf{q})}{\exp(\beta\omega_{1\mathbf{q}}) - 1} + \frac{1}{\omega_{2\mathbf{q}}} \frac{\Theta_2(\mathbf{q})}{\exp(\beta\omega_{2\mathbf{q}}) - 1} \right] \right\}^{-1}. \quad (29)$$

При записи этого уравнения использовались соотношения  $\Sigma^{AB}(\mathbf{q}, -\omega) = -\Sigma^{AB}(\mathbf{q}, \omega)$ ,  $\delta P^{AB}(\mathbf{q}, -\omega) = -\delta P^{AB}(\mathbf{q}, \omega)$ . Для слагаемых, определяющих гибридизационные поправки, введены обозначения:

$$A_{i\mathbf{q}} = \omega_{0i}(\mathbf{q})(K_{iFG} + K_{iGF}) + 2\tilde{h}(K_{iFG} - K_{iGF}) - J_{\mathbf{q}}R(K_{iFF} - K_{iGG}) - K_{\mathbf{q}}R(d_{iFG} - d_{iGF}), \quad i = 1, 2, \quad (30)$$

$$C_{1,2} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{2J_{\mathbf{q}}K_{\mathbf{q}}R^2}{\omega_{1,2\mathbf{q}}(\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2)} \times \left[ d_{1,2FF} + \frac{1}{2}(\gamma_{01,2}(\mathbf{q}) - J_0 - K_0)\delta P_{1,2}^{GG} \pm \pm K_{1,2FG} - \frac{1}{2}(J_{\mathbf{q}} \pm K_{\mathbf{q}})\delta P_{1,2}^{FG} \right] \quad (31)$$

(здесь знак «+» соответствует функции  $C_1$ , знак «-» — функции  $C_2$ ),

$$\Lambda = -\sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} \left[ \omega_{01}(\mathbf{q})(d_{1FF} + d_{1GG}) - \omega_{02}(\mathbf{q})(d_{2FF} + d_{2GG}) + 2\tilde{h}(d_{1FF} - d_{1GG}) - 2\tilde{h}(d_{2FF} - d_{2GG}) - J_{\mathbf{q}}R(d_{1FG} - d_{1GF}) + J_{\mathbf{q}}R(d_{2FG} - d_{2GF}) - K_{\mathbf{q}}R(K_{1FF} - K_{1GG}) + K_{\mathbf{q}}R(K_{2FF} - K_{2GG}) \right], \quad (32)$$

$$\Theta_{1,2}(\mathbf{q}) = d_{1,2FF} - d_{1,2GG} \pm (K_{1,2FG} - K_{1,2GF}) - \frac{1}{2}(J_{\mathbf{q}} \pm K_{\mathbf{q}})(\delta P_{1,2}^{FG} - \delta P_{1,2}^{GF}) + \frac{1}{2} \left\{ [\gamma_{01,2}(\mathbf{q}) + J_0 + K_0]\delta P_{1,2}^{FF} + [\gamma_{01,2}(\mathbf{q}) - J_0 - K_0]\delta P_{1,2}^{GG} \right\}. \quad (33)$$

Рассматривая уравнение (29) в пределе  $R \rightarrow 0$ , получаем выражение для температуры Нееля:

$$T_N = \frac{(J_0 + K_0)n_L}{4} \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{4\tilde{h}^2}{\omega_{1\mathbf{q}}^2} \frac{2J_{\mathbf{q}}K_{\mathbf{q}}R^2 - A_{1\mathbf{q}}}{\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} + \frac{4\tilde{h}^2}{\omega_{2\mathbf{q}}^2} \frac{2J_{\mathbf{q}}K_{\mathbf{q}}R^2 - A_{2\mathbf{q}}}{\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} \right] + \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\tilde{h}J_{\mathbf{q}}K_{\mathbf{q}}R^2}{(\omega_{2\mathbf{q}}^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2)} \left[ \frac{\Theta_1(\mathbf{q})}{\omega_{1\mathbf{q}}^2} + \frac{\Theta_2(\mathbf{q})}{\omega_{2\mathbf{q}}^2} \right] \right\}_{T \rightarrow T_N, R \rightarrow 0}^{-1}. \quad (34)$$

При исследовании зависимости температуры Нееля  $T_N$  от давления  $P$  будем считать, что рост давления приводит к увеличению энергии  $E_0$   $4f$ -электрона положительного иона Се за счет увеличения кулоновского взаимодействия с отрицательно заряженным окружением. Так как кулоновское взаимодействие (в том числе и межузельное) является наибольшим в данных системах, эффект увеличения  $E_0$  доминирует над увеличением интенсивности гибридизации и перескоков с ростом давления.

