

# СПИН-ФЛУКТУАЦИОННАЯ РЕНОРМИРОВКА КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ $s$ -ФАЗЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

*В. В. Вальков\*, Д. М. Дзедзисаивили*

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия*

*Сибирский федеральный университет  
660041, Красноярск, Россия*

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

Поступила в редакцию 23 мая 2008 г.

В рамках периодической модели Андерсона в пределе сильных электронных корреляций развита теория сверхпроводящего состояния с  $s$ -типом симметрии параметра порядка (переход в такое состояние экспериментально наблюдался в недавно открытом тяжелофермионном скуттерудите  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$ ). Получены точные представления функций Грина сверхпроводящей фазы через нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов. Показано, что при описании сверхпроводящей фазы существенную роль играют аномальные компоненты силового оператора, отражающие спин-флуктуационные процессы в локализованной подсистеме. В однопетлевом приближении эти компоненты вычислены из решения бесконечной системы интегральных уравнений самосогласования для сверхпроводящей фазы. Численные расчеты показали, что включение процессов рассеяния на спиновых флуктуациях приводит к ренормировке критической температуры до экспериментально наблюдаемой.

PACS: 71.27.+a, 74.70.Tx, 75.20.Nr

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Микроскопическая природа сверхпроводящего состояния в соединениях с тяжелыми фермионами (ТФ) во многих отношениях остается загадочной и по сей день, несмотря на почти тридцатилетнюю историю вопроса (первый ТФ-сверхпроводник  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  [1] был открыт в 1979 г.). Необычность явления сверхпроводимости в ТФ-соединениях заключается прежде всего в том, что куперовское спаривание происходит в подсистеме тяжелых квазичастиц [2], которые сформированы в результате сильных корреляционных эффектов с участием магнитных степеней свободы. Близкое расположение на фазовой диаграмме областей реализации сверхпроводящей и антиферромагнитной фаз привело к выдвигению гипотезы о суще-

ственной роли спиновых флуктуаций в механизме куперовской неустойчивости [3, 4]. Эта гипотеза, в частности, хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемым во многих ТФ-сверхпроводниках анизотропным параметром порядка.

К настоящему времени установлено, что во многих «классических» ТФ-сверхпроводниках, например в  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ ,  $\text{UPe}_3$ ,  $\text{UPt}_3$ , реализуется сверхпроводимость с  $d$ -типом симметрии параметра порядка (см., например, работы [5, 6]). Необычные свойства такой сверхпроводящей фазы, независимо от конкретного механизма куперовской неустойчивости, могут быть описаны теоретически, если анизотропия параметра порядка закладывается в теорию как основополагающий факт [7].

С другой стороны, недавние экспериментальные исследования ТФ-скуттерудита  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$  [8], являющегося сверхпроводником при  $T < T_C = 4.1$  К, привели к выводу о предпочтительности  $s$ -типа симмет-

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

рии параметра порядка (аналогичный тип симметрии зафиксирован и в недавно исследованном скуттерудите  $\text{PrRu}_4\text{As}_{12}$  [9]). Такие данные стимулировали развитие работ, в которых  $s$ -тип симметрии сверхпроводящей фазы связывался с электрон-фононным механизмом куперовского спаривания [10]. Вместе с тем, сведения по теплоемкости и магнитной восприимчивости  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$ , определяющие принадлежность этого соединения к классу ТФ, говорят о существенной роли сильных электронных корреляций. Очевидно, что эти корреляции должны проявиться и в механизме формирования сверхпроводящей  $s$ -фазы  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$ . В этой связи актуальным представляется тезис об электронном механизме куперовской неустойчивости, позволяющем описать экспериментально наблюдаемый  $s$ -тип симметрии сверхпроводящего параметра порядка в условиях развитых спин-флуктуационных процессов рассеяния в локализованной подсистеме.

Для теоретического описания редкоземельных интерметаллидов с ТФ чаще всего привлекается периодическая модель Андерсона (periodical Anderson model, PAM). В рамках этой модели методология изучения сверхпроводящей фазы распадается на несколько направлений. К одному из них можно отнести работы, основанные на использовании ферми-жидкостного описания тяжелых квазичастиц и теории Гинзбурга–Ландау. Такой подход был успешно применен, например, для построения фазовой диаграммы  $\text{UPt}_3$  [11]. Другое направление исследований сверхпроводимости в ТФ-системах связано с привлечением теории возмущений по параметру одноузельного кулоновского взаимодействия  $U$  до третьего порядка включительно [12–14]. К сожалению, эта методика имеет очевидную ограниченность, поскольку в рассматриваемых системах величина  $U$  не мала, что и лежит в основе формирования ТФ-состояния. Часть работ по отмеченной тематике выполнена в рамках другого пертурбативного подхода, основанного на так называемом  $1/N$ -разложении. Здесь в качестве малого параметра рассматривается кратность вырождения  $N$  углового момента редкоземельного иона [15]. При изучении свойств основного состояния ТФ-системы, описываемой PAM, полезным оказался подход, использующий пробную волновую функцию Гутцвиллера [16, 17], а в последнее время большую популярность приобрел метод, основанный на теории динамического среднего поля (dynamical mean-field theory, DMFT) [18]. Этот подход имеет строгое обоснование только в пределе бесконечной размерности пространства.

Отметим, наконец, широко использовавшееся до недавнего времени направление исследований ТФ-сверхпроводников, а именно, метод вспомогательных бозонов (slave-boson, SB) [19]. В разных вариациях этот метод применялся, например, в работах [10, 20–22]. Достоинством такого подхода является возможность применения фейнмановской техники при вычислении функций Грина, а его недостатком — необходимость введения констрейна, отсекающего вклады от нефизических состояний. Последнее обстоятельство является источником практических трудностей при развитии теории в рамках SB-подхода. Следует также отметить, что приближение среднего поля, которое, как правило, используется в SB-методе, строго говоря, справедливо лишь при малых концентрациях вспомогательных бозонов,  $n_{SB} \ll 1$ , и поэтому не может считаться корректным в режиме смешанной валентности или при описании ТФ-состояния.

В основе данной работы лежит метод диаграммной техники для операторов Хаббарда [23, 24], который не приводит, например, к проблеме нефизических состояний. При этом сложный характер коммутационных соотношений  $X$ -операторов в физическом отношении проявляется как дополнительное кинематическое взаимодействие [23], лежащее в основе механизма куперовской неустойчивости [25]. Принципиально новым моментом предлагаемой теории является учет аномальных компонент силового оператора. Полученные для него в однопетлевом приближении выражения позволили учесть процессы динамического спин-флуктуационного рассеяния при описании сверхпроводящей фазы.

Дальнейшее изложение статьи построено следующим образом. В разд. 2 приводится гамильтониан PAM в атомном представлении в режиме сильных электронных корреляций. На основе графической формы теории возмущений выводятся точные представления для мацубаровских электронных функций Грина (ФГ) через нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов  $f$ -электронных ФГ. Здесь же проводится сравнение полученных точных представлений с соответствующими представлениями SB-метода. В разд. 3 вычисляются вклады от компонент массового и силового операторов  $f$ -электронных ФГ в однопетлевом приближении. Раздел 4 посвящен выводу в том же приближении выражения для обобщенной динамической восприимчивости. Уравнения для самоогласованного вычисления критической температуры  $T_c$  и параметра порядка обсуждаются в разд. 5. В разд. 6 представлен графический материал, по-

лученный при самосогласованных численных расчетах. В Заключении обсуждаются зависимости критической температуры от концентрации электронов и влияние спин-флуктуационного рассеяния на эту зависимость. Отмечена корреляция результатов численных расчетов с экспериментальными данными по значению критической температуры.

## 2. ГАМИЛЬТониан ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА И ТОЧНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Гамильтониан РАМ в атомном представлении в пределе бесконечного кулоновского отталкивания двух  $f$ -электронов на одном узле может быть представлен в виде

$$H = H_0 + H_{int}, \quad (1)$$

где

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \xi_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{f\sigma} \tilde{E}_\sigma X_f^{\sigma\sigma}, \quad (2)$$

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kf\sigma} \left( V_k e^{-ikf} c_{k\sigma}^\dagger X_f^{0\sigma} + \text{H.c.} \right).$$

Первое слагаемое в  $H_0$  описывает отсчитанную от химического потенциала  $\mu$  энергию коллективизированных электронов  $\xi_{k\sigma} = \varepsilon_k - \sigma h - \mu$  с законом дисперсии  $\varepsilon_k$ , находящихся в магнитном поле  $h$ , измеренном в энергетических единицах,  $\sigma = \pm 1/2$  — значение проекции спинового момента электрона. Оператор  $c_{k\sigma}^\dagger$  ( $c_{k\sigma}$ ) рождает (уничтожает) электрон в состоянии с квазиимпульсом  $k$  и проекцией спинового момента  $\sigma$ . Второе слагаемое в  $H_0$  описывает подсистему локализованных  $f$ -электронов в магнитном поле:  $\tilde{E}_\sigma = E_0 - \sigma h - \mu$ ,  $E_0$  — затравочная энергия локализованного уровня. Гамильтониан взаимодействия  $H_{int}$  описывает гибридизацию коллективизированных и локализованных состояний с интенсивностью, характеризуемой матричным элементом  $V_k$ . Операторы Хаббарда определяются на базе одноионных орбиталей:  $X^{mn} = |m\rangle\langle n|$ . При  $U = \infty$  этот базис содержит два одноэлектронных состояния,  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$ , и одно вакуумное состояние  $|0\rangle$ .

При описании сверхпроводящей фазы будем использовать два набора мацубаровских ФГ. Как обычно, введем нормальные

$$G_{k\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \tilde{c}_{k\sigma}(\tau) \tilde{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau') \rangle, \quad (3)$$

$$\bar{G}_{-k\bar{\sigma}}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \tilde{c}_{-k\bar{\sigma}}^\dagger(\tau) \tilde{c}_{-k\bar{\sigma}}(\tau') \rangle$$

и аномальные

$$F_{k\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \tilde{c}_{k\sigma}(\tau) \tilde{c}_{-k\bar{\sigma}}(\tau') \rangle, \quad (4)$$

$$\bar{F}_{k\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau \tilde{c}_{-k\bar{\sigma}}^\dagger(\tau) \tilde{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$$

ФГ, построенные с помощью фермиевских операторов вторичного квантования для коллективизированной подсистемы. Угловые скобки обозначают термодинамическое усреднение с гамильтонианом (1). Все операторы взяты в представлении Гейзенберга, а  $T_\tau$  — оператор упорядочения по мацубаровскому времени  $\tau$ .

Поскольку структура гамильтониана (1) кроме операторов вторичного квантования включает и  $X$ -операторы, необходимо использовать также и набор ФГ для локализованных электронов, определенных с помощью операторов Хаббарда:

$$D_{\alpha\beta}(f\tau; g\tau') = -\langle T_\tau \tilde{X}_f^\alpha(\tau) \tilde{X}_g^{-\beta}(\tau') \rangle, \quad (5)$$

$$\alpha, \beta = \{(0, \sigma), (\bar{\sigma}, 0)\}.$$

Для нахождения функций (3)–(5) воспользуемся графической формой теории возмущений, сочетающей как обычную фейнмановскую технику [26], так и диаграммную технику для операторов Хаббарда [23, 24]. Последняя имеет особенности, обусловленные усложненным характером перестановочных соотношений  $X$ -операторов (результат перестановки двух операторов не сводится к числовой функции). Это приводит к появлению особого класса диаграмм — концевых диаграмм [23]. Их полная совокупность формирует новый структурный элемент — силовой оператор, или, по терминологии используемой в работе [24], — концевой множитель.

Диаграммные представления показывают, что между введенными ФГ в импульсном представлении реализуется следующая связь:

$$\hat{G}_{k\sigma}(i\omega_n) = \hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) + \hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) \hat{V}_k \hat{D}_\sigma(k, i\omega_n) \hat{V}_k^\dagger \hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n). \quad (6)$$

Здесь для краткости использована матричная форма записи:

$$\hat{G}_{k\sigma}(i\omega_n) = \begin{pmatrix} G_{k\sigma}(i\omega_n), & F_{k\sigma}(i\omega_n) \\ \bar{F}_{k\sigma}(i\omega_n), & \bar{G}_{-k,\bar{\sigma}}(i\omega_n) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$\hat{D}_\sigma(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} D_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n), & D_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \\ D_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n), & D_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \end{pmatrix},$$

$$\hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \begin{pmatrix} G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n), & 0 \\ 0, & \bar{G}_{-k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\hat{V}_k = \begin{pmatrix} V_k, & 0 \\ 0, & -V_{-k}^* \end{pmatrix},$$

$$G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{k\sigma}}, \quad (9)$$

$$\bar{G}_{-k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \xi_{-k\bar{\sigma}}},$$

и учтено, что при раскрытии среднего от  $T$ -упорядоченного произведения

$$\langle T_\tau X_f^\alpha(\tau) X_f^{-\beta}(\tau') H_{int}(\tau_1) H_{int}(\tau_2) \dots H_{int}(\tau_n) \rangle$$

процедура спаривания  $c$ -операторов проводится независимо от спаривания  $X$ -операторов. При этом после спаривания оператора  $c_{k\sigma}(\tau_l)$  из  $H_{int}(\tau_l)$  с оператором  $c_{k\sigma}^\dagger(\tau_m)$  из  $H_{int}(\tau_m)$  возникает операторное выражение

$$|V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(\tau_l - \tau_m) \exp[ik(l-m)] X_l^{\sigma 0}(\tau_l) X_m^{0\sigma}(\tau_m). \quad (10)$$

Этот оператор описывает процесс перескока локализованного электрона с узла  $m$  на узел  $l$  и в этом смысле аналогичен оператору кинетической энергии в представлении Ванье. Различие связано с тем, что в данном случае имеется раздвижка по мацубаровскому времени между актами уничтожения электрона на узле  $m$  и его рождения на узле  $l$ . В модели Хаббарда, например, этот процесс является одновременным. Несмотря на это различие, в формальном отношении задача нахождения ФГ  $f$ -электронов сводится к аналогичной задаче модели Хаббарда в режиме предельно сильных корреляций, если считать, что роль интеграла перескока  $t_k$  играет величина  $\hat{t}_\sigma(k, i\omega_n) = |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$ . Заметим, что для несверхпроводящей фазы впервые такая эквивалентность была получена методом производящего функционала в работе [27]. Зависимость эффективного интеграла перескока  $\hat{t}_\sigma(k, i\omega_n)$  от мацубаровской частоты обусловлена отмеченными выше эффектами временной разнесенности актов рождения и уничтожения (аналогичная ситуация имеет место при рассмотрении электрон-фононного взаимодействия [26]). Если ФГ локализованной подсистемы найдены, то ФГ  $c$ -электронов находятся простой подстановкой  $\hat{D}_\sigma(k, i\omega_n)$  в уравнение (6).

Наличие концевых диаграмм приводит к тому,

что в  $(k, \omega_n)$ -представлении  $\hat{D}_\sigma(k, i\omega_n)$  выражается через функцию

$$\hat{G}_\sigma(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n), & \mathcal{G}_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \\ \mathcal{G}_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n), & \mathcal{G}_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \end{pmatrix} \quad (11)$$

и силовой оператор

$$\hat{P}_\sigma(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n), & P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \\ P_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n), & P_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \end{pmatrix} \quad (12)$$

посредством соотношения

$$\hat{D}_\sigma(k, i\omega_n) = \hat{G}_\sigma(k, i\omega_n) \hat{P}_\sigma(k, i\omega_n).$$

Существенно, что кроме нормальных компонент силового оператора имеются и отличные от нуля его аномальные компоненты  $P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n)$  и  $P_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n)$ . В графической форме система уравнений для нахождения функции (11) может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} \text{thick line} &= \text{double line} + \text{thick line with } \Sigma \\ \text{double line} &= \text{thick line} + \text{thick line with } P \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь жирной линии соответствует  $\hat{G}_\sigma(k, i\omega_n)$ , кружк с символом  $\Sigma$  — массовый оператор

$$\hat{\Sigma}_\sigma(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n), & \Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \\ \Sigma_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n), & \Sigma_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \end{pmatrix}, \quad (14)$$

а полукругу с символом  $P$  — силовой оператор. Двойная линия обозначает функцию

$$\hat{G}_\sigma^{(0)}(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{0\sigma,0\sigma}^{(0)}(k, i\omega_n), & \mathcal{G}_{0\sigma,\bar{\sigma}0}^{(0)}(k, i\omega_n) \\ \mathcal{G}_{\bar{\sigma}0,0\sigma}^{(0)}(k, i\omega_n), & \mathcal{G}_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}^{(0)}(k, i\omega_n) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Тонкой линии соответствует диагональная матрица локальных пропагаторов,

$$\hat{g}_\sigma(i\omega_n) = \begin{pmatrix} (i\omega_n - \tilde{E}_\sigma)^{-1}, & 0 \\ 0, & (i\omega_n + \tilde{E}_{\bar{\sigma}})^{-1} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

а волнистой линии — матрица эффективного взаимодействия,

$$\begin{aligned} \hat{t}_\sigma(k, i\omega_n) &= \hat{V}_k \hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) \hat{V}_k^\dagger = \\ &= \begin{pmatrix} |V_k|^2 (i\omega_n - \xi_{k\sigma})^{-1}, & 0 \\ 0, & |V_{-k}|^2 (i\omega_n + \xi_{-k\bar{\sigma}})^{-1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17)$$

В аналитической записи уравнения (13) имеют вид

$$\begin{aligned}\hat{G}_\sigma(k, i\omega_n) &= \hat{G}_\sigma^{(0)}(k, i\omega_n) + \\ &+ \hat{G}_\sigma^{(0)}(k, i\omega_n) \hat{\Sigma}_\sigma(k, i\omega_n) \hat{G}_\sigma(k, i\omega_n), \\ \hat{G}_\sigma^{(0)}(k, i\omega_n) &= \hat{g}_\sigma(i\omega_n) + \\ &+ \hat{g}_\sigma(i\omega_n) \hat{P}_\sigma(k, i\omega_n) \hat{t}_\sigma(k, i\omega_n) \hat{G}_\sigma^{(0)}(k, i\omega_n).\end{aligned}\quad (18)$$

