Нарушение симметрии относительно обращения времени и структура сверхпроводящего параметра порядка $PrOs_4Sb_{12}$

© В.Г. Яржемский, В.И. Нефедов

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук,
Москва, Россия

E-mail: vgyar@igic.ras.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 29 июля 2008 г.)

Для группы симметрии T_h сверхпроводника $PrOs_4Sb_{12}$ и ее подгруппы D_{2h} построены антисимметричные двухэлектронные волновые функции, которые соответствуют симметрии куперовских пар. Исследована зависимость структуры этих функций (наличия нулевых точек) от группы волнового вектора и мультиплетности. Полученная теоретически узловая структура двухэлектронных волновых функций позволила объяснить экспериментально наблюдаемую структуру сверхпроводящего параметра порядка $PrOs_4Sb_{12}$ (наличие двух фаз с разной структурой нулевых точек) нарушениями симметрии относительно обращения времени.

Работа выполнена при поддержке Совета при Президенте РФ по поддержке ведущих научных школ (НШ-616.2006.3) и Президиума РАН по проекту „Электронное строение, структура и свойства функциональных материалов“.

PACS: 74.20.Rp, 74.70.-b, 74.70.Wz

1. Введение

Переход в сверхпроводящее состояние сопровождается различными нарушениями симметрии. Их проявлением в так называемых необычных сверхпроводниках является анизотропия СПП (сверхпроводящего параметра порядка), который обращается в нуль в точках и на линиях Ферми-поверхности [1]. Сверхпроводимость во многих необычных сверхпроводниках, таких как (U,Th)Be_{13} ($T_c = 0.8$ K) [2], Sr_2RuO_4 ($T_c = 1.5$ K) [3,4], носит триплетный характер и обычно связывается с магнитными взаимодействиями. Сверхпроводимость в сравнительно недавно открытом [5] сверхпроводнике $PrOs_4Sb_{12}$ ($T_c = 1.85$ K) определяется тяжелыми фермионами ($m^* \sim 50m_e$) и может быть обусловлена квадрупольными взаимодействиями, связанными с кристаллическим электрическим полем. В то же время не исключен магнитный механизм спаривания [5]. Вывод о квадрупольном механизме спаривания в $PrOs_4Sb_{12}$, отличном от электрон-фононного и магнитного, был сделан в работе [6] на основании исследований зависимости удельной теплоемкости от магнитного поля. Эксперименты по рассеянию нейтронов выявили квадрупольный антиферромагнитный параметр порядка в $PrOs_4Sb_{12}$ [7]. Кроме того, неизменность сдвига Найта при переходе через T_c указывает на нечетность параметра порядка и триплетность куперовской пары [8]. Исследования глубины проникновения магнитного поля λ в радиочастотном диапазоне обнаружили температурную зависимость $\lambda \sim T^2$, и был сделан вывод о том, что СПП имеет два точечных нуля на поверхности Ферми [9]. Исследования зависимости теплопроводности от величины и направления магнитного поля и от температуры показали, что симметрия СПП в $PrOs_4Sb_{12}$ зависит от величины приложенного магнитного поля [10,11]. Был сделан вывод [10] о том, что СПП при больших полях имеет шесть точечных нулей в направлениях $[00\pm1]$, $[0\pm10]$ и $[00\pm1]$, а при малых полях — два нуля в направлениях $[00\pm1]$.

Результаты ЯМР на Sb показали отсутствие когерентного пика ниже T_c и экспоненциальной температурной зависимости, что указывает на необычный тип сверхпроводимости $PrOs_4Sb_{12}$ [12], в то же время температурная зависимость не совпадет с температурной зависимостью $\sim T^3$, наблюдаемой в необычных сверхпроводниках с линиями нулей.

Эксперименты по релаксации спинов мюонов в нулевом поле [13] однозначно выявили спонтанное появление внутренних магнитных полей, что означает нарушение симметрии по отношению к обращению времени. Вблизи сверхпроводящего перехода кривая зависимости величины C/T от температуры обнаруживает две аномалии: резкий скачок при $T^*_{c1} = 1.82$ K и петлю при $T_{c2} = 1.64$ K [13]. Авторы [13] предположили, что тяжелые магнитные куперовские пары в $PrOs_4Sb_{12}$ связаны немагнитными взаимодействиями, вызванными квадрупольными флуктуациями.

Релаксация спинов мюонов в поперечном поле на монокристалле $PrOs_4Sb_{12}$ в сверхпроводящем состоянии почти постоянна при изменении температуры; отсюда следует, что глубина проникновения $\lambda(T)$ также не зависит от температуры. Этот экспериментальный результат соответствует обычному типу сверхпроводимости [14]. Отличие этой зависимости от зависимости, полученной в радиочастотных измерениях [9] и соответствующей необычному типу сверхпроводимости, было связно с нарушениями симметрии относительно обращения времени [14] или с наличием двух фаз, одна из которых не имеет узловых точек [15].

В настоящей работе мы используем данные [9–11] по узловой структуре СПП, которые являются наиболее полными и приняты в большинстве работ. Согласно этим работам, в $PrOs_4Sb_{12}$ имеются две фазы разной симметрии, между которыми происходит переход уже в сверхпроводящем состоянии.

Узловая структура СПП тесно связана с взаимодействиями, ответственными за куперовское спаривание. Обычно полагают [11], что присутствие нулей является проявлением магнитного или каких-то других механизмов спаривания вместо обычного электрон-фононного механизма. Экспериментальные исследования узловой структуры СПП и теоретическая интерпретация таких экспериментов необходимы для выяснения природы таких взаимодействий.

Существуют три основных теоретико-групповых подхода к исследованию СПП, основанные на точечных, непрерывных и пространственных группах. Точечно-групповой подход к СПП [1,16,17] базируется на редукции сферических функций, соответствующих изотропному случаю, на точечную группу кристалла. Выбор базисных функций неприводимого представления (НП) точечной группы неоднозначен, поэтому неоднозначными являются также выводы точечно-группового подхода относительно структуры нулей СПП [18]. В случае сильного спин-орбитального взаимодействия точечно-групповой подход не дает симметрийных оснований для обращений в нуль триплетного параметра порядка [17] (теорема Блунта). Это связано с дополнительной степенью свободы спиновой части триплетных волновых функций в кристаллах. Бóльшая часть необычных триплетных сверхпроводников, в которых СПП обращается в нуль на линиях Ферми-поверхности, соответствует исключениям из этой теоремы. Как показано далее, для объяснения таких исключений необходимо рассмотреть понижение симметрии спиновой системы, связанное с нарушениями симметрии относительно обращения времени.

Подход, основанный на теории непрерывных групп, объединяет синглетный СПП с антиферромагнитным параметром порядка операциями группы SO(5) [19].

Пространственