

重费米子材料 CeCoIn₅ 超导态的唯象理论

李宇^{1,2}, 杨义峰^{1,2,3*}

1. 中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100190;

2. 中国科学院大学, 北京 100049;

3. 量子物质科学协同创新中心, 北京 100190

* 联系人, E-mail: yifeng@iphy.ac.cn

2017-06-22 收稿, 2017-08-02 修回, 2017-08-04 接受, 2017-11-16 网络版发表

国家优秀青年科学基金(11522435)和国家重点研发计划(2017YFA0303103)资助

摘要 重费米子超导体是最早发现的非常规超导体, 具有丰富的超导量子现象. 理解重费米子超导配对的微观起源能够启发非常规超导的机理研究和新型超导体的实验探索. 本文简要介绍了近年来在重费米子超导实验和理论上的最新进展, 利用量子临界自旋涨落的唯象模型, 结合Eliashberg理论计算了CeCoIn₅的超导性质, 得到了具有 $d_{x^2-y^2}$ 波对称性的超导能隙, 符合实验结果. 在此基础上提出了计算超导转变温度 T_c 的简化公式, 结合二流体理论解释了CeCoIn₅和CeRhIn₅中 T_c 随压力的演化. 这一结果为发展重费米子超导的唯象理论提供了新的思路.

关键词 重费米子超导, 二流体理论, Eliashberg 理论, 配对对称性

重费米子材料是一类特殊的强关联电子材料. 在一些包含了f电子元素(如Ce, Yb, U, Pr等镧系或锕系元素)的金属化合物中, 较为局域的f电子自旋(或局域磁矩)与导带电子自旋之间存在较强的反铁磁交换作用(也称Kondo耦合), 在低温下导致相干的自旋屏蔽效应, 产生巡游的复合准粒子, 其有效质量可以达到自由电子质量的上百倍. 这类材料被称为重电子或重费米子材料^[1]. 这些由晶格上局域f自旋与导带电子复合形成的准粒子既具有导带电子的巡游性, 又具有f电子的轨道特征, 反映了局域f自旋自由度由于量子多体效应而产生的巡游重电子行为. f电子的这种局域与巡游的双重属性导致了丰富的量子物态, 如反铁磁、非常规超导、非费米液体等, 以及这些态之间的共存与竞争.

1979年, 德国科学家Steglich等人^[2]在CeCu₂Si₂中观测到了超导电性, 超导转变温度为0.5 K, 在 T_c 附近的比热系数 $\gamma \approx 1 \text{ J}/(\text{mol K}^2)$, 远大于普通金属的

比热系数(如铜约为 $0.7 \text{ mJ}/(\text{mol K}^2)$), 表明超导源于重电子配对; 同时 T_c 、费米温度 T_F 和德拜温度 Θ 之间具有近似比例关系 $T_c/T_F \approx T_F/\Theta \approx 0.05$, 与常规超导体($T_F \gg \Theta \gg T_c$)有显著不同, 不能用基于电子-声子耦合的Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS)理论描述^[3], 是一种非常规的超导配对.

重费米子超导是最早发现的非常规超导, 比铜氧化物高温超导的发现要早7年^[4]. 迄今为止, 实验已发现有40多种重费米子超导体, 其能隙结构呈现多种不同的对称性(s波、p波、d波、f波等), 并且可能具有不同的超导配对机制^[5]. 重费米子的特征能量尺度较低, 一般只有几个meV量级^[1,6], 因而超导转变温度也相对较低, 最低只有2 mK (YbRh₂Si₂^[7]), 最高约18.5 K (PuCoGa₅^[8]), 但是重电子却表现出较高的参与度(即较大的 T_c/T_F), 这一现象对探索设计新的高温超导材料可能会有重要的参考价值. 最近十多年, 随着实验技术水平的提高和新型实验手段的应

引用格式: 李宇, 杨义峰. 重费米子材料 CeCoIn₅ 超导态的唯象理论. 科学通报, 2017, 62: 4068–4076

Li Y, Yang Y F. A phenomenological theory of heavy fermion superconductivity in CeCoIn₅ (in Chinese). Chin Sci Bull, 2017, 62: 4068–4076, doi: 10.1360/N972017-00698

用,对重费米子超导体的实验探索和理论研究都取得了许多新的进展,为深入理解非常规超导的微观机理提供了丰富素材。

1 重费米子超导概况

超导配对的对称性和微观机理是非常规超导研究中的重要课题。不同于一般常规超导体中电子-声子耦合机制导致的s波配对,重费米子超导一般具有非s波的配对对称性,如CeCoIn₅超导具有d_{x²-y²}波对称性^[9]。大部分重费米子超导的能隙具有点/线节点(point/line node),其特征热力学量在T_c以下满足幂数温度依赖行为^[10]。最早发现的重费米子超导体CeCu₂Si₂中^[2],早期测量发现T_c以下比热C ∝ T^[11,12],核磁共振自旋晶格弛豫率1/T₁ ∝ T³^[13],表明其超导能隙具有线节点,符合d波超导的预期。但是最近有一些新的实验给出了不同的结论,如更低温度下的测量发现,比热具有指数型温度依赖行为,同时磁场下的转角比热系数C/T ∝ H,表明超导是无节点的^[14],这一结论在最近的其他实验^[15,16]中也得到证实。类似地,早期认为存在节点的UBe₁₃在最近的实验中也受到质疑^[17]。在UPt₃(B-相超导)和URu₂Si₂中,最新的Kerr效应实验发现,其超导态破缺了时间反演对称性^[18,19],具体机制目前尚不清楚。这些新的实验结果要求我们重新认识重费米子超导配对的微观机理。

从物理上看,重费米子超导具有以下3个方面的特点。

(1) 重费米子超导源自重电子的配对,因此需要妥善处理强关联效应及其导致的f电子的局域和巡游双重属性(二流体行为)。一些近似的数值方法,包括局域密度近似(local density approximation, LDA)+X(X=库仑相互作用U^[20,21]、动力学平均场理论^[22]、重整化能带理论^[23]等)能够近似给出重电子的能带结构,但是无法正确描述f电子的二流体行为及其在外场调控下的费米面变化,需要谨慎利用。

(2) 重费米子超导往往出现在竞争序附近,两种序的共存和竞争会导致许多新奇量子现象,如CeCoIn₅在强磁场下诱导的Q-相具有配对密度波的特征^[24],PrX₂Al₂₀(X=Ti, V)在低温下具有四极矩/八极矩竞争序行为^[25],URu₂Si₂的超导出现在所谓“隐藏序”内部^[26]等。利用掺杂、压力、磁场等手段进行调控,探索超导态与竞争序之间的关系,是重费米子超导

研究的一个主要方向^[15]。

重费米子超导与竞争序的伴生行为,产生了一种一般性的认识,即超导源自竞争序边界的量子临界涨落,如反铁磁/铁磁自旋涨落^[27]、价态涨落^[28]、电四极矩涨落^[29]等,文献中通常用随机相近似(random phase approximation, RPA)^[21,30]、涨落交换(fluctuation-exchange, FLEX)近似^[31]等方法描述。本文将引入量子临界涨落的唯象描述,用来研究重电子的超导配对。

(3) f电子的多轨道/多能带特征对重费米子超导的配对对称性具有重要影响。对CeCu₂Si₂和Pu-115系列材料(PuMX₅, M=Co, Rh; X=Ga, In)的计算表明,考虑到多能带效应,超导可能为具有节点的s波对称性,而非之前普遍认为的d波对称性^[21,30]。虽然这些结果还存在争议,但对理解f电子的轨道特征对重费米子超导的影响提供了有价值的参考。

总之,由于强关联效应、晶体结构、轨道构型等多方面的影响,重费米子超导及其竞争序呈现出丰富多样的物理,为理解超导的微观特性提供了多元的视角,同时亟待理论上的统一认识。20世纪90年代Pines课题组^[32-37]发展了近反铁磁费米液体唯象理论,采用唯象的磁化率公式,很好地解释了铜氧化物超导体的正常态磁性涨落和超导转变温度等行为。这一方法也被应用于重费米子超导的研究,但主要针对简化的单带格点模型,难以与实际材料进行比较^[38]。近年来,随着实验数据的积累,开始有人利用能带计算结合RPA磁化率研究具体材料中的超导性质,给出了一些不同以往模型计算的新结果,但目前仍存在很大争议^[21,30]。我们认为,RPA无法正确描述重费米子体系中的量子临界涨落,需要能够结合两种方法的优势:一方面采用唯象的磁化率描述系统的磁性涨落(配对力),更好地处理强关联体系的量子临界性;另一方面采用实验提取或电子结构计算得到的能带,更好地处理实际材料中的能带和费米面性质。本文将以CeCoIn₅为例,尝试从唯象的角度建立重费米子超导的理论模型。我们得到了和实验一致的结果,从原则上支持了上述唯象方法,为认识重费米子超导问题提供一个新的可能方案。

2 重费米子超导相图

为了描述重费米子超导,必须首先明确产生超导的强关联电子态的特征。Yang等人^[6,39,40]整理总结

了众多材料的普适实验规律,发展了唯象的重费米子二流体理论框架,提出了如图1所示的相图.在相干温度 T^* 之上,f电子表现为近似孤立的局域磁矩,与导带电子之间存在较弱的局域自旋耦合或磁性散射;在 T^* 以下,晶格上的f自旋在Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida(RKKY)相互作用下出现较强的磁性关联^[41~43],同时与导带电子发生集体杂化,部分变得巡游,产生了巡游重电子液体(也称为Kondo液体),部分仍呈现局域性,形成自旋液体,整个体系可以用两种近似独立的共存流体描述^[6].在低温下,若杂化较弱,自旋液体占主导,磁不稳定性有可能导致局域的磁性长程序,与少量的Kondo液体共存;若杂化较强,f电子完全杂化,会全部形成巡游重电子液体,产生重费米液体态;两种量子态中间会发生量子相变,强烈的量子临界涨落会诱导巡游重电子配对,产生非常规的重费米子超导态.

这一简单图像成功解释了众多重费米子实验中发现的重电子普适标度行为,刻画了低温下重费米子态的温度演化^[44].在二流体理论中,超导源自巡游重电子感受到的局域反铁磁序的量子临界涨落,两者都起源于f电子,这种二重性反映了反铁磁自旋关联与超导之间的复杂关系,是理解重费米子超导的关键^[45,46].

3 CeCoIn₅的强耦合理论计算

首先以CeCoIn₅为例,基于以上考虑,结合强耦合Eliashberg理论,尝试构建唯象的重费米子超导模型.

量子临界涨落诱导的巡游重电子之间的配对力可以写为^[35,47]

$$V_{\text{int}} = -g^2 \chi(\mathbf{r}, t) \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}', \quad (1)$$

其中, g 为准粒子和自旋涨落之间的耦合强度, $\chi(\mathbf{r}, t)$ 为动力学自旋涨落谱, $\mathbf{s}$ 表示巡游重电子的自旋密度.

为了刻画反铁磁量子临界涨落,利用Millis, Monien和Pines^[32]提出的唯象公式(简称为MMP磁化率)

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0}{1 + \xi^2 (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - i\omega/\omega_{\text{sf}}}, \quad (2)$$

其中, χ_0 为 $\mathbf{Q}$ 处的静态磁化率, $\mathbf{Q}$, ξ , ω_{sf} 分别代表反铁磁涨落的特征波矢、关联长度和特征能标,其数值可以从 neutron scattering 或核磁共振(nuclear magnetic resonance, NMR)实验中提取.这一唯象磁化率公式较好地描述了铜氧化物和一些重费米子材料中正常态的

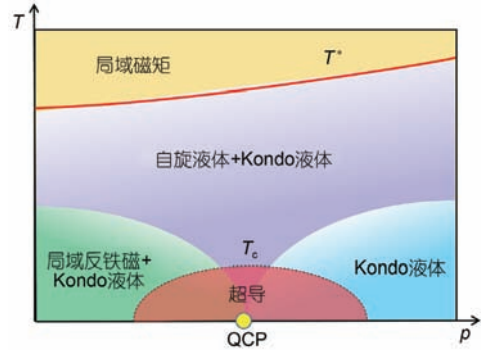


图1 (网络版彩色)重费米子超导体的二流体相图,其中QCP表示量子临界点

Figure 1 (Color online) Schematic plot of the two-fluid phase diagram for heavy fermion superconductors. QCP denotes the quantum critical point

磁性量子临界涨落^[32,38].

在CeCoIn₅中,结合中子散射实验得到的自旋涨落信息^[48],可以得到MMP唯象磁化率的实验参数为:自旋涨落特征能量 $\omega_{\text{sf}} \approx 0.3 \text{ meV}$,反铁磁关联长度 $\xi \approx 9.6 \text{ \AA}$ (大约为晶格常数 $a = 4.62 \text{ \AA}$ 的2倍),反铁磁波矢 $\mathbf{Q}$ 为 (π, π) .

在Nambu-Gor'kov表象下,可以推导出超导的Eliashberg方程组^[38]

$$i\omega_n [1 - Z(\mathbf{k}, i\omega_n)] = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}', i\omega_m} \frac{i\omega_m Z(\mathbf{k}', i\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\mathbf{k}', i\omega_m) + E_k^2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (i\omega_n - i\omega_m), \quad (3)$$

$$Z(\mathbf{k}, i\omega_n) \Delta(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}', i\omega_m} \frac{\Delta(\mathbf{k}', i\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\mathbf{k}', i\omega_m) + E_k^2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (i\omega_n - i\omega_m), \quad (4)$$

其中, $Z(\mathbf{k}, i\omega_n)$ 和 $\Delta(\mathbf{k}, i\omega_n)$ 分别表示准粒子重整化函数和超导能隙函数

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (i\omega_n - i\omega_m) = g_{\text{eff}}^2 \chi(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i\omega_n - i\omega_m),$$

其中, $g_{\text{eff}}^2 = 3g^2/4$ 为磁性量子涨落诱导的自旋单态的有效配对相互作用, $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$ 为超导态内准粒子的色散关系, ξ_k 为正常态的色散关系.

进而利用扫描隧道显微镜和准粒子干涉技术实验的数据,正常态的能带色散关系可用如下公式拟合:

$$\xi_k^{\pm} = \frac{\epsilon_k^c + \epsilon_k^f}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_k^c - \epsilon_k^f}{2} \right)^2 + V_k^2}, \quad (5)$$

其中, ϵ_k^c 和 ϵ_k^f 分别为导带电子和f电子的色散关系, V_k 表示各向异性的杂化函数,具体表达式及拟合参

数见文献[9]。图2给出了两条杂化能带的费米面结构及费米速度分布的示意图,可以看出,图2(a)能带的费米速度远小于图2(b)能带。考虑到超导主要源自重电子配对,为讨论方便,这里只考虑图2(a)中的“重”电子能带(对应(5)式中 $\xi_k = \xi_k^+$)。

基于以上结果,可以通过数值求解超导对称性和超导转变温度。

3.1 超导对称性(弱耦合近似)

频率依赖性一般对超导能隙结构的动量分布影响不大,为简单起见,首先考虑弱耦合情形,取

$$Z(\mathbf{k}, i\omega_n) = 1, \psi_k \approx \Delta(\mathbf{k}, i\pi T),$$

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(i\omega_n - i\omega_m) = V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(0) = V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}.$$

在 $T \rightarrow T_c$ 时, $\psi_k \rightarrow 0, E_k \rightarrow |\xi_k|$, 可以对Eliashberg方程进行线性化处理, 进而对垂直费米面方向作能量积分, 将动量求和限制在费米面附近, 并对频率进行求和, 得到如下本征值方程形式

$$\lambda \psi_k = - \oint_{FS} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \frac{V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}}{v_{\mathbf{k}'}} \psi_{\mathbf{k}'}, \quad (6)$$

其中, $v_{\mathbf{k}_F}$ 为动量依赖的费米速度, λ 为等式右边本征矩阵的本征值。在给定相互作用矩阵的情况下, 最大本征值对应的本征矢量反映了超导能隙的对称性结构^[49]。在弱耦合近似下, 以上线性化的能隙方程不含

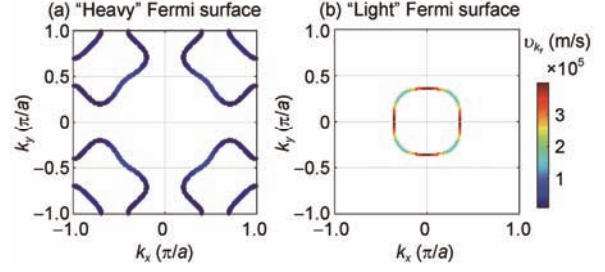


图2 (网络版彩色)CeCoIn₅的费米面结构。(a)“重”电子费米面;(b)“轻”电子费米面。 $v_{\mathbf{k}_F}$ 表示费米速度

Figure 2 (Color online) Fermi surface structures of CeCoIn₅. (a) The “heavy” electron Fermi surface; (b) the “light” electron Fermi surface. $v_{\mathbf{k}_F}$ represents the Fermi velocity

温度依赖性。

取参数 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0 = 200 \text{ (meV)}^2$ 进行计算。结果表明, 最大本征值对应 $d_{x^2-y^2}$ 波, 符合实验测量结果。图3(a)~(d)展示了本征值最大的4个解对应的超导能隙在费米面上的分布。在 $d_{x^2-y^2}$ 波情形下, 费米面上通过 $\mathbf{Q}$ 矢量连接的不同区域具有符号相反的 ψ_k , 可以解释中子散射实验观测到的自旋共振峰^[48]。

进而研究了超导能隙的对称性随化学势 ($\xi_k \rightarrow \xi_k + \delta\mu$) 的变化。如图3(e)所示, 在 $-1.27 \text{ meV} < \delta\mu < 2 \text{ meV}$ 时, $d_{x^2-y^2}$ 波(B_{1g} 表示)始终占主导; 而当 $\delta\mu < -1.27 \text{ meV}$ 时, 各向异性的s波(A_{1g} 表示)开始