Исключая из них  $\hat{G}_\sigma^{(0)}(k, i\omega_n)$ , приходим к точному матричному представлению, связывающему функцию (11) с массовым и силовым операторами:

$$\begin{aligned}\hat{G}_\sigma(k, i\omega_n) &= \left[ \hat{g}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - \right. \\ &\left. - \hat{P}_\sigma(k, i\omega_n) \hat{t}_\sigma(k, i\omega_n) - \hat{\Sigma}_\sigma(k, i\omega_n) \right]^{-1}.\end{aligned}\quad (19)$$

Расписывая покомпонентно, получаем

$$\begin{aligned}G_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) &= \left[ i\omega_n + \tilde{E}_{\bar{\sigma}} - P_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) |V_{-k}|^2 \times \right. \\ &\times \bar{G}_{-k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n) - \Sigma_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \left. \right] \times \\ &\times [\det_\sigma(k, i\omega_n)]^{-1},\end{aligned}\quad (20)$$

$$\begin{aligned}G_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) &= \left[ P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) |V_{-k}|^2 \bar{G}_{-k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n) + \right. \\ &\left. + \Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \right] [\det_\sigma(k, i\omega_n)]^{-1},\end{aligned}\quad (21)$$

$$\begin{aligned}G_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n) &= \left[ P_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n) |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) + \right. \\ &\left. + \Sigma_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n) \right] [\det_\sigma(k, i\omega_n)]^{-1},\end{aligned}\quad (22)$$

$$\begin{aligned}G_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) &= \left[ i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \times \right. \\ &\times |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \left. \right] \times \\ &\times [\det_\sigma(k, i\omega_n)]^{-1},\end{aligned}\quad (23)$$

где детерминант определяется равенством

$$\begin{aligned}\det_\sigma(k, i\omega_n) &= \left[ i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \times \right. \\ &\times |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \left. \right] \times \\ &\times \left[ i\omega_n + \tilde{E}_{\bar{\sigma}} - P_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \times \right. \\ &\times |V_{-k}|^2 \bar{G}_{-k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n) - \Sigma_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \left. \right] - \\ &- \left[ P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) |V_{-k}|^2 \bar{G}_{-k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n) + \right. \\ &\left. + \Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) \right] \times \\ &\times \left[ P_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n) |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) + \right. \\ &\left. + \Sigma_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n) \right].\end{aligned}\quad (24)$$

Уравнения (20)–(24) дают точные представления нормальных и аномальных ФГ локализованных  $f$ -электронов в сверхпроводящей фазе через нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов. Совместно с уравнением (6) эти уравнения определяют также и точное представление для нормальных и аномальных ФГ коллективизированных электронов через те же  $f$ -электронные массовый и силовой операторы. Их дальнейшее использование связано с рассмотрением конкретного приближения и явного вычисления массового и силового операторов.

Проанализируем структуру представления для нормальной фазы, когда аномальные компоненты массового и силового операторов равны нулю и уравнение (20) принимает вид

$$\begin{aligned}G_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) &= \left[ i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) - \right. \\ &\left. - P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) |V_k|^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) \right]^{-1}.\end{aligned}\quad (25)$$

С учетом явного вида пропагатора  $s$ -электронов  $G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$  находим, что для ФГ локализованных электронов справедливо выражение

$$\begin{aligned}D_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) &= (i\omega_n - \xi_{k\sigma}) P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \times \\ &\times \left\{ (i\omega_n - \xi_{k\sigma}) \left[ i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \right] - \right. \\ &\left. - P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) |V_k|^2 \right\}^{-1}.\end{aligned}\quad (26)$$

Аналогичная структура для нормальной компоненты ФГ  $f$ -электронов в несверхпроводящей фазе была получена ранее [27] методом производящего функционала. Подставляя выражение (26) в уравнение

$$\begin{aligned}G_{k\sigma}(i\omega_n) &= G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) + \\ &+ \left( G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n) \right)^2 |V_k|^2 D_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n),\end{aligned}\quad (27)$$

полученное из матричного соотношения (6), находим представление для ФГ коллективизированных электронов в нормальной фазе:

$$\begin{aligned}G_{k\sigma}(i\omega_n) &= \left[ i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \right] \times \\ &\times \left\{ (i\omega_n - \xi_{k\sigma}) \left[ i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) \right] - \right. \\ &\left. - P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) |V_k|^2 \right\}^{-1}.\end{aligned}\quad (28)$$

Проведем сравнение точных представлений (26) и (28) с представлениями, полученными в рамках

наиболее популярного в теории ТФ SB-метода в приближении среднего поля. Как известно, в последнем случае

$$D_{k\sigma}^{SB}(i\omega_n) = (i\omega_n - \xi_{k\sigma}) \times \left[ (i\omega_n - \xi_{k\sigma}) (i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - \lambda) - (1 - n_f) |V_k|^2 \right]^{-1}, \quad (29)$$

$$G_{k\sigma}^{SB}(i\omega_n) = (i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - \lambda) \times \left[ (i\omega_n - \xi_{k\sigma}) (i\omega_n - \tilde{E}_\sigma - \lambda) - (1 - n_f) |V_k|^2 \right]^{-1}. \quad (30)$$

В этих уравнениях  $\lambda$  — ренормировочный множитель Лагранжа, определяемый из условия  $n_{SB} = 1 - n_f$ , где  $n_{SB}$  — концентрация SB. Сопоставление представлений (28) и (30) показывает, что массовому оператору  $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}$  при SB-описании соответствует  $\lambda$ , а силовому оператору  $P_{0\sigma,0\sigma}$  — концентрация SB:

$$\begin{aligned} \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) &\rightarrow \lambda, \\ P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) &\rightarrow n_{SB} = 1 - n_f. \end{aligned} \quad (31)$$

Приняв это соответствие, замечаем, что точное представление (26) отличается от приближенного выражения (29) множителем  $P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n)$ , стоящим в числителе. Поскольку по установленному соответствию  $P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) = 1 - n_f$ , различие между двумя представлениями будет мало, если  $n_f \ll 1$ . Отсюда следует, что область применения среднеполевой SB-теории ограничена малыми концентрациями локализованных электронов ( $n_f \ll 1$ ) и поэтому ее использование в режиме ТФ не является адекватным. Применение SB-подхода для описания локализованных электронов в кондо-режиме ( $n_f \rightarrow 1$ ) из-за отмеченного отсутствия ренормировочного множителя в числителе существенно исказит спектральную интенсивность и значения термодинамических средних. Завершая этот сравнительный анализ, отметим, что в силу зависимости массового и силового операторов от мадубаровской частоты возникающие в действительности ренормировки будут иметь различные значения на разных энергетических масштабах. Очевидно, что этот эффект совершенно игнорируется в идеологии сопутствующих бозонов, по крайней мере в простейшем приближении.

### 3. ОДНОПЕТЛЕВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ МАССОВОГО И СИЛОВОГО ОПЕРАТОРОВ $f$ -ЭЛЕКТРОНОВ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЕ

Вывод уравнений самосогласования для сверхпроводящей фазы при учете эффектов спин-флук-

Таблица 1. Однопетлевые диаграммы для массового и силового операторов

$\Sigma_{0\sigma,0\sigma}$		$\delta P_{0\sigma,0\sigma}$	
$\Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$		$P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$	

туационного рассеяния проведем в однопетлевом приближении. Диаграммы, определяющие вклады в массовый и силовой операторы, приведены в табл. 1. При их получении использовался принцип топологической непрерывности [28], дополненный принципом старшинства фермиподобных операторов Хаббарда над бозеподобными [24]. Для нормальной компоненты массового оператора имеется одна диаграмма, для всех других компонент — по две. Нормальная компонента силового оператора  $P_{0\sigma,0\sigma}$  в беспетлевом приближении отлична от нуля и равна  $1 - N_{\bar{\sigma}}$  ( $N_{\sigma}$  — вероятность заполнения  $f$ -уровня электроном с проекцией спинового момента  $\sigma$ ). Однопетлевая поправка для этой величины обозначалась посредством  $\delta P_{0\sigma,0\sigma}$ , так, что  $P_{0\sigma,0\sigma} = 1 - N_{\bar{\sigma}} + \delta P_{0\sigma,0\sigma}$ .

