

Kondo 晶格中铁磁超导电性的理论研究

冯 世 平

(北京师范大学低能核物理研究所)

1986年3月27日收到

提 要

在 BCS 机制下,我们采用 Anderson 模型哈密顿量,讨论了 Kondo 型重费密子超导体的铁磁态和超导态能否共存的问题。结果表明共存态是不稳定的。

一、引 言

通常超导电性和铁磁性总是互相排斥的。对于一般的超导体,其铁磁态和超导态能否共存的问题过去曾有过许多的研究^[1,2],但结论总是否定的。最近,实验上发现 CeCu_2Si_2 及 UBi_3 等是 Kondo 系统^[3-10]。由于它们的超导临界温度 T_c 很低,且具有大的有效质量 m^* 和临界磁场 H_c ,因而称之为重费密子超导系统。理论和实验都证实了这些系统中的 f 电子对于其超导电性及其它低温反常现象起了决定性的作用^[11-14]。同时,我们也知道 f 电子的定域性很强,所以它对系统的磁性也有很大的贡献。那么,对于这类系统,其超导态和铁磁态能否共存? 这是我们十分感兴趣的问题。Tachiki 等人采用 Anderson 模型哈密顿量系统地研究了这类 Kondo 型的重费密超导系统^[15,16],所得到的结果有些与实验上定性相符。我们曾采用 Anderson 模型哈密顿量解释了 CeCu_2Si_2 的超导临界温度随压力的变化^[17]。从上述这些研究中可以看到,Anderson 模型哈密顿量对于描述这类 Kondo 型的重费密子超导系统还是比较合适的。因此,本文将继续采用 Anderson 模型哈密顿量来研究重费密子超导系统中超导态与铁磁态能否共存的问题。

二、理 论

对于 f 电子起关键作用的 Kondo 型重费密子超导系统,我们采用周期性的双带带 Anderson 模型哈密顿量^[16]

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k\sigma} \varepsilon_{1k} c_{1k\sigma}^\dagger c_{1k\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{2k} c_{2k\sigma}^\dagger c_{2k\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{fk} f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \\ & + \sum_{k\sigma} v (c_{1k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger c_{1k\sigma}) + \sum_{k\sigma} v (c_{2k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger c_{2k\sigma}) \\ & + u \sum_i f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\downarrow}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\varepsilon_{1k} = \varepsilon_k - u, \varepsilon_{2k} = \varepsilon_k + u, \varepsilon_{fk} = u \varepsilon_k \ll 1. \quad (2)$$

为了讨论系统的铁磁性,对于上式哈密顿量中的 Hubbard 项采用平均场近似^[2]

$$H_H = \sum_{k\sigma} (-\sigma I_f) f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + NI_f^2/u, \quad (3)$$

$$I_f = um/2, \quad m = n_\uparrow - n_\downarrow, \quad (4)$$

$$n_\sigma = \frac{1}{N} \sum_k \langle f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \rangle. \quad (5)$$

在(3)式中,已经略去了一些不重要的常数项,将(3)式代入(1)式,得

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{1k} c_{1k\sigma}^\dagger c_{1k\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{2k} c_{2k\sigma}^\dagger c_{2k\sigma} + \sum_{k\sigma} (\varepsilon_{fk} - \sigma I_f) f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \\ + \sum_{k\sigma} v (c_{1k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger c_{1k\sigma}) + \sum_{k\sigma} v (c_{2k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger c_{2k\sigma}) + NI_f^2/u. \quad (6)$$

Tachiki 等人已经证明了对超导有贡献的是经过 s-f 杂化后的 f 电子^[15,16],因而采用运动方程方法很易得到(6)式哈密顿量对应的 f 电子的 Green 函数为

$$G_o^f(\mathbf{k}, \omega_n) = [i\omega_n - (\varepsilon_{fk} - \sigma I_f) - v^2(i\omega_n - \varepsilon_{1k\sigma})^{-1} - v^2(i\omega_n - \varepsilon_{2k\sigma})^{-1}]^{-1}. \quad (7)$$