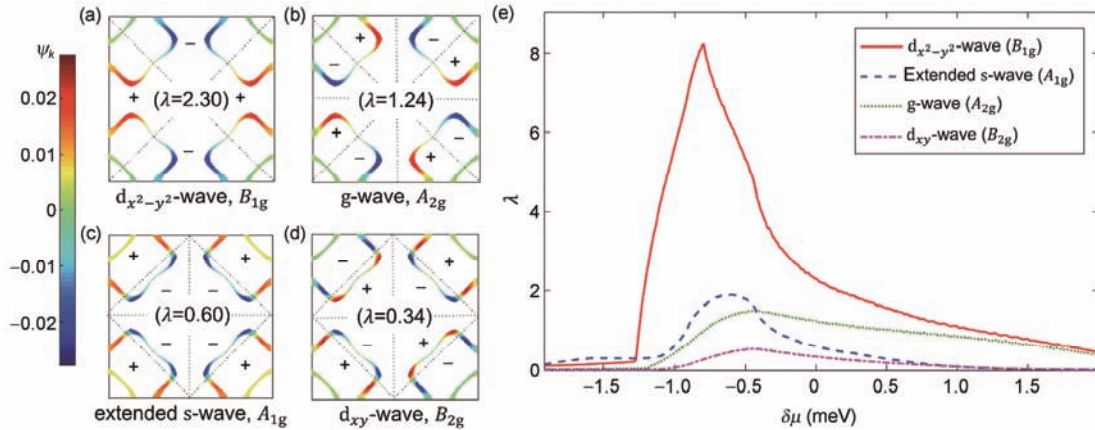


图3 (网络版彩色)弱耦合近似下CeCoIn₅超导能隙结构及本征值 λ 随化学势的变化。(a)~(d) $\delta\mu=0$ 时, 本征值 λ 最大的4个解对应的超导能隙结构 ψ_k 在费米面上的分布, “+”“−”号反映能隙分布的符号变化; (e) 4个不同表示下最大 λ 解随化学势改变的演化, 其中 $A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}$ 为 D_{4h} 点群下的对称性表示

Figure 3 (Color online) Superconducting gap structures of CeCoIn₅ and the eigenvalues λ as a function of the chemical potential in the weak-coupling calculations. (a)~(d) Gap structures (ψ_k) of the largest 4 eigenvalues at $\delta\mu=0$. The symbol “+” “−” reflect the signs of the gap structure; (e) variation of the largest λ as a function of the chemical potential for 4 different symmetry representations ($A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}$) of the point group D_{4h}

占主导. $d_{x^2-y^2}$ 波解在 $\delta\mu < -1.27$ meV 时存在明显的转折, 过渡到同属 B_{1g} 表示的另一本征解. 在 $\delta\mu < -0.79$ meV 附近, $d_{x^2-y^2}$ 波表现出尖锐的峰值结构, 这是由于费米面拓扑结构在此处发生突变 (Lifshitz 相变). 在 $\delta\mu$ 接近 2 meV 时, $d_{x^2-y^2}$ 波和 g 波近似简并.

3.2 超导转变温度 T_c (强耦合近似)

基于弱耦合情形得到的 $d_{x^2-y^2}$ 波能隙的动量分布结构, 可以进一步约化强耦合框架下的线性化 Eliashberg 方程组, 对超导转变温度进行更精细的计算. 假设 $\Delta(\mathbf{k}, i\omega_n) = \psi_k \tilde{\Delta}(i\omega_n)$, 为了保证本征矩阵的对称性 (或厄米性), 在方程 (4) 两边同时乘上归一化的 ψ_k , 然后积分掉动量 (只考虑费米面及其附近的点), 可以得到如下频率依赖的本征能隙方程

$$\sum_{i\omega_m} \left[K(i\omega_n - i\omega_m) - \frac{\tilde{Z}(i\omega_n)|\omega_n|}{\pi T} \delta_{m,n} \right] \frac{\tilde{\Delta}(i\omega_m)}{|\omega_m|} = 0, \quad (7)$$

其中,

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(i\omega_n) &= \oint_{FS} \frac{d\mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2 v_{k_F}} Z(\mathbf{k}, i\omega_n) \psi_k^2 / \oint_{FS} \frac{d\mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2 v_{k_F}} \psi_k^2, \quad (8) \\ K(i\omega_n - i\omega_m) &= \frac{\oint_{FS} \frac{d\mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2 v_{k_F}} \oint_{FS} \frac{d\mathbf{k}'_{\parallel}}{(2\pi)^2 v_{k'_F}} V_{k,k'}(i\omega_n - i\omega_m) \psi_k \psi_{k'}}{\oint_{FS} \frac{d\mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2 v_{k_F}} \psi_k^2}. \quad (9) \end{aligned}$$

其中, 分母上的 $\oint_{FS} \frac{d\mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2 v_{k_F}} \psi_k^2$ 是为了消除 ψ_k 的量纲的影响. 通过对角化 (7) 式中的本征矩阵, 可以求解本征值 λ' 随温度的演化, 当最大本征值演化到 0 时即对应超导转变温度 T_c .

图 4 给出了 λ' 随温度演化的计算结果. 从图 4(a) 可以看到, 各个本征值随温度的演化, 在高温时都趋于负常数. 最大本征值 $\lambda'_{\max}$ 具有明显的温度依赖性, 在 $T \rightarrow 0$ 时趋于发散. 图 4(b) 给出了不同 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 值下 $\lambda'_{\max}$ 随温度变化的曲线. 可以看到, 随着 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 值的增大, $\lambda'_{\max}(T)$ 的零点沿横轴方向右移, 反映出超导转变温度 T_c 的升高.