Таблица 2. Элементы диаграммной техники и соответствующие им функции

	$g_{0\sigma}(i\omega_n)$		$\mathcal{G}_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n)$
	$D_{\bar{\sigma}\sigma,\bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_n)$		$\mathcal{G}_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(k, i\omega_n)$
	$ V_k ^2 G_{k\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$		$D_{\sigma\sigma,\sigma\sigma}^{(irr)}(k, i\omega_n)$
	$ V_k ^2 G_{k\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_n)$		$D_{\sigma\sigma,\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{(irr)}(k, i\omega_n)$

В табл. 2 приведены по отдельности графические элементы диаграмм и сопоставляемые им функции. Двойной штриховой линией с черным кружком соответствует фурье-образ поперечной квазиспиновой ФГ:

$$D_{\bar{\sigma}\sigma,\bar{\sigma}\sigma}(f\tau; g\tau') = -\langle T_\tau \tilde{X}_f^{\bar{\sigma}\sigma}(\tau) \tilde{X}_g^{\sigma\bar{\sigma}}(\tau') \rangle. \quad (32)$$

Заштрихованные области соответствуют фурье-образу неприводимой ФГ от квазибозевских диагональных операторов Хаббарда:

$$D_{\sigma\sigma,ss}^{(irr)}(f\tau; g\tau') = -\langle T_\tau \Delta \tilde{X}_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\tau) \Delta \tilde{X}_g^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(\tau') \rangle. \quad (33)$$

При  $s = \sigma$  ей сопоставляется область с двумя светлыми кружками, а при  $s = \bar{\sigma}$  — область с одним свет-

лым и одним темным кружком,  $\Delta X = X - \langle X \rangle$ . Условие неприводимости означает отсутствие расщепленных графиков (см., например, [29]) в диаграммном представлении ФГ (33). Остальные функции, приведенные в табл. 2, определены выше. Используя правила диаграммной техники для операторов Хаббарда и данные табл. 1 и 2, запишем аналитические выражения для нормальных и аномальных компонент массового и силового операторов:

$$\begin{aligned} \Sigma_{0\sigma,0\sigma} &= \\ &= -\frac{T}{N} \sum_{q,\omega_m} |V_q|^2 G_{q,\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_m) \mathcal{G}_{0\bar{\sigma},0\bar{\sigma}}(q, i\omega_m), \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0} &= \frac{T}{N} \sum_{q,\omega_m} |V_q|^2 \times \\ &\times \left[ G_{q,\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_m) \mathcal{G}_{0\bar{\sigma},\sigma 0}(q, i\omega_m) - \right. \\ &\quad \left. - G_{q,\sigma}^{(0)}(i\omega_m) \mathcal{G}_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(q, i\omega_m) \right], \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \delta P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) &= -\frac{T}{N} \sum_{q,\omega_m} |V_q|^2 \times \\ &\times \left[ G_{q,\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_m) \mathcal{G}_{0\bar{\sigma},0\bar{\sigma}}(q, i\omega_m) D_{\bar{\sigma}\sigma,\bar{\sigma}\sigma}(k-q, i\omega_n - i\omega_m) + \right. \\ &\quad \left. + G_{q,\sigma}^{(0)}(i\omega_m) \mathcal{G}_{0\sigma,0\sigma}(q, i\omega_m) \times \right. \\ &\quad \left. \times D_{\sigma\sigma,\sigma\sigma}^{(irr)}(k-q, i\omega_n - i\omega_m) \right], \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(k, i\omega_n) &= -\frac{T}{N} \sum_{q,\omega_m} |V_q|^2 \times \\ &\times \left[ G_{q,\bar{\sigma}}^{(0)}(i\omega_m) \mathcal{G}_{0\bar{\sigma},\sigma 0}(q, i\omega_m) D_{\bar{\sigma}\sigma,\bar{\sigma}\sigma}(k-q, i\omega_n - i\omega_m) + \right. \\ &\quad \left. + G_{q,\sigma}^{(0)}(i\omega_m) \mathcal{G}_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(q, i\omega_m) \times \right. \\ &\quad \left. \times D_{\sigma\sigma,\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{(irr)}(k-q, i\omega_n - i\omega_m) \right]. \end{aligned} \quad (37)$$

Видно, что в однопетлевом приближении компоненты массового оператора не зависят от значений квазиимпульса  $k$  и частоты  $\omega_n$ , причем для  $\Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$  выполняется соотношение  $\Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0} = -\Sigma_{0\bar{\sigma},\sigma 0}$ . Выражения (36) и (37) для компонент силового оператора содержат фурье-образы квазиспиновой ФГ (32) и неприводимой ФГ (33). Благодаря этому, через силовой оператор осуществляется влияние процессов спин-флуктуационного рассеяния на механизм куперовской неустойчивости ТФ-систем.

Применяя к выражениям (35) и (37) представление (21), получим замкнутую систему интегральных уравнений относительно аномальных компонент массового и силового операторов для сверхпроводящей фазы. Учитывая, что в этой фазе

магнитное поле равно нулю, запишем искомую систему относительно величин  $\Sigma_{12} = \Sigma_{0\uparrow,\downarrow 0}$  и  $2P(k, i\omega_n) = P_{0\uparrow,\downarrow 0}(k, i\omega_n) - P_{0\downarrow,\uparrow 0}(k, i\omega_n)$ :

$$\begin{aligned} \Sigma_{12} &= -\frac{2T}{N} \sum_{q,\omega_m} |V_q|^2 G_q^{(0)}(i\omega_m) \times \\ &\times \frac{|V_q|^2 \bar{G}_q^{(0)}(i\omega_m) P(q, i\omega_m) + \Sigma_{12}}{\det(q, i\omega_m)}, \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} P(k, i\omega_n) &= \frac{T}{N} \sum_{q,\omega_m} |V_q|^2 G_q^{(0)}(i\omega_m) \times \\ &\times \chi_C^{(-)}(k-q, i\omega_n - i\omega_m) \times \\ &\times \frac{|V_q|^2 \bar{G}_q^{(0)}(i\omega_m) P(q, i\omega_m) + \Sigma_{12}}{\det(q, i\omega_m)}. \end{aligned} \quad (39)$$

Переход к симметризованной комбинации  $P$  обусловлен тем, что в этом случае продольные и поперечные квазиспиновые ФГ входят в уравнения аддитивным образом, так, что

$$\begin{aligned} \chi_C^{(-)}(k, i\omega_n) &= D_{\perp}(k, i\omega_n) + D_{\parallel}(k, i\omega_n) - \\ &- \frac{1}{4} C(k, i\omega_n) = 3D_{\parallel}(k, i\omega_n) - \frac{1}{4} C(k, i\omega_n). \end{aligned} \quad (40)$$

При введении продольной квазиспиновой ФГ  $D_{\parallel}(k, i\omega_n)$  и ФГ зарядовых флуктуаций  $C(k, i\omega_n)$  было учтено условие полноты  $X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma} + X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} = 1$ , а также операторное тождество  $X_f^{\sigma\sigma} = \hat{N}_f/2 + 2\sigma S_f^z$ ,  $\sigma = \pm 1/2$ , в котором  $\hat{N}_f = X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow}$ . С учетом этих соотношений фурье-образы неприводимых ФГ (33) записывались в виде

$$\begin{aligned} D_{\sigma\sigma,\sigma\sigma}^{(irr)}(k, i\omega_n) &= \frac{1}{4} C(k, i\omega_n) + D_{\parallel}(k, i\omega_n), \\ D_{\sigma\sigma,\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{(irr)}(k, i\omega_n) &= \frac{1}{4} C(k, i\omega_n) - D_{\parallel}(k, i\omega_n). \end{aligned} \quad (41)$$

В приведенных формулах  $C(k, i\omega_n)$ ,  $D_{\parallel}(k, i\omega_n)$  и  $D_{\perp}(k, i\omega_n)$  определены посредством следующих разложений:

$$\begin{aligned} -\langle T_{\tau} \Delta \tilde{N}_f(\tau) \Delta \tilde{N}_g(\tau') \rangle &= \frac{T}{N} \times \\ &\times \sum_{k, i\omega_m} \exp[ik(f-g) - i\omega_m(\tau - \tau')] C(k, i\omega_m), \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} -\langle T_{\tau} \tilde{S}_f^z(\tau) \tilde{S}_g^z(\tau') \rangle &= \frac{T}{N} \times \\ &\times \sum_{k, i\omega_m} \exp[ik(f-g) - i\omega_m(\tau - \tau')] D_{\parallel}(k, i\omega_m), \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned}
 & - \langle T_\tau X_f^{\bar{\sigma}\sigma}(\tau) X_g^{\sigma\bar{\sigma}}(\tau') \rangle = \frac{T}{N} \times \\
 & \times \sum_{k, i\omega_m} \exp[ik(f-g) - i\omega_m(\tau - \tau')] D_\perp(k, i\omega_m), \\
 & h = 0. \quad (44)
 \end{aligned}$$

При записи последнего равенства в формуле (40) учтено, что при  $h = 0$  имеет место сферическая симметрия квазиспиновых ФГ:  $D_\perp(k, i\omega_n) = 2D_\parallel(k, i\omega_n)$ .

#### 4. КВАЗИСПИНОВЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА В ОДНОПЕТЛЕВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Для дальнейшего рассмотрения системы уравнений самосогласования (38) необходимо вычислить  $\chi_C^{(-)}(q, i\omega_m)$ . Характерные энергии зарядовых флуктуаций в большинстве случаев значительно превосходят энергии спиновых флуктуаций. Поэтому зарядовые флуктуации дают меньший вклад по сравнению с вкладом от спиновых флуктуаций и ими можно пренебречь.