Экспериментальные данные для цериевых квази-2D тяжелофермионных антиферромагнетиков, таких как  $\text{CeRhIn}_5$ , указывают на то, что в достаточно широкой области давлений температура Нееля линейно уменьшается с ростом давления [3]. При критическом давлении температура Нееля обращается в нуль и происходит разрушение дальнего AFM порядка. Отметим, что температура Нееля в данных материалах не превышает нескольких кельвин.

На рис. 6 представлена зависимость температуры Нееля от затравочной энергии  $4f$ -электрона (давления) для  $V = 0,3|t_1|$ ,  $J = 0,004|t_1|$ ,  $K = J/10$ . Точками по-

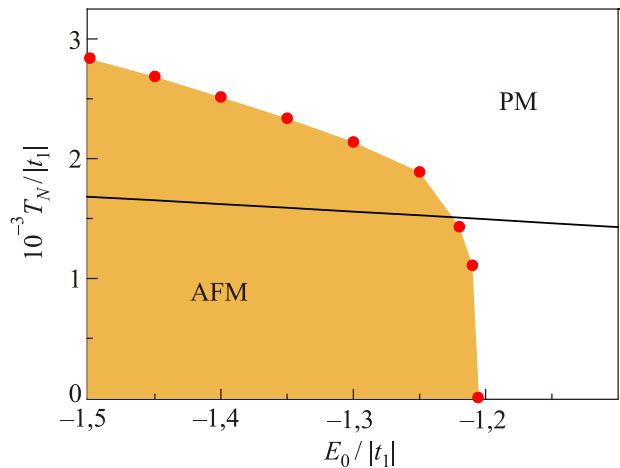


Рис. 6. Зависимость температуры Нееля от затравочной энергии локализованных состояний (давления) при учете (точки) и без учета (сплошная линия) гибридизации. Цветом выделена область реализации антиферромагнитной (AFM) фазы, остальная область на рисунке соответствует парамагнитной (PM) фазе.

казана зависимость, полученная при численном решении уравнения (29), с учетом низкоэнергетических гибридных процессов между  $f$ - и  $p$ -электронами. Данная кривая отделяет области реализации AFM фазы и РМ фазы. Сплошной линией приведена зависимость  $T_N(P)$ , полученная в предположении, что гибридное взаимодействие в системе отсутствует. Видно, что в этом случае температура Нееля линейно уменьшается с ростом давления. Такое поведение связано с уменьшением концентрации  $4f$ -электронов. Ренормированная кривая также содержит линейный участок в области малых давлений. При этом величина температуры Нееля увеличивается за счет гибридизации.

Существенный результат заключается в том, что учет гибридизационного взаимодействия между локализованными и коллективизированными электронами приводит к более быстрому разрушению AFM упорядочения с ростом давления. На рис. 6 видно, что после участка, на котором происходит незначительное уменьшение температуры Нееля при увеличении давления, реализуется критическая область, в которой дальний AFM порядок быстро разрушается. Подчеркнем, что без учета спин-зарядовых флуктуаций зависимость  $T_N(P)$  по-прежнему имела бы линейный характер. Таким образом, в развитой теории, учитывающей спин-зарядовые флуктуации, зависимость критической температуры AFM фазы от давления становится такой, какая наблюдается экспериментально. Количественное согласие результатов с данными для  $\text{CeRhIn}_5$  достигается, если положить  $|t_1| \approx 0,14$  эВ. Эта оценка является адекватной для тяжелофермионных систем.