进一步分析了 ω_{sf} 和 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 对 T_c 的影响, 结果如图 5(a) 和 (b) 所示. 在不同 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 取值下, T_c 随 ω_{sf} 表现出线性递增行为. 而在固定 ω_{sf} 时, T_c 随 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 呈现非

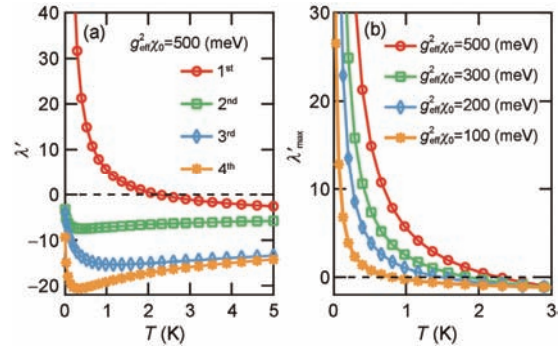


图 4 (网络版彩色) 强耦合近似下本征值随温度的演化. (a) $g_{\text{eff}}^2 \chi_0 = 500$ meV 时, λ' 最大的 4 个解随 T 的演化; (b) 最大本征值 $\lambda'_{\max}$ 在不同 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 取值下随温度的演化. 实线代表 $\lambda' = 0$

Figure 4 (Color online) Temperature evolution of the eigenvalues in the strong-coupling calculations. (a) T -evolution of the 4 leading solutions of λ' at $g_{\text{eff}}^2 \chi_0 = 500$ meV; (b) T -evolution of the largest eigenvalue $\lambda'_{\max}$ at different $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$. The solid lines denote $\lambda' = 0$

线性增长的依赖关系. 如图 5(c) 所示, 参考对铜氧化物超导的类似研究^[50], 发现 T_c 具有如下表达式:

$$T_c = \alpha T_{sf} \exp\left(-1/\beta g_{\text{eff}}' N_F\right), \quad (10)$$

其中, α , β 是拟合常数, $T_{sf} = \omega_{sf}(\xi/a)^2$ 为自旋涨落特征温度, N_F 为费米能处的态密度. 这一结果表明, T_c 正比于 T_{sf} , 与文献 [8] 的支撑材料中给出的许多非常规超导体的 T_{sf} - T_c 线性关系一致.

3.3 实验对比

以上理论推导原则上只在费米液体区成立. 为了与实验对比, 将其进行唯象的推广, 应用于所有存在重电子的区域, 包括非费米液体区和小费米面的反铁磁区 (如 CeRhIn₅). 同时考虑到特征温度 T^* 源自 f 电子之间的 RKKY 相互作用, 既是决定巡游重电子的基本能标, 也是决定反铁磁自旋涨落的基本能量尺度, 控制着超导转变温度的大小^[45,46]. 因此假设 g'_{eff} 由 T^* 决定, 而 T_{sf} 不随压力变化, 得到一个简单的类似 BCS 的 T_c 公式^[45,46]

$$\begin{aligned} T_c(p) &= 0.14 T_m^* \exp\left[-\frac{1}{N_F(p, T_c) V_{\text{eff}}(p)}\right] \\ &= 0.14 T_m^* \exp\left[-\frac{1}{\eta \kappa(p, T_c)}\right], \quad (11) \end{aligned}$$

其中, $N_F(p, T_c)$ 是 T_c 处的重电子态密度, 可以由二流体理论的预言得到, $V_{\text{eff}}(p) = \eta \kappa_B T^*(p)$ 为有效配对相互作用

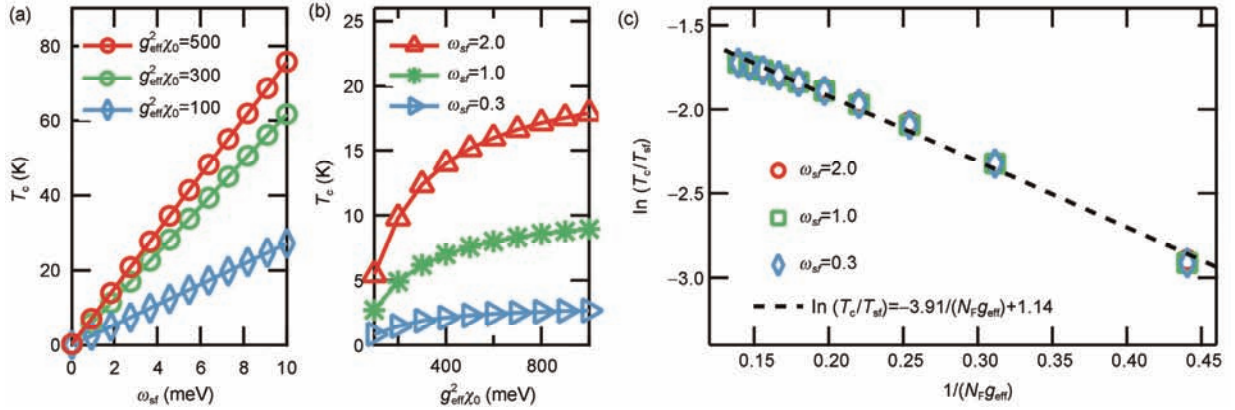


图5 (网络版彩色) T_c 对 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 和 ω_f 的依赖关系. (a) 在不同 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 值下 T_c 随 ω_f 的变化曲线; (b) 在不同 ω_f 下 T_c 随 $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ 的变化曲线; (c) T_c 随 $N_F g_{\text{eff}}$ 的标度关系

Figure 5 (Color online) Dependence of T_c on $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ and ω_f . (a) T_c as a function of ω_f for different $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$; (b) T_c as a function of $g_{\text{eff}}^2 \chi_0$ for different ω_f ; (c) a scaling relation of T_c versus of $N_F g_{\text{eff}}$

用, $\kappa(p, T_c) = N_F(p, T_c) k_B T^*(p)$ 是无量纲的特征耦合强度, η 是材料相关的拟合系数, T_m^* 为最大 T_c 时的相干温度, 可以通过实验测到, 系数 0.14 也源于实验拟合^[46].