В рассматриваемом однопетлевом приближении графическое уравнение для поперечной квазиспиновой ФГ имеет вид

$$\begin{aligned}
 & \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \\
 & \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \\
 & + \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \\
 & + \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \quad (45)
 \end{aligned}$$

Здесь черному кружку соответствует квазиспиновый силовой оператор  $P_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(q, i\omega_m)$ , определяемый графиками

$$\bullet = \circ + \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \quad (46)$$

Светлый кружок представляет вклад нулевого порядка,  $N_{\bar{\sigma}} - N_\sigma$ . Следующие за светлым кружком две диаграммы являются однопетлевыми поправками  $\delta P_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(q, i\omega_m)$ . Жирной волнистой линии в формуле (45) отвечает эффективное взаимодействие, удовлетворяющее уравнению

$$\text{---} \bullet \text{---} = \text{---} \bullet \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \quad (47)$$

В графических выражениях (46) и (47) символ «P» в светлом полукруге, как и раньше, обозначает

$f$ -электронный силовой оператор  $P_{0\sigma, 0\sigma}(q, i\omega_m)$ . Используя правила диаграммной техники для операторов Хаббарда, уравнению (45) можно придать аналитическую форму,

$$\begin{aligned}
 & D_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) = g_{\bar{\sigma}\sigma}^{(0)}(i\omega_m) P_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) + \\
 & + g_{\bar{\sigma}\sigma}^{(0)}(i\omega_m) \Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) D_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m), \quad (48)
 \end{aligned}$$

и с учетом выражения  $g_{\bar{\sigma}\sigma}^{(0)}(i\omega_m) = 1/(i\omega_m + 2\sigma h)$  для квазиспинового пропагатора переписать его в виде

$$D_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) = \frac{P_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)}{i\omega_m + 2\sigma h - \Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)}. \quad (49)$$

Фигурирующий в этом уравнении спиновый массовый оператор  $\Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)$  представляет вклады двух петель правой части уравнения (45) и дается выражением

$$\begin{aligned}
 & \Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) = -\frac{T}{N} \sum_{q, \omega_n} t_\sigma(q, i\omega_n) \times \\
 & \times [1 + t_\sigma(q, i\omega_n) D_{0\sigma, 0\sigma}(q, i\omega_n)] G_{\bar{\sigma}0, \bar{\sigma}0}(k-q, i\omega_m - \omega_n) - \\
 & - \frac{T}{N} \sum_{q, \omega_n} t_{\bar{\sigma}}(q, i\omega_n) [1 + t_{\bar{\sigma}}(q, i\omega_n) D_{0\bar{\sigma}, 0\bar{\sigma}}(q, i\omega_n)] \times \\
 & \times G_{0\sigma, 0\sigma}(k+q, i\omega_m + \omega_n). \quad (50)
 \end{aligned}$$

Для силового оператора  $P_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)$ , определяемого графиками (46), по правилам диаграммной техники для операторов Хаббарда находим

$$\begin{aligned}
 & P_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) = (N_{\bar{\sigma}} - N_\sigma) + \\
 & + \frac{T}{N} \sum_{q, \omega_n} [t_\sigma(q+k, i\omega_{n+m}) P_{0\sigma, 0\sigma}(q+k, i\omega_{n+m}) - \\
 & - t_{\bar{\sigma}}(q, i\omega_n) P_{0\bar{\sigma}, 0\bar{\sigma}}(q, i\omega_n)] \times \\
 & \times G_{0\sigma, 0\sigma}(q+k, i\omega_{n+m}) G_{0\bar{\sigma}, 0\bar{\sigma}}(q, i\omega_n). \quad (51)
 \end{aligned}$$

Полученные формулы (49)–(51) совместно с выведенной в предыдущем разделе системой самосогласования, а также с представлениями для ФГ позволяют самосогласованным образом исследовать условия реализации сверхпроводящей фазы.

#### 5. УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ В ТОЧКЕ ПЕРЕХОДА

Поскольку квазиспиновые ФГ входят только в однопетлевую поправку для силового оператора, при решении с рассматриваемой точностью уравне-



ний самосогласования можно воспользоваться рядом упрощений. В частности, при вычислении квазиспинового массового оператора  $\Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)$  электронные ФГ должны браться в беспетлевом при-

ближении. Это позволяет в аналитическом виде провести суммирование по мацубаровским частотам и получить следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) = & \\ = \frac{1}{N} \sum_q \sum_\alpha \alpha \left\{ f(\tilde{E}_{q\sigma}^\alpha) \frac{|V_q|^2 (\tilde{E}_{q\sigma}^\alpha - \tilde{\varepsilon}_{f\sigma}) (-i\omega_m + \tilde{E}_{q\sigma}^\alpha - \xi_{q-k, \bar{\sigma}}) - |V_{q-k}|^2 (\tilde{E}_{q\sigma}^\alpha - \xi_{q\sigma}) (-i\omega_m + \tilde{E}_{q\sigma}^\alpha - \tilde{\varepsilon}_{f\bar{\sigma}})}{\nu_{q\sigma} (-i\omega_m + \tilde{E}_{q\sigma}^\alpha - \tilde{E}_{q-k, \bar{\sigma}}^\alpha) (-i\omega_m + \tilde{E}_{q\sigma}^\alpha - \tilde{E}_{q-k, \bar{\sigma}}^\alpha)} - \right. & \\ \left. - f(\tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha) \frac{|V_q|^2 (\tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \tilde{\varepsilon}_{f\bar{\sigma}}) (i\omega_m + \tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \xi_{q-k, \sigma}) - |V_{q-k}|^2 (\tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \xi_{q\bar{\sigma}}) (i\omega_m + \tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \tilde{\varepsilon}_{f\sigma})}{\nu_{q\bar{\sigma}} (i\omega_m + \tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \tilde{E}_{q-k, \sigma}^\alpha) (i\omega_m + \tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \tilde{E}_{q-k, \sigma}^\alpha)} \right\}. & \quad (52) \end{aligned}$$

Здесь  $f(x) = [\exp(x/T) + 1]^{-1}$  — функция Ферми–Дирака, а  $\tilde{\varepsilon}_{f\sigma}$  — энергия эффективного локализованного уровня,  $\tilde{\varepsilon}_{f\sigma} = E_\sigma + \Sigma_{0\sigma, 0\sigma} - \mu$ . Заметим, что при вычислении поперечной ФГ магнитное поле считается отличным от нуля, и только на конечном этапе рассматривается предел  $h \rightarrow 0$ . Одночастичный миксонный спектр  $\tilde{E}_{k\sigma}^\alpha$  определяется выражением

$$\tilde{E}_{k\sigma}^\alpha = \frac{\xi_{k\sigma} + \tilde{\varepsilon}_{f\sigma}}{2} + \frac{\alpha}{2} \nu_{k\sigma},$$

$$\nu_{k\sigma} = \sqrt{(\xi_{k\sigma} - \tilde{\varepsilon}_{f\sigma})^2 + 4(1 - N_{\bar{\sigma}}) |V_k|^2}, \quad \alpha = \pm 1. \quad (53)$$

Для силового оператора, после суммирования по мацубаровским частотам в (51), находим

$$P_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) = -\frac{4}{3} \frac{\sigma \chi_0 n_f^2}{(2 - n_f)^2} h + R_\sigma(k, i\omega_m), \quad (54)$$

где функция  $R(k, i\omega_m)$  имеет вид

$$\begin{aligned} R_\sigma(k, i\omega_m) = & (i\omega_m + 2\sigma h + \Sigma_{0\bar{\sigma}, 0\bar{\sigma}} - \Sigma_{0\sigma, 0\sigma}) \times \\ & \times \frac{1}{N} \sum_q \sum_\alpha \alpha \left\{ f(\tilde{E}_{q,\sigma}^\alpha) \frac{(-i\omega_m + \tilde{E}_{q\sigma}^\alpha - \xi_{q+k, \bar{\sigma}}) (\tilde{E}_{q,\sigma}^\alpha - \xi_{q,\sigma})}{\nu_{q,\sigma} (-i\omega_m + \tilde{E}_{q,\sigma}^\alpha - \tilde{E}_{q+k, \bar{\sigma}}^\alpha) (-i\omega_m + \tilde{E}_{q,\sigma}^\alpha - \tilde{E}_{q+k, \bar{\sigma}}^\alpha)} + \right. & \\ & \left. + f(\tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha) \frac{(i\omega_m + \tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \xi_{q+k, \sigma}) (\tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \xi_{q\bar{\sigma}})}{\nu_{q\bar{\sigma}} (i\omega_m + \tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \tilde{E}_{q+k, \sigma}^\alpha) (i\omega_m + \tilde{E}_{q\bar{\sigma}}^\alpha - \tilde{E}_{q+k, \sigma}^\alpha)} \right\}. & \end{aligned}$$

Первое слагаемое в правой части уравнения (54) записано с учетом малости магнитного поля. Возникающая при этом статическая восприимчивость определяется пределом,

$$\chi_0 = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{3(N_\sigma - N_{\bar{\sigma}})}{4\sigma h}. \quad (55)$$