对于小的 $|\omega_n|$, 采用文献[16]的方法可将上式 Green 函数近似写成

$$G_o^f(\mathbf{k}, \omega_n) = (1 + \beta)^{-1} \cdot \left[i\omega_n - h\varepsilon_k + \frac{\sigma}{1 + \beta} I_f \right]^{-1}, \quad (8)$$

$$\beta = 2v^2/a^2, \quad (9)$$

$$h = (\alpha + \beta)/(1 + \beta). \quad (10)$$

由于 $\alpha \ll 1, \beta \ll 1$, 因此准粒子有效质量 $m^* = m/h$ 将是很大的. 下面为讨论方便, 定义准粒子算符 η_k , 使得对应该算符的 Green 函数为

$$G_o^{\eta}(\mathbf{k}, \omega_n) = [i\omega_n - h\varepsilon_k + \sigma I_f/(1 + \beta)]^{-1}. \quad (11)$$

而 f_k 算符可由 η_k 展开而得^[16]

$$f_k = (1 + \beta)^{-\frac{1}{2}} \eta_k + o(\eta_k^\dagger \eta_{k'} \eta_{k+k'-k''}). \quad (12)$$

如果只保留最低阶项, 而略去高阶项, 则有

$$I_f = (1 + \beta)^{-1} I_{\eta}. \quad (13)$$

这样, 我们与(6)式相对应的就有新的准粒子的哈密顿量为

$$H_{\eta} = \sum_{k,\sigma} E_k(\sigma) \eta_{k\sigma}^\dagger \eta_{k\sigma} + \frac{N}{u(1 + \beta)^2} \cdot I_{\eta}^2, \quad (14)$$

$$E_k(\sigma) = h\varepsilon_k - \sigma I_{\eta}/(1 + \beta)^2. \quad (15)$$

为了讨论铁磁超导电性, 我们在上述哈密顿量上加上描述超导电性的项, 就构造一个有效的哈密顿量. 我们仍然在 BCS 的电-声子机制下来讨论问题, 那么这个有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = H_{\eta} + H_{\text{BCS}}, \quad (16)$$

$$H_{\text{BCS}} = -\lambda \sum_{k,k'} f_{k'\uparrow}^\dagger f_{k'\downarrow}^\dagger f_{-k\downarrow} f_{k\uparrow} \\ = -\lambda' \sum_{k,k'} \eta_{k'\uparrow}^\dagger \eta_{k'\downarrow}^\dagger \eta_{-k\downarrow} \eta_{k\uparrow}, \quad (17)$$

式中 $\lambda' = \lambda/(1 + \beta)^2$ 为经过重整化后的电-声子耦合参数. 对于 H_{BCS} , 仍然采用平均场近似, 可以得到

$$H_{\text{BCS}} = - \sum_k (\Delta_{\eta} \eta_{k\uparrow}^\dagger \eta_{-k\downarrow} + \Delta_{\eta} \eta_{k\downarrow}^\dagger \eta_{-k\uparrow}) + \Delta_{\eta}^2/\lambda', \quad (18a)$$

$$\Delta_\eta = \Delta_f / (1 + \beta). \quad (18b)$$

那么总的有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k,\sigma} E_k(\sigma) \eta_{k\sigma}^\dagger \eta_{k\sigma} + (NI_\eta^2 / [u(1 + \beta)^2]) + \Delta_\eta^2 / \lambda' \\ - \sum_k \Delta_\eta (\eta_{k\uparrow} \eta_{-k\downarrow} + \eta_{-k\uparrow}^\dagger \eta_{k\downarrow}^\dagger). \quad (19)$$

采用 Bogaliubov 变换, 上式可对角化成为^[2]

$$H_{\text{eff}} = \sum_k [E^+(k) \xi_1^\dagger(k) \xi_1(k) + E^-(k) \xi_2^\dagger(k) \xi_2(k) - E(k) \\ + \varepsilon(k)] + (\Delta_\eta^2 / \lambda') + NI_\eta^2 / [u(1 + \beta)^2], \quad (20)$$

式中

$$\varepsilon(k) = h\varepsilon_k, \quad E(k) = [\varepsilon^2(k) + \Delta_\eta^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (21)$$

$$E^+ = E(k) + I_\eta / (1 + \beta)^2, \quad E^- = E(k) - I_\eta / (1 + \beta)^2. \quad (22)$$

$\xi_1(k)$, $\xi_2(k)$ 为新的准粒子算符. 在知道能谱后, 就可求出系统的自由能表达式为

$$\Omega = -T \sum_k \{ \ln [1 + e^{-E^+/T}] + \ln [1 + e^{-E^-/T}] \} \\ - \sum_k [E(k) - \varepsilon(k)] + (\Delta_\eta^2 / \lambda') + NI_\eta^2 / [u(1 + \beta)^2]. \quad (23)$$