在实际拟合中, $T^*(p)$ 可以通过实验测量得到, 重电子态密度具有如下普适温度依赖性^[39,40]:

$$N_F(T) \propto f_0 \left(1 - (T/T^*)\right)^{3/2} \left(1 + \ln(T^*/T)\right), \quad (12)$$

其中, f_0 刻画 f 电子与导带电子发生集体杂化的效率, 其数值随压强变化, 拟合时假设近似正比于 $T^*(p)$. 为了计算 $T_c(p)$ 处的重电子态密度, 需要将以上对数发散截断. 如图 6 所示, (1) 当 $T_c < T_L$ 时, f 电子在形成

超导时已经完全退局域化, $N_F(T)$ 在退局域化温度 T_L 处截断; (2) 当 $T_c < T_N$ 时, 由于磁性长程序的出现, f 电子在低温下可能发生重新局域化行为, 可以近似取 T_N 或长程反铁磁关联出现的温度 T_0 为截断温度; (3) 在中间区, $T_c > T_N$ 且 $T_c > T_L$, 取 T_c 本身为截断温度, 通过自洽求解得到态密度 $N_F(p, T_c)$. 具体计算细节参见文献[46].

图 6 给出了对 CeCoIn₅ 和 CeRhIn₅ 的压力-温度相图的 T_c 拟合结果, 由以上公式预言的 T_c 理论值与实验值能很好地符合. 其中 T_c 随压力的非单调行为源自两种不同的效应: 在低压区, 重电子随压力降低更加

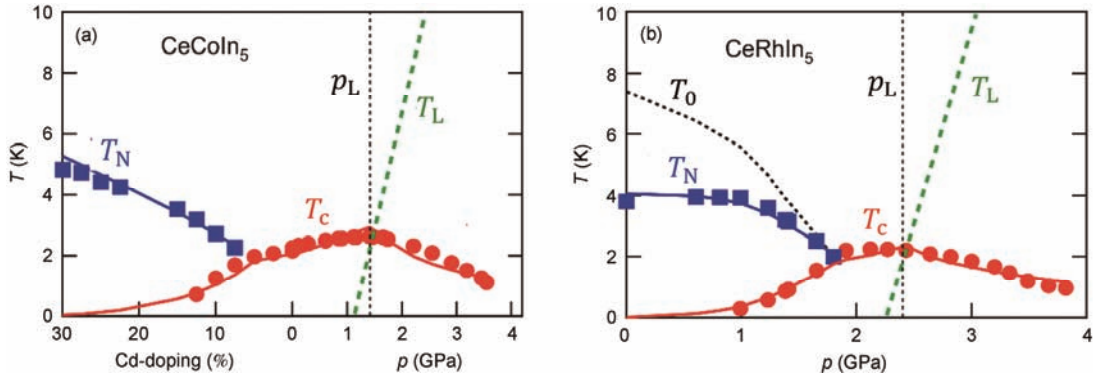


图6 (网络版彩色) 对 T_c 随压力和掺杂变化的实验拟合. (a) CeCoIn₅; (b) CeRhIn₅. 其中实线为理论预测值, 圆点标记为 T_c 的实验值, 方形标记为反铁磁转变温度 T_N 的实验值, T_0 为实验测得的长程反铁磁关联出现的温度, T_L 为二流体模型计算给出的 f 电子完全退局域化的温度, p_L 为 T_c 与 T_L 相等时的压强. 关于拟合的具体细节可参考文献[46]

Figure 6 (Color online) Comparison of experimental measured T_c as a function of pressure or doping. (a) CeCoIn₅; (b) CeRhIn₅. The solid lines denote the theoretical predictions, the points are the experimental data for T_c (circles) and the Néel temperature T_N (squares), T_0 marks the measured onset of the long-range antiferromagnetic correlations, T_L denotes the predicted temperature below which all f electrons become fully delocalized, and p_L is the pressure where T_c and T_L intersect^[46]

局域化,导致费米面附近的态密度降低,抑制超导;而在高压区,重电子随压力增加更加巡游,带宽增加,同样导致态密度降低,抑制超导;从而在量子临界点附近出现最大 T_c 。这一结果表明局域性和过度的巡游性均不利于超导配对。

4 结论与展望

简而言之,利用强耦合的Eliashberg方程研究了重费米子材料CeCoIn₅的超导性质,基于自旋涨落机制成功解释了其超导能隙的d波对称性,提出了超导转变温度 T_c 的简单公式,并结合重费米子二流体模型解释了 T_c 随压力的“拱顶”行为。这些结果从原则上支持了我们所采用的近似方法。我们还将其推广到多带或多轨道系统,研究了重费米子材料CeCu₂Si₂的超导性质,发现带间跃迁对超导能隙对称性具有重要影响,此工作正在进行中。结合前面提到过的重

费米子超导研究的主要困难,我们计划在未来的工作中进一步完善这一唯象理论框架,更好地处理f电子的轨道特征、多种不同类型的量子临界涨落、以及f电子的局域-巡游二重性,扩展其应用范围,并对更多的超导态性质进行理论研究和实验对照,为深入认识重费米子超导提供一个唯象的理论基础。

近十多年来,许多实验技术,如扫描隧道显微镜^[51]、共振非弹性X射线散射^[52]、分子束外延技术^[53]等,开始应用于重费米子超导研究,加深了人们对重费米子超导的微观物理认识。一些实验上新发现的奇异量子现象,如CeCoIn₅中超导与磁性共存的Q相^[54]、YbRh₂Si₂^[7]和Pu-115体系^[55]中超导的配对机制,以及CeCu₂Si₂^[14]、UBe₁₃^[17]等体系的超导能隙对称性等,都亟待理论上给出合理的描述。对重费米子超导微观机理的研究,可能会对探索具有更高转变温度的新型超导材料产生重要启发。