### 6. Эффективное обменное взаимодействие при учете спин-зарядовых флуктуаций

На рис. 7 приведена зависимость эффективного обменного интеграла от номера координационной сферы  $N_{cs}$ , рассчитанная по формулам (26) и (27), при близкой к нулю температуре для двух случаев:  $E_0 = 1,5t_1$  (точки) и  $E_0 = 1,21t_1$  (квадраты). При этом исключен коэффициент, связанный с учетом конечного множителя. Отметим, что при реализации дальнего AFM упорядочения обменное взаимодействие в 1, 4 и 6 координационных сферах квадратной решетки соответствует обмену между AFM подрешетками. Соответственно взаимодействие во 2, 3 и 5 сферах характеризует обмен внутри подрешетки. На рис. 7 видно, что для значения  $E_0 = 1,5t_1$  обменный параметр  $\tilde{A}_1$  для первой координационной сферы в несколько раз превышает обменные параметры для других соседей. Суммарная величина обменного взаимодействия между ближайшими ионами в плоскости  $xy$  будет определяться в виде  $J_{\text{eff}} = J + \tilde{A}_1$ . Учет обмена только между ближайшими соседями (с параметрами  $J_{\text{eff}}$  в плоскости  $xy$  и  $K$  вдоль оси  $z$ ) в аналитической формуле для температуры Не-

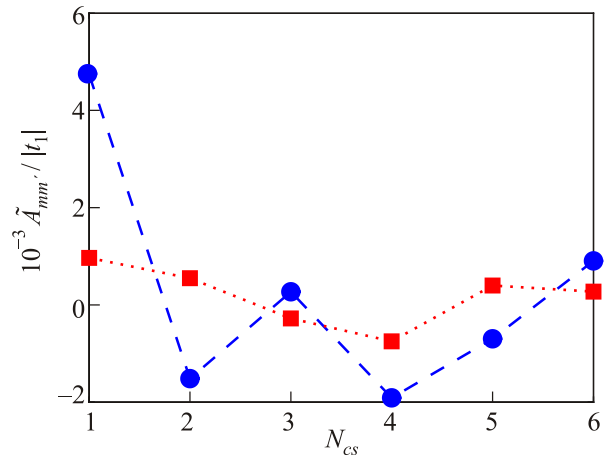


Рис. 7. Зависимость интеграла эффективного обменного взаимодействия от номера координационной сферы  $N_{cs}$  для двух положений локализованного уровня:  $E_0 = 1,5t_1$  (точки) и  $E_0 = 1,21t_1$  (квадраты).

еля квази-2D гейзенберговского антиферромагнетика с частичным заполнением  $f$ -уровня приводит к оценке  $T_N \approx 0,003 |t_1|$ , что хорошо согласуется с полученным численно значением при решении уравнения самосогласования. Таким образом, возникновение эффективного обменного взаимодействия качественно объясняет модификацию спин-волнового спектра, продемонстрированную на рис. 4, и увеличение температуры Нееля. Следует, однако, подчеркнуть, что спин-зарядовые флуктуации в рассматриваемой системе приводят к фрустрированным обменным взаимодействиям для  $N_{cs} = 3, 4$ .

В критической области при  $E_0 = 1,21t_1$  значения  $A_{mm'}$  для ближайших и следующих за ближайшими соседями незначительно отличаются друг от друга и имеют один и тот же знак. Это указывает на усиление фрустраций в системе и подавление AFM упорядочения за счет спин-зарядовых флуктуаций в подсистемах  $4f$ - и  $p$ -электронов. Скорость спиновых волн в критической области уменьшается из-за этих флуктуаций. Спин-волновой спектр для  $E_0 = 1,21t_1$  приобретает вид, характерный для случая, когда энергия спин-волновых возбуждений попадает в область стонеровских возбуждений.

Отметим также, что для обоих рассмотренных случаев возможна ситуация, когда параметр  $A_{mm'}$  увеличивается с ростом расстояния  $|\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'}|$ . В этой связи учет эффективного обменного взаимодействия между дальними соседями может быть существенен.

Следует подчеркнуть, что проведенный анализ влияния спин-зарядовых флуктуаций на эффективные обменные параметры носит качественный характер. Это связано с тем, что, во-первых, компоненты массового оператора зависят от температуры. Данное обстоятельство учитывается при решении уравнений самосогласования, однако выше в рассуждениях использовались значения параметров обмена при  $T = 0$ . Во-вторых, при

расчете интеграла  $A_{mm'}$  явно не учитываются гибридационные поправки в силовом операторе.