由

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \Delta_\eta} \right)_{I_\eta} = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial I_\eta} \right)_{\Delta_\eta} = 0,$$

可定出决定 I_η , Δ_η 的方程为

$$\Delta_\eta = \frac{\lambda'}{2} \sum_k [(1 - 2f(E^+)) + (1 - 2f(E^-))] \cdot \Delta_\eta / [2E(k)], \quad (24)$$

$$I_\eta = \frac{u}{2} \sum_k [f(E^-) - f(E^+)], \quad (25)$$

式中 $u = U/N$, $f(E)$ 为费密分布函数, (23)–(25) 式组成一组完整的自洽方程组. 对应于上述方程组有四组解. 1) 正常态, $I_\eta = \Delta_\eta = 0$; 2) 超导态, $I_\eta = 0$, $\Delta_\eta \neq 0$; 3) 铁磁态, $I_\eta \neq 0$, $\Delta_\eta = 0$; 4) 铁磁超导共存态 $I_\eta \neq 0$, $\Delta_\eta \neq 0$. 为了完成上述 (23)–(25) 式的求和, 可以利用下式替代求和成为积分:

$$\sum_k = \int N[\varepsilon(k)] d\varepsilon(k), \quad (26)$$

式中 $N[\varepsilon(k)]$ 为准粒子的态密度, 与文献[2]相同, 我们取为如下形式:

$$N[\varepsilon(k)] = N\rho(0)\phi[\varepsilon/B], \quad (27)$$

N 为原胞数, $\rho(0)$ 为费密面上的态密度, B 为准粒子的能带宽度, 而

$$\phi(x) = (1 - x^{2l})^n \quad n, l = \text{整数}$$

在对于 (24) 式超导能隙的积分中, 我们取其切断能在 Kondo 能量 ω_k 处.

三、数值结果与讨论

图 1 和图 2 分别为 $T_f < T_c$ 和 $T_f > T_c$ 两种情况下得到的 $(\Delta_f / (1 + \beta)) - T$, $(I_f /$