参考文献

- White B D, Thompson J D, Maple M B. Unconventional superconductivity in heavy-fermion compounds. *Phys C*, 2015, 514: 246–278
- Steglich F, Aarts J, Bredl C D, et al. Superconductivity in the presence of strong Pauli paramagnetism: CeCu₂Si₂. *Phys Rev Lett*, 1979, 43: 1892–1896
- Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R. Theory of superconductivity. *Phys Rev*, 1957, 108: 1175–1204
- Bednorz J G, Müller K A. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschr Phys B*, 1986, 64: 189–193
- Yang Y F, Li Y. Heavy-fermion superconductivity and competing orders (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2015, 64: 217401 [杨义峰, 李宇. 重费米子超导与竞争序. *物理学报*, 2015, 64: 217401]
- Yang Y F, Fisk Z, Lee H O, et al. Scaling the Kondo lattice. *Nature*, 2008, 454: 611–613
- Schubert E, Tippmann M, Steinke L, et al. Emergence of superconductivity in the canonical heavy-electron metal YbRh₂Si₂. *Science*, 2016, 351: 485–488
- Curro N J, Caldwell T, Bauer E D, et al. Unconventional superconductivity in PuCoGa₅. *Nature*, 2005, 434: 622–625
- Allan M P, Massee F, Morr D K, et al. Imaging Cooper pairing of heavy fermions in CeCoIn₅. *Nat Phys*, 2013, 9: 468–473
- Sigrist M, Ueda K I. Phenomenological theory of unconventional superconductivity. *Rev Mod Phys*, 1991, 63: 239–311
- Bredl C D, Spille H, Rauchschwalbe U, et al. Gapless superconductivity and variation of T_c in the heavy-fermion system CeCu₂Si₂. *J Magn Magn Mater*, 1983, 31: 373–376
- Bredl C D, Lieke W, Schefzyk R, et al. Specific heat and thermal expansion of CeCu₂Si₂ at low temperature. *J Magn Magn Mater*, 1985, 47: 30–32
- Kitaoka Y, Ueda K I, Fujiwara K, et al. NMR investigation of superconductivity and Kondo-coherency in CeCu₂Si₂. *J Phys Soc Jpn*, 1986, 55: 723–726
- Kittaka S, Aoki Y, Shimura Y, et al. Multiband superconductivity with unexpected deficiency of nodal quasiparticles in CeCu₂Si₂. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 067002
- Pang G M, Smidman M, Zhang J L, et al. Evidence for fully gapped d-wave superconductivity in CeCu₂Si₂. *arXiv*: 1605.04786v1
- Yamashita T, Takenaka T, Tokiwa Y, et al. Fully gapped superconductivity with no sign change in the prototypical heavy-fermion CeCu₂Si₂. *Sci Adv*, 2017, 3: e1601667
- Shimizu Y, Kittaka S, Sakakibara T, et al. Field-orientation dependence of low-energy quasiparticle excitations in the heavy-electron superconductor UBe₁₃. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 147002
- Schemm E R, Gannon W J, Wishne C M, et al. Observation of broken time-reversal symmetry in the heavy-fermion superconductor UPt₃. *Science*, 2014, 345: 190–193

- 19 Schemm E R, Baumbach R E, Tobash P H, et al. Evidence for broken time-reversal symmetry in the superconducting phase of URu₂Si₂. *Phys Rev B*, 2015, 91: 140506
- 20 Suzuki M T, Harima H. Change of Fermi surface topology in CeRu₂Si₂ studied by LSDA+*U* method. *J Phys Soc Jpn*, 2010, 79: 024705
- 21 Ikeda H, Suzuki M T, Arita R. Emergent loop-nodal s_x-wave superconductivity in CeCu₂Si₂: Similarities to the iron-based superconductors. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 147003
- 22 Shim J H, Haule K, Kotliar G. Modeling the localized-to-itinerant electronic transition in the heavy fermion system CeIrIn₅. *Science*, 2007, 318: 1615–1617
- 23 Zwirnagl G. The utility of band theory in strongly correlated electron systems. *Rep Prog Phys*, 2016, 79: 124501
- 24 Gerber S, Bartkowiak M, Gavilano J L, et al. Switching of magnetic domains reveals spatially inhomogeneous superconductivity. *Nat Phys*, 2014, 10: 126–129
- 25 Tsujimoto M, Matsumoto Y, Tomita T, et al. Heavy-fermion superconductivity in the quadrupole ordered state of PrV₂Al₂₀. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 267001
- 26 Kung H H, Baumbach R E, Bauer E D, et al. Chirality density wave of the “hidden order” phase in URu₂Si₂. *Science*, 2015, 347: 1339–1342
- 27 Scalapino D J. A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors. *Rev Mod Phys*, 2012, 84: 1383–1417
- 28 Miyake K, Watanabe S. Unconventional quantum criticality due to critical valence transition. *J Phys Soc Jpn*, 2014, 83: 061006
- 29 Thalmeier P, Maki K, Yuan Q. Multiple superconducting phases in skutterudite PrOs₄Sb₁₂. *Phys C*, 2004, 408–410: 177–178
- 30 Das T, Zhu J X, Graf M J. Theory of nodal s[±]-wave pairing symmetry in the Pu-based 115 superconductor family. *Sci Rep*, 2015, 5: 8632
- 31 Takimoto T, Hotta T, Ueda K I. Strong-coupling theory of superconductivity in a degenerate Hubbard model. *J Phys Rev B*, 2004, 69: 104504
- 32 Millis A J, Monien H, Pines D. Phenomenological model of nuclear relaxation in the normal state of YBa₂Cu₃O₇. *Phys Rev B*, 1990, 42: 167–178
- 33 Monthoux P, Balatsky A V, Pines D. Toward a theory of high-temperature superconductivity in the antiferromagnetically correlated Cuprate oxides. *Phys Rev Lett*, 1991, 67: 3448–3451
- 34 Monthoux P, Balatsky A V, Pines D. Weak-coupling theory of high-temperature superconductivity in the antiferromagnetically correlated copper oxides. *Phys Rev B*, 1992, 46: 14803–14817
- 35 Monthoux P, Lonzarich G G. p-wave and d-wave superconductivity in quasi-two-dimensional metals. *Phys Rev B*, 1999, 59: 14598–14605
- 36 Monthoux P, Lonzarich G G. Magnetically mediated superconductivity in quasi-two and three dimensions. *Phys Rev B*, 2001, 63: 054529
- 37 Monthoux P, Lonzarich G G. Magnetically mediated superconductivity: Crossover from cubic to tetragonal lattice. *Phys Rev B*, 2002, 66: 224504
- 38 Nishiyama S, Miyake K, Varma C M. Superconducting transition temperatures for spin-fluctuation superconductivity: Application to heavy-fermion compounds. *Phys Rev B*, 2013, 88: 014510
- 39 Yang Y F, Pines D. Universal behavior in heavy-electron materials. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 096404
- 40 Yang Y F, Pines D. Emergent states in heavy-electron materials. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2012, 109: E3060–E3066
- 41 Ruderman M A, Kittel C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Phys Rev*, 1954, 96: 99–102
- 42 Kasuya T. A theory of metallic ferro- and antiferromagnetism on Zener’s model. *Prog Theor Phys*, 1956, 16: 45–57
- 43 Yosida K. Magnetic properties of Cu-Mn alloys. *Phys Rev*, 1957, 106: 893–898
- 44 Yang Y F. Two-fluid model for heavy electron physics. *Rep Prog Phys*, 2016, 79: 074501
- 45 Yang Y F, Pines D, Curro N J. Quantum critical scaling and superconductivity in heavy electron materials. *Phys Rev B*, 2015, 92: 195131
- 46 Yang Y F, Pines D. Emergence of superconductivity in heavy-electron materials. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2014, 111: 18178–18182
- 47 Monthoux P, Pines D, Lonzarich G G. Superconductivity without phonons. *Nature*, 2007, 450: 1177–1183
- 48 Stock C, Broholm C, Hudis J, et al. Spin resonance in the d-wave superconductor CeCoIn₅. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 087001
- 49 Graser S, Maier T A, Hirschfeld P J, et al. Near-degeneracy of several pairing channels in multiorbital models for the Fe pnictides. *New J Phys*, 2009, 11: 025016
- 50 Monthoux P, Pines D. Spin-fluctuation-induced superconductivity in the copper oxides: A strong coupling calculation. *Phys Rev Lett*, 1992, 69: 961–964
- 51 Aynajian P, da Silva Neto E H, Gyenis A, et al. Visualizing heavy fermions emerging in a quantum critical Kondo lattice. *Nature*, 2012, 486: 201–206
- 52 Wray L A, Denlinger J, Huang S W, et al. Spectroscopic determination of the atomic f-electron symmetry underlying hidden order in URu₂Si₂. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 236401
- 53 Shishido H, Shibauchi T, Yasu K, et al. Tuning the dimensionality of the heavy fermion compound CeIn₃. *Science*, 2010, 327: 980–983
- 54 Kim D Y, Lin S Z, Weickert F, et al. Intertwined orders in heavy-fermion superconductor CeCoIn₅. *Phys Rev X*, 2016, 6: 041059
- 55 Bauer E D, Thompson J D. Plutonium-based heavy-fermion systems. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2015, 6: 137–153