Описанные в работе эффекты спин-зарядовых флуктуаций в слоистых тяжелофермионных антиферромагнетиках будут иметь место и в соединениях, обладающих трехмерным характером эффективных взаимодействий, таких как  $\text{CeIn}_3$ . Однако при описании этих соединений нельзя ограничиваться учетом гибридизации и перескоков только в плоскости  $xy$ . Кроме того, в цериевых интерметаллидах большой интерес вызывает формирование фазы сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма вблизи квантовой критической точки. В предложенной модели обменное взаимодействие между  $4f$ -электронами способно индуцировать куперовскую неустойчивость [35]. Тогда формирование сверхпроводимости вблизи квантовой критической точки может быть не связано с квантовыми флуктуациями, а объясняться тем, что антиферромагнетизм приводит к подавлению куперовских спариваний. Однако отмеченные вопросы выходят за рамки данной статьи.

### Заключение

В рамках периодической модели Андерсона методом диаграммной техники для операторов Хаббарда развита теория, позволившая учесть спин-зарядовые флуктуации и исследовать взаимное влияние двух микроскопических механизмов формирования обменного взаимодействия между  $f$ -электронами в квазидвумерных цериевых тяжелофермионных интерметаллидах.

Первый механизм, реализующийся при большой величине внутриатомного кулоновского отталкивания, обусловлен высокоэнергетическими процессами гибридизации между коллективизированными  $p$ -электронами и  $f$ -электронами редкоземельных ионов. Интенсивность обменной связи, определяемой этим механизмом, не зависит от температуры, концентрации коллективизированных носителей и положения химпотенциала.

Для второго механизма, инициируемого низкоэнергетическими гибридационными процессами между отмеченными группами электронов, ситуация качественно иная. Вклад этих процессов в величину результирующей обменной связи между ионами  $\text{Ce}$  существенно зависит от положения уровня Ферми, энергии  $f$ -уровня и плотности электронных состояний. Этот вывод следует из анализа поведения намагниченности антиферромагнитной подрешетки и температуры Нееля, полученного при учете вкладов спин-зарядовых флуктуаций. Продemonстрировано, что учет второго механизма имеет решающее значение для количественного описания экспериментальных данных, таких как зависимость температуры Нееля от давления, полученных для квазидвумерных цериевых систем (типа  $\text{CeRhIn}_5$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты #16-02-00073-а, #15-42-04372-р-сибирь-а), Правительства Красноярского края и Краевого фонда науки (доп. соглашение №07/16), а также Комплексной программы СО РАН П.2П (проект 0358-2015-0002). Один из авторов (А.О.З.) благодарит за поддержку в рамках стипендии Президента РФ для молодых кандидатов наук (СП-1370.2015.5).

1. Ph. Gegenwart, Q. Si, and F. Steglich, *Nat. Phys.* **4**, 186 (2008).
2. N.D. Mathur, F.M. Grosche, S.R. Julian, I.R. Walker, D.M. Freye, R.K.W. Haselwimmer, and G.G. Lonzarich, *Nature* **394**, 39 (1998).
3. T. Park and J.D. Thompson, *New J. Phys.* **11**, 055062 (2009).
4. E.D. Bauer, H.O. Lee, V.A. Sidorov, N. Kurita, K. Gofryk, J.-X. Zhu, F. Ronning, R. Movshovich, J.D. Thompson, and T. Park, *Phys. Rev. B* **81**, 180507 (2010).
5. S. Doniach, *Physica B+C* **91**, 231 (1977).
6. P. Coleman, C. Pepin, Q. Si, and R. Ramazashvili, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, R723 (2001).
7. Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent, and J. L. Smith, *Nature* **413**, 804 (2001).
8. H. Shishido, R. Settai, H. Harima, and Y. Ōnuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 1103 (2005).
9. G. Knebel, D. Aoki, J.-P. Brison, and J. Flouquet, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 114704 (2008).
10. K. Miyake and S. Watanabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 061006 (2014).
11. H. Watanabe and M. Ogata, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 136401 (2007).
12. S. Watanabe and K. Miyake, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 033707 (2010).
13. В.В. Вальков, А.О. Злотников, *ЖЭТФ* **143**, 941 (2013) [*JETP* **116**, 817 (2013)].
14. В.В. Тугушев, Е.А. Жуковский, *ЖЭТФ* **111**, 600 (1997) [*JETP* **84**, 330 (1997)].
15. H. Leder and B. Mühlischlegel, *Z. Physik B* **29**, 341 (1978).
16. B. Möller and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **48**, 10320 (1993).
17. R. Doradziński and J. Spalek, *Phys. Rev. B* **58**, 3293 (1998).
18. M.E. Foglio, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, 4171 (1978).
19. P.S. Riseborough and D.L. Mills, *Phys. Rev. B* **21**, 5338 (1980).
20. Y. Kuramoto, *Z. Physik B* **40**, 293 (1981).
21. Y.A. Izyumov and B.M. Letfulov, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 8905 (1990).
22. В.В. Вальков, Д.М. Дзедзашвили, *ТМФ* **164**, 309 (2010) [*Theoretical and Mathematical Physics* **164**, 1089 (2010)].
23. J.D. Thompson and Z. Fisk, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 011002 (2012).
24. В.В. Вальков and А.Д. Федосеев, *ТМФ* **168**, 417 (2011) [*Theoretical and Mathematical Physics* **168**, 1216 (2011)].