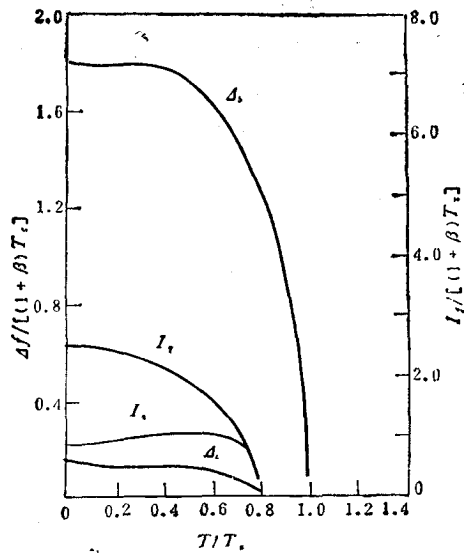


图 1

$$T_f = 0.8T_s; \phi(x) = (1-x^2)^3; \\ B = 20T_s; \omega_k = 10T_s$$

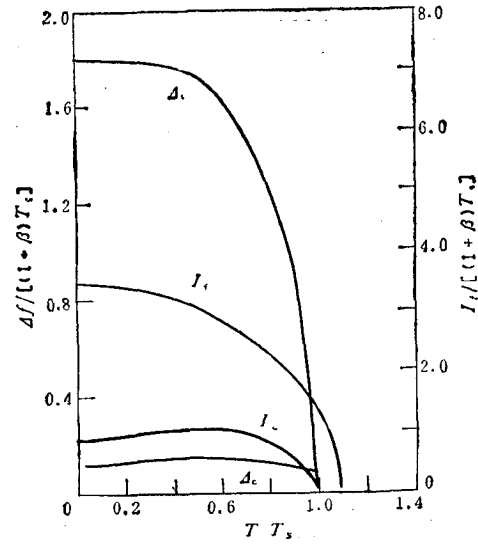


图 2

$$T_f = 1.1T_s; \phi(x) = 1-x^2; \\ B = 20T_s; \omega_k = 10T_s$$

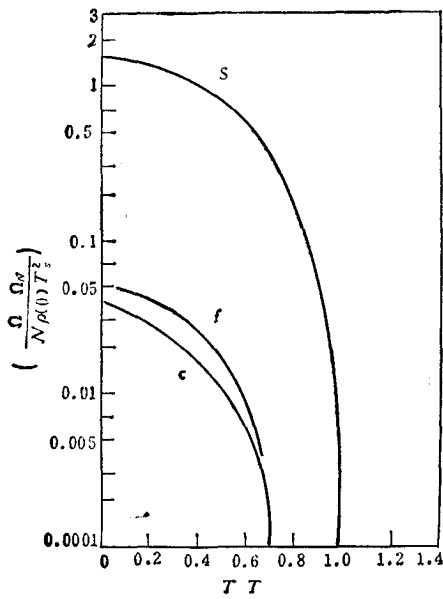


图 3

$$T_f = 0.8T_s; \phi(x) = (1-x^2)^3; \\ B = 20T_s; \omega_k = 10T_s$$

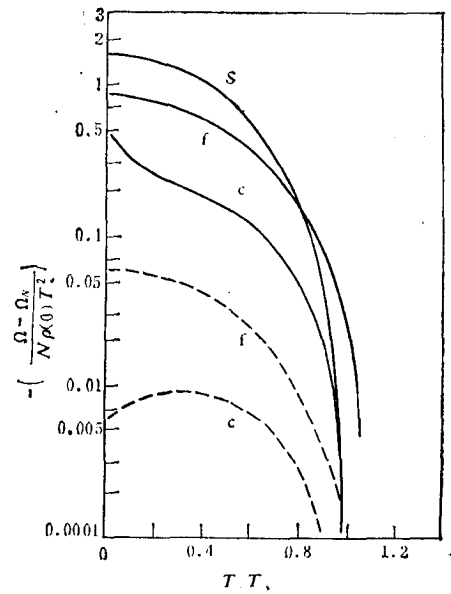


图 4

$$T_f = 1.1T_s; \phi(x) = 1-x^2; \\ \text{— } B = 5T_s, \omega_k < 5T_s; \\ \text{--- } B = 20T_s, \omega_k = 10T_s$$

$(1+\beta))$ - T 的变化曲线。图 3 与图 4 是在和图 1 与图 2 同样参数下得到的关于各个状态自由能随温度的变化曲线。从这些结果中,我们发现对于 Kondo 型的重费密子超导系统,铁磁与超导共存的状态总是不稳定的,而超导态和铁磁态在各个温度点哪个更稳定则视其参数而定。从(23)一(25)式可以看出,对于不同的 β (反映 f 电子与 s 电子杂化的参

数),在其它带参数相同时,只要采用我们在图1—4的定标形式,那么结果总是相同的. 它的物理本质就是:在我们的 Anderson 模型哈密顿量下, s-f 杂化项并不影响 Kondo 型重费密子超导系统状态的稳定性,而仅仅是重费密子系统中电子质量很重的原因之一^[16]. 另外,从 (23)—(25) 式也发现,当采用我们在图 1—4 的定标形式后, (23)—(25) 式与文献[2]中对应的公式完全相同(因而我们直接将文献[2]中的数值计算移植了过来),这说明在 BCS 机制和 Anderson 模型下, Kondo 型的重费密子超导系统的各个状态的稳定性问题完全与普通超导体的类似,因而是不会出现 Kondo 型的重费密子铁磁超导体的.

作者感谢黄祖洽教授的指导.

参 考 文 献

- [1] H. Nakanishi *et al.*, *Solid State Commun.*, **43**(1982), 898.
- [2] X. L. Lei *et al.*, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 2483.
- [3] F. Steglich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 1892.
- [4] W. Lieke *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **53**(1982), 2111.
- [5] U. Rauchschwalbe *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **49**(1982), 1448.
- [6] W. Assmus *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 469.
- [7] M. Ishikawa *et al.*, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3092.
- [8] H. R. Ott *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1595.
- [9] J. L. Smith *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **55**(1984), 1996.
- [10] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.*, **56**(1984), 755.
- [11] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 1553.
- [12] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 4000.
- [13] H. Razafimandimby *et al.*, *Z. Phys.*, **B54**(1984), 111.
- [14] O. T. Valls *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1497.
- [15] M. Tachiki *et al.*, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 2497.
- [16] M. Tachiki *et al.*, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 228.
- [17] 冯世平, 物理学报, **35**(1986), 687.

THEORETICAL INVESTIGATION OF KONDO TYPE FERROMAGNETIC SUPERCONDUCTIVITY

FENG SHI-PING

(Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University)

ABSTRACT

Assuming the BCS mechanism, we use Anderson model Hamiltonian to analyse the problem of coexistent ferromagnetic and superconducting state for Kondo type heavy fermion superconductors. Results show that the coexistent state is unstable.