При вычислении обобщенной динамической восприимчивости

$$\chi(k, i\omega_m) = -\frac{3}{2} D_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) \quad (56)$$

по формулам (49), (52), (54) следует различать нулевые значения четной мацубаровской частоты  $i\omega_m$  (при  $m = 0$ ) и отличные от нуля (при  $m \neq 0$ ). В первом случае функции  $R_\sigma(k, i\omega_m)$  и  $\Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)$  при малых магнитных полях пропорциональны  $2\sigma h$  и ФГ (49) может быть представлена как

$$\begin{aligned} D_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, 0) = & \left[ -\frac{2}{3} \frac{\chi_0 n_f^2}{(2 - n_f)^2} + \right. & \\ & \left. + 2\sigma \frac{\partial R_\sigma(k, 0)}{\partial h} \right] \left[ 1 - 2\sigma \frac{\partial \Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, 0)}{\partial h} \right]^{-1}. & \quad (57) \end{aligned}$$

Во втором случае, при  $m \neq 0$ , функции  $R_\sigma(k, i\omega_m)$  и  $\Sigma_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)$  конечны при  $h \rightarrow 0$  и могут быть записаны в виде произведения  $i\omega_m$  на действительные функции переменной  $\omega_m$ :

$$\begin{aligned} P'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) &= i\omega_m P'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, \omega_m), \\ \Sigma'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) &= i\omega_m \Sigma'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, \omega_m), \end{aligned} \quad (58)$$

где

$$\begin{aligned} P'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, \omega_m) &= \frac{2}{N} \sum_q \sum_\alpha \alpha \frac{f(\tilde{E}_q^\alpha)}{\nu_q} (\tilde{E}_q^\alpha - \xi_q) \times \\ &\times \left[ \omega_m^2 (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{\varepsilon}_f) + (\tilde{E}_q^\alpha - \xi_{q+k})(\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q+k}^\alpha) \right] \times \\ &\times (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q+k}^\alpha) \left[ (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q+k}^\alpha)^2 + \omega_m^2 \right]^{-1} \times \\ &\times \left[ (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q+k}^\alpha)^2 + \omega_m^2 \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (59)$$

$$\begin{aligned} \Sigma'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, \omega_m) &= \frac{2}{N} \sum_q \sum_\alpha \alpha \frac{f(\tilde{E}_q^\alpha)}{\nu_q} \times \\ &\times \left\{ (2\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{\varepsilon}_f - \xi_{q-k})(\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{\varepsilon}_f) \times \right. \\ &\times \left[ |V_q|^2 (\tilde{E}_q^\alpha - \xi_{q-k}) - |V_{q-k}|^2 (\tilde{E}_q^\alpha - \xi_q) \right] - \\ &- \left[ |V_q|^2 (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{\varepsilon}_f) - |V_{q-k}|^2 (\tilde{E}_q^\alpha - \xi_q) \right] \times \\ &\times \left[ -\omega_m^2 + (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q-k}^\alpha)(\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q-k}^\alpha) \right] \left. \right\} \times \\ &\times \left[ (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q-k}^\alpha)^2 + \omega_m^2 \right]^{-1} \left[ (\tilde{E}_q^\alpha - \tilde{E}_{q-k}^\alpha)^2 + \omega_m^2 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (60)$$

Таким образом, при  $\omega_m \neq 0$  спиновая ФГ (49) принимает вид

$$D_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m) = \frac{P'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, \omega_m)}{1 - \Sigma'_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, \omega_m)}. \quad (61)$$

Выражения (57) и (61) определяют спиновую ФГ как действительную функцию мацубаровской частоты. Эти выражения будут использованы далее в самосогласованных численных расчетах.

В ТФ-скуттерудите  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$  реализуется переход в сверхпроводящую фазу с  $s$ -типом симметрии параметра порядка [8]. Для этого типа симметрии детали изменения квазиспиновых ФГ в пределах зоны Бриллюэна не являются существенными, и можно воспользоваться часто применяемым приближением [30, 31], при котором функция (56) заменяется ее средним по зоне Бриллюэна значением:

$$\chi(k, i\omega_m) \Rightarrow \bar{\chi}(i\omega_m) = \frac{1}{N} \sum_k \chi(k, i\omega_m). \quad (62)$$

В этом случае, как видно из уравнений самосогласования (38), величина  $P$  зависит только от мацубаровской частоты. Учитывая, что в точке сверхпроводящего перехода величины  $\Sigma_{12}$  и  $P(i\omega_n)$  обращаются в нуль, введем функцию

$$\rho(i\omega_n) = \frac{P(i\omega_n)}{\Sigma_{12}}, \quad (63)$$

остающуюся конечной при  $T = T_c$ . Подставляя  $P(i\omega_n) = \Sigma_{12}\rho(i\omega_n)$  в (38) и сокращая на  $\Sigma_{12}$ , получаем систему уравнений для одновременного нахождения  $\rho(i\omega_n)$  и критической температуры:

$$\begin{aligned} \rho(i\omega_n) &= -T \sum_{\omega_m} \bar{\chi}(i\omega_{n-m}) \Phi(i\omega_m), \\ 1 &= -2T \sum_{\omega_m} \Phi(i\omega_m), \end{aligned} \quad (64)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(i\omega_m) &= \frac{1}{N} \times \\ &\times \sum_q \frac{|V_q|^2 (i\omega_m + \xi_q) + \rho(i\omega_m) |V_q|^4}{|(i\omega_m - \xi_q)(i\omega_m - \tilde{\varepsilon}_f) - P_{0\sigma, 0\sigma}(i\omega_m) |V_q|^2|^2}. \end{aligned} \quad (65)$$

Поскольку система уравнений (64) служит для определения  $T_c$ , в ней  $T = T_c$ , а мацубаровские частоты берутся для критической температуры.

К полученной системе необходимо добавить уравнение для химического потенциала,

$$n_e = n_c + n_f, \quad (66)$$

где  $n_e$  — полная концентрация электронов в расчете на одну ячейку в обеих подсистемах. Средние значения чисел заполнения коллективизированных ( $n_c$ ) и локализованных ( $n_f$ ) электронов вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} n_f &= 2 \frac{T}{N} \sum_{k\omega_n} \exp(i\omega_n \delta) D_{0\sigma, 0\sigma}(k, i\omega_n), \\ n_c &= 2 \frac{T}{N} \sum_{k\omega_n} \exp(i\omega_n \delta) G_{k\sigma}(i\omega_n), \quad \delta \rightarrow +0. \end{aligned} \quad (67)$$

При нахождении границы области реализации сверхпроводящей фазы ФГ  $D_{0\sigma, 0\sigma}(k, i\omega_n)$  и  $G_{k\sigma}(i\omega_n)$  в уравнении (67) определяются выражениями (26) и (28), в которых отсутствуют вклады от аномальных компонент массового и силового операторов.

### 6. КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Нахождение критической температуры на основе численного решения уравнений (64) связано с предварительным определением зависимости от мацубаровской частоты нормальной компоненты силового оператора  $P_{0\sigma,0\sigma}(k, i\omega_n) = 1 - n/2 + \delta P_{0\sigma,0\sigma}$ , входящей в формулу (65) для  $\Phi(i\omega_m)$ . Решение этой задачи осуществлялось с помощью аналитического выражения (36), в котором, как и в предыдущем разделе, использовались усредненные по зоне Бриллюэна спиновые и неприводимые ФГ.

На рис. 1 приведены типичные частотные зависимости вещественной и мнимой частей величины  $\delta P_{11} = \delta P_{0\uparrow,0\uparrow}$ , полученные в процессе самосогласованного расчета при значении полной концентрации электронов  $n_e = 1.482$  (концентрация  $f$ -электронов  $n_f = 0.83$ ). Поскольку вещественные составляющие  $\delta P_{11}(i\omega_m)$  являются четными функциями частот, а мнимые — нечетными, значения величин показаны только для положительных мацубаровских частот. При расчетах полагалось, что кристаллическая структура ТФ-скуттерудита  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$  обладает кубической симметрией, а затравочный спектр зонных электронов может быть записан в приближении сильной связи:

$$\varepsilon_k = 2t_1(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z). \quad (68)$$

Ширина зоны  $W = 12|t_1|$  ( $t_1 < 0$ ), а константа гибридизации равняется одной десятой ее ширины,  $V/|t_1| = 1.2$ . Локализованный уровень находится в зоне проводимости на расстоянии  $W/3$  от ее наи-

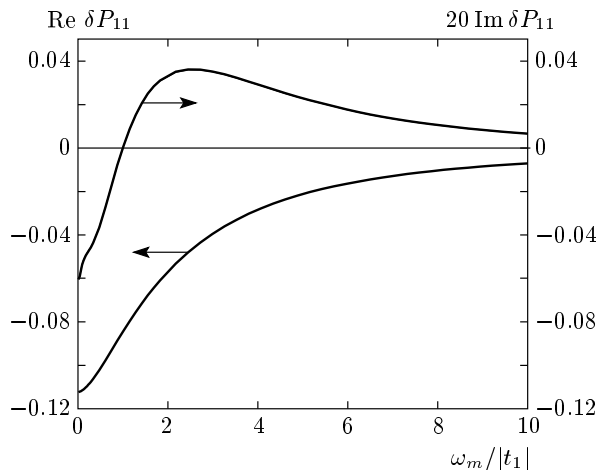


Рис. 1. Частотная зависимость поправки к нормальной компоненте силового оператора

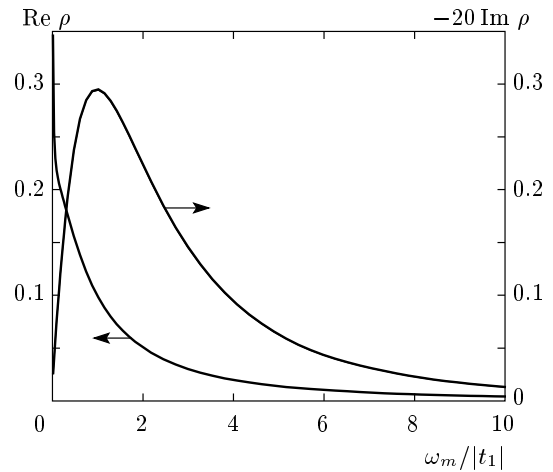


Рис. 2. Частотная зависимость функции  $\rho$

меньшего значения,  $E_0/|t_1| = -2$ . При других наборах параметров качественная картина представленных зависимостей сохраняется.