25. P. Das, S.-Z. Lin, N.J. Ghimire, K. Huang, F. Ronning, E.D. Bauer, J.D. Thompson, C.D. Batista, G. Ehlers, and M. Janoschek, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 246403 (2014).
26. M. Yashima, H. Mukuda, Y. Kitaoka, H. Shishido, R. Settai, and Y. Ōnuki, *Phys. Rev. B* **79**, 214528 (2009).
27. В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили, *ТМФ* **157**, 235 (2008) [*Theoretical and Mathematical Physics* **157**, 1565 (2008)].
28. Р.О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975) [*Sov. Phys. JETP* **41**, 100 (1975)].
29. Р.О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, Едиториал УРСС, Москва (2004).
30. В.Г. Барьяхтар, В.Н. Криворучко, Д.А. Яблонский, *ЖЭТФ* **85**, 601 (1983) [*Sov. Phys. JETP* **58**, 351 (1983)].
31. В.Г. Барьяхтар, В.Н. Криворучко, Д.А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наукова думка, Киев (1984).
32. Р.О. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976) [*Sov. Phys. JETP* **43**, 574 (1976)].
33. S.G. Ovchinnikov and V.V. Val'kov, *Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons*, Imperial College Press, London (2004).
34. S. Elgazzar, I. Opahle, R. Hayn, and P.M. Oppeneer, *Phys. Rev. B* **69**, 214510 (2004).
35. В.В. Вальков, А.О. Злотников, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 390 (2012) [*JETP Lett.* **95**, 350 (2012)].

## Manifestation of spin and charge fluctuations in spectral and thermodynamic properties of quasi-two-dimensional rare-earth intermetallics

V.V. Val'kov and A.O. Zlotnikov

In the framework of the modified periodic Anderson model including the exchange interaction in the subsystem of localized states, it is shown that the spin and charge fluctuations in the quasi-two-dimensional intermetallic compounds with rare-earth ions in the mixed valence state significantly affect both the spectrum of magnetic excitations and the conditions of implementation of the antiferromagnetic phase. The spectral characteristics of the phase have been obtained by the method of the diagram technique for Hubbard operators using the one-loop approximation, allowing to take into account the spin-charge fluctuation contributions to the components of the mass and the strength operators. The developed theory allowed to quantitatively describe the Néel temperature dependence on pressure observed in the quasi-two-dimensional antiferromagnetic intermetallic compound with heavy fermions CeRhIn<sub>5</sub>.

PACS: **71.27.+a** Strongly correlated electron systems; heavy fermions;  
**75.50.Ee** Antiferromagnetics;  
**75.30.Et** Exchange and superexchange interactions;  
**75.40.Gb** Dynamic properties (dynamic susceptibility, spin waves, spin diffusion, dynamic scaling, etc.).

Keywords: heavy fermions, antiferromagnetism, spin-charge fluctuations, CeRhIn<sub>5</sub>, periodic Anderson model.