Summary for “重费米子材料 CeCoIn₅ 超导态的唯象理论”

A phenomenological theory of heavy fermion superconductivity in CeCoIn₅

LI Yu^{1,2} & YANG YiFeng^{1,2,3*}¹ Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;² University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;³ Collaborative Innovation Center of Quantum Matter, Beijing 100190, China

* Corresponding author, E-mail: yifeng@iphy.ac.cn

Unconventional superconductivity was first discovered in heavy fermion materials which exhibit a rich variety of superconducting quantum phenomena. Understanding the microscopic origin of heavy fermion superconductivity will help us understand the nature of high-temperature superconductivity and explore new class of unconventional superconductors. In this article, we give a brief introduction to the recent theoretical and experimental studies on heavy fermion superconductors. In particular, it has been shown that previous understandings of the pairing mechanism based on oversimplified single-band model calculations may not explain the recent experimental observations of the superconducting gap symmetry and therefore need to be revisited. For example, the heavy fermion superconductors CeCu₂Si₂ and UBe₁₃, which have long been believed to have nodal superconducting gap structures for over three decades, are now found to exhibit nodeless behaviors in many new experiments. While these may be partially explained by using realistic band structures in combination with random phase approximation (RPA) for the dynamic susceptibility, we point out that for strongly correlated systems such as heavy fermions, RPA fails to capture the true behavior of quantum critical fluctuations which act as the pairing force for the unconventional superconductivity. We argue that there are three major issues that need to be taken into account in order to develop a good understanding of the heavy fermion superconductivity: (1) the strong electronic correlations and the two-fluid behavior of the f electrons; (2) the quantum critical nature of the superconducting pairing force that cannot be obtained based on RPA; (3) the multi-band or multi-orbital properties that rely on real materials and may be crucial for the gap structures. Following these considerations, we propose a new framework based on the strong-coupling Eliashberg theory that combines previous phenomenological theory of the spin-fluctuation-induced pairing mechanism and realistic band structures from either experimental measurements or first-principles calculations. As an example, we apply our model to the prototype heavy fermion superconductors CeCoIn₅ and CeRhIn₅. By using a single-band model derived from the scanning tunneling spectroscopy, we solve the linearized Eliashberg equation and produce the correct d-wave superconducting gap structure, in agreement with experimental observations. We further predict a simple formula for the superconducting transition temperature T_c as a function of the pairing strength and the spin fluctuation energy. We then extend the formula to general cases and use the two-fluid prediction on the heavy electron density of states to calculate the pressure-variation of T_c . Our results agree well with experiment and explain the dome structure of T_c . For multi-band systems, we have studied the superconductivity in CeCu₂Si₂. In contrast to previous calculations that predict either d-wave or nodal s-wave gap, we found that the inter-band scattering plays an essential role and may cause a nodeless gap structure. This work is still under progress. We believe that the success of the new framework suggests that it may provide a promising basis for treating the above issues and will help our understanding of the properties of heavy fermion superconductivity. In the future, we hope to extend our study to other heavy fermion superconductors and take into consideration the detailed orbital characters and the dual nature of f electrons. The latter would possibly require a reformulation of the Eliashberg equations.

heavy fermion superconductivity, two-fluid theory, Eliashberg theory, pairing symmetry

doi: 10.1360/N972017-00698