Характерные особенности поведения функции  $\rho(i\omega_n)$ , найденной в процессе самосогласованного расчета критической температуры  $T_c$  при приведенных выше параметрах системы, показаны на рис. 2. По причине, отмеченной выше, даны значения вещественной и мнимой частей  $\rho(i\omega_n)$  только для положительных значений мацубаровских частот.

Основной результат этой части вычислений заключается в том, что на масштабе частот порядка ширины зоны проводимости величины как  $\delta P_{11}(i\omega_m)$ , так и  $\rho(i\omega_m)$  проявляют сильную зависимость от  $\omega_m$ . Для низких частот вещественная часть  $\delta P_{11}(i\omega_m)$  имеет значение примерно  $-0.1$  и ренормировка эффективного параметра гибридизации в сторону его уменьшения усиливается. В результате вещественная часть фактора, перенормирующего константу гибридизации в области низких частот, равна  $1 - n_f/2 - 0.1 = 0.485$ . Это соответствует промежуточному значению между величинами, полученными с помощью приближения Хаббард-I ( $1 - n_f/2 = 0.585$ ) и слейв-бозонного подхода ( $1 - n_f = 0.17$ ). Существенное различие состоит в том, что в двух последних приближениях мнимая составляющая ренормировки, ответственная за процессы рассеяния, вообще не учитывается, а частотная зависимость игнорируется полностью.

На рис. 3 показана частотная зависимость мацубаровской восприимчивости  $\chi(i\omega_m) = -3D_{\parallel}(i\omega_m)$ , рассчитанная одновременно с компонентами силового оператора. Видно, что при низких частотах эта восприимчивость имеет заметно отличные от нуля

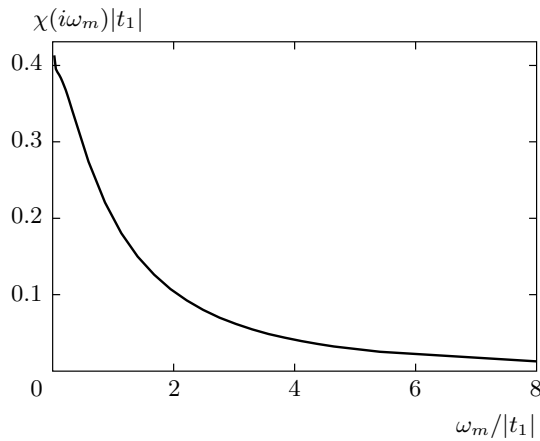


Рис. 3. Зависимость динамической магнитной восприимчивости локализованных электронов от мацубаровской частоты

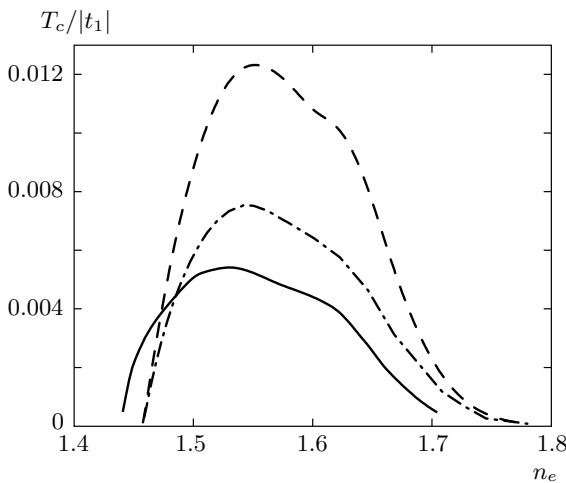


Рис. 4. Концентрационные зависимости температуры перехода в сверхпроводящее состояние с *s*-симметрией параметра порядка, рассчитанные по формулам (64) — сплошная линия; (73) — штриховая линия; (74) — штрихпунктирная линия

значения в интервале  $0 < |\omega_m| < W/3$ . Кроме того, значение восприимчивости при нулевой частоте  $\omega_m = 0$  имеет «всплеск» (см. замечание после формулы (55)).

Совместное решение уравнений для  $\chi(i\omega_m)$ ,  $\delta P_{11}(i\omega_m)$ ,  $\rho(i\omega_m)$  и химического потенциала позволило изучить поведение температуры перехода в сверхпроводящую фазу с *s*-типом симметрии параметра порядка. Результаты самосогласованных численных расчетов концентрационной зависимо-

сти критической температуры при использовании уравнений (64), учитывающих динамический характер спиновых флуктуаций, представлены на рис. 4 сплошной линией. Характерная особенность этой зависимости заключается в том, что область куперовской неустойчивости реализуется только при тех концентрациях электронов  $n_e \geq n_{cr}$ , когда в верхней гибридной подзоне содержатся квазичастицы. Если химический потенциал находится в пределах нижней подзоны, то условия реализации сверхпроводимости *s*-типа не выполняются. При заполнении верхней подзоны значение  $T_c$  в начале резко возрастает, достигает максимума при оптимальной концентрации и затем плавно убывает.

Для прояснения роли динамических спиновых флуктуаций при формировании сверхпроводящего *s*-состояния проведем сравнение полученной концентрационной зависимости  $T_c$  с аналогичными кривыми, рассчитанными в более простых приближениях: а) в приближении, не учитывающем динамику спиновых флуктуаций (статическое приближение); б) в приближении среднего поля.

В статическом приближении квазиспиновые ФГ отличны от нуля только для нулевого значения мацубаровской частоты. В реальности этому соответствует случай высоких температур, поэтому данное приближение можно назвать высокотемпературным пределом. Действительно, как следует из формулы (61), ФГ  $D_{\bar{\sigma}\sigma, \bar{\sigma}\sigma}(k, i\omega_m)$  обратно пропорциональна  $T^2$ , что позволяет при высоких температурах пренебречь всеми гармониками динамической восприимчивости, кроме  $\omega_m = 0$ . Тогда для функции  $\rho(i\omega_m)$  из формулы (64) получаем решение

$$\rho(i\omega_n) = -\frac{T\bar{\chi}(0)\Phi_1(i\omega_n)}{1 + T\bar{\chi}(0)\Phi_2(i\omega_n)}, \quad (69)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_1(i\omega_m) &= \frac{1}{N} \times \\ &\times \sum_q \frac{|V_q|^2(i\omega_m + \xi_q)}{|(i\omega_m - \xi_q)(i\omega_m - \tilde{\epsilon}_f) - P_{0\sigma, 0\sigma}(i\omega_m)|V_q|^2|^2}, \end{aligned} \quad (70)$$

$$\begin{aligned} \Phi_2(i\omega_m) &= \frac{1}{N} \times \\ &\times \sum_q \frac{|V_q|^4}{|(i\omega_m - \xi_q)(i\omega_m - \tilde{\epsilon}_f) - P_{0\sigma, 0\sigma}(i\omega_m)|V_q|^2|^2}. \end{aligned}$$

С другой стороны,  $\rho(i\omega_n) = -T\bar{\chi}(0)\Phi(i\omega_n)$ . Суммируя  $\rho(i\omega_n)$  по мацубаровским частотам и учитывая второе равенство в формуле (64), приходим к правилу сумм

$$2 \sum_{\omega_n} \rho(i\omega_n) = \bar{\chi}(0), \tag{71}$$

позволяющему записать в явном виде уравнение для критической температуры  $T_c$ :

$$1 + 2T \sum_{\omega_n} \frac{\Phi_1(i\omega_n)}{1 + T\bar{\chi}(0)\Phi_2(i\omega_n)} = 0. \tag{72}$$

Заметим, что в работе [32] это же уравнение было выведено из условия существования в куперовском канале полюса у амплитуды рассеяния, вычисленной в нормальной фазе при учете статических спин-флуктуационных вкладов. Это совпадение показывает, что включение аномальных компонент силового оператора в теорию сверхпроводящей фазы соответствует учету спиновых и зарядовых флуктуаций. В этой связи отметим работу [33], в которой для модели Хаббарда в режиме сильных корреляций была решена задача о куперовской неустойчивости и продемонстрирована важность учета процессов рассеяния на спиновых флуктуациях. Концентрационная зависимость критической температуры, рассчитанная по формуле (72), показана на рис. 4 штрихпунктирной линией. Заметим, что использованное здесь статическое приближение может быть обосновано не только за счет реализации высоких температур. Поскольку важным является лишь малость всех ненулевых гармоник динамической восприимчивости по сравнению с нулевой, необходимая малость может быть достигнута, например, в окрестности точки ферромагнитной неустойчивости при температурах порядка температуры Кюри, которая может оказаться и не высокой.

Приближение среднего поля получается при условии равенства нулю однопетлевых поправок к силовому оператору. Формально оно соответствует случаю, когда восприимчивость локализованных электронов равна нулю. Полагая  $\bar{\chi}(0) = 0$  в уравнении (72) и рассматривая для нормальной компоненты силового оператора приближение Хаббард-I ( $P_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_n) = 1 - n_f/2$ ), проведем суммирование по мацубаровским частотам. Тогда уравнение для  $T_c$  можно представить в виде

$$1 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{|V_q|^2 \xi_q}{\left(\tilde{E}_q^+\right)^2 - \left(\tilde{E}_q^-\right)^2} \times \left[ \frac{\text{th}(\tilde{E}_q^+/2T_c)}{\tilde{E}_q^+} - \frac{\text{th}(\tilde{E}_q^-/2T_c)}{\tilde{E}_q^-} \right]. \tag{73}$$

Это уравнение с поправкой на двухзонность соответствует уравнению для  $T_c$  в  $t$ -модели в среднеполевом

приближении, когда процессы спин-флуктуационного рассеяния игнорируются. В этом легко убедиться, если учесть отмеченную выше эквивалентность диаграммных рядов для ФГ в модели Андерсона и рядов для ФГ в модели Хаббарда при  $U = \infty$ . Зависимость  $T_c(n_e)$ , рассчитанная в приближении среднего поля по формуле (73), показана на рис. 4 штриховой линией.

Сравнение кривых, представленных на рис. 4, позволяет увидеть, в какой мере учет процессов спин-флуктуационного рассеяния сказывается на области реализации сверхпроводящей фазы. Так, например, сравнение штриховой и штрихпунктирной линий показывает, что включение процессов рассеяния даже в статическом приближении приводит к существенному уменьшению значений критической температуры по сравнению со значениями этой величины, найденными в среднеполевом приближении. При этом значения критических концентраций  $n_{cr}$  для данных кривых совпадают. Это связано с тем, что в статическом приближении при  $T \rightarrow 0$  вклады в компоненты силового оператора обращаются в нуль.

Иная ситуация имеет место при учете динамических спин-флуктуационных процессов рассеяния. В этом случае суммы по мацубаровским частотам должны рассчитываться точно. В области самых низких температур, как известно, такое суммирование заменяется интегрированием ( $T \sum_m \rightarrow \int d\omega/2\pi$ ) и, как показывают расчеты, вклады компонент силового оператора остаются конечными даже при  $T \rightarrow 0$ . Это различие и приводит к заметной сдвигке границы сверхпроводящей фазы, как только динамические эффекты спиновых флуктуаций принимаются во внимание. Из рис. 4 видно, что кроме отмеченной сдвигки динамические спиновые флуктуации приводят к дополнительному понижению критической температуры. Величина этого понижения зависит от конкретных параметров системы, однако выявленная тенденция сохраняется во всех случаях.

### 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в статье результаты показывают, что обнаруженная в ТФ-скуттерудите  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$  сверхпроводящая фаза с  $s$ -типом симметрии параметра порядка [8] может быть описана в рамках периодической модели Андерсона с привлечением электронного механизма куперовской неустойчивости. Такой сценарий электронного спаривания качественно аналогичен сценарию формирования высо-

котемпературной сверхпроводимости, предложенному в работе [25] для модели Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций. Вместе с тем, специфические особенности РАМ привели к ряду модификаций. Так, например, из-за смешивания зонных и локализованных состояний все ядра интегральных уравнений самосогласования стали выражаться через характеристики двухзонного миксонного спектра фермиевских возбуждений. При этом оказалось, что сверхпроводящая фаза реализуется только при тех концентрациях электронов, при которых появляются заполненные квазичастичные состояния верхней миксонной зоны.

Выход за рамки приближения среднего поля привел к возникновению бесконечной системы интегральных уравнений для сверхпроводящей фазы. Решения этих уравнений описывают поведение нормальных и аномальных компонент массового и силового операторов. Следует подчеркнуть, что влияние компонент силового оператора не ограничивается только ренормировкой спектра элементарных возбуждений. Как видно из полученных в работе представлений для ФГ, этот оператор существенно сказывается на величине спектральной интенсивности, а также на значениях нормальных и аномальных средних. Важно и то, что посредством силового оператора реализуется учет процессов спиновых флуктуаций. Практическая ценность включения в теорию этих процессов связана с понижением критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу до значений, близких к экспериментальным.

В данной работе были исследованы условия возникновения сверхпроводящего состояния с  $s$ -типом симметрии параметра порядка в режиме сильных электронных корреляций и при развитых спиновых флуктуациях. Как отмечалось выше, такая ситуация реализуется в ТФ-скуттерудитах  $\text{LaFe}_4\text{P}_{12}$  [8] и  $\text{PrRu}_4\text{As}_{12}$  [9]. Вместе с тем, традиционные ТФ-сверхпроводники характеризуются анизотропным параметром порядка. Разработанный в работе подход применим и для описания сверхпроводящей фазы с  $d$ -типом симметрии параметра порядка. При этом учет спин-флуктуационных процессов рассеяния будет по-прежнему реализовываться посредством силового оператора. Однако для получения механизма куперовской неустойчивости, приводящего к  $d$ -типу спаривания, предварительно необходимо построить низкоэнергетический эффективный гамильтониан РАМ в пределе большого, но конечного кулоновского отталкивания  $U$ . Такой гамильтониан в режиме смешанной валентности получен в работе [34].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-00226), Программы ОФН РАН «Сильнокоррелированные электроны в полупроводниках, сверхпроводниках и магнитных материалах», Интеграционного проекта № 3.4 СО РАН.

## ЛИТЕРАТУРА

1. F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl et al., Phys. Rev. Lett. **43**, 1892 (1979).
2. U. Rauchshwalbe, F. Steglich, G. R. Stewart et al., Europhys. Lett. **3**, 751 (1987).
3. K. Miyake, S. Schmitt-Rink, and C. M. Varma, Phys. Rev. B **34**, 6554 (1986).
4. D. J. Scalapino, E. Loh, Jr., and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **34**, 8190 (1986).
5. Y. Onuki, R. Settai, K. Sugiyama et al., J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 769 (2004).
6. R. H. Heffner and M. R. Norman, arXiv:cond-mat/9506043.
7. M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
8. Y. Nakai, K. Ishida, D. Kikuchi et al., J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 3370 (2005).
9. T. Namiki, Y. Aoki, H. Sato et al., J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 093704 (2007).
10. V. Barzykin and L. P. Gor'kov, Phys. Rev. B **71**, 214521 (2005).
11. R. Joynt and L. Taillefer, Rev. Mod. Phys. **74**, 235 (2002).
12. Y. Nisikawa, H. Ikeda, and K. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1140 (2002).
13. H. Ikeda, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1126 (2002).
14. H. Fukazawa and K. Yamada, arXiv:cond-mat/0603039.
15. N. E. Bickers, Rev. Mod. Phys. **59**, 845 (1987).
16. T. T. Rice and K. M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **55**, 995 (1985).
17. C. M. Varma, W. Weber, and L. J. Randall, Phys. Rev. B **33**, 1015 (1986).
18. Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, УФН **178**, 25 (2008).
19. P. Coleman, Phys. Rev. B **29**, 3035 (1984).

20. M. Lavagna, A. J. Millis, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 266 (1987).
21. A. Houghton, N. Read, and H. Won, *Phys. Rev. B* **37**, 3782 (1988).
22. P. D. Sacramento, arXiv:cond-mat/0310018.
23. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
24. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Физматлит, Москва (1994).
25. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, *Письма в ЖЭТФ* **46**, 140 (1987).
26. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
27. Ю. А. Изюмов, Д. С. Алексеев, *ФММ* **97**, 18 (2004).
28. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильнокоррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
29. Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма*, Наука, Москва (1974).
30. Ю. А. Изюмов, Н. И. Чащин, Д. С. Алексеев, *Теория сильнокоррелированных систем. Метод производящего функционала*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва-Ижевск (2006).
31. V. Yu. Irkhin and A. V. Zarubin, *Phys. Rev. B* **70**, 035116 (2004).
32. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *Письма в ЖЭТФ* **84**, 251 (2006).
33. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **125**, 891 (2004).
34. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *ТМФ* **157**, вып. 2 (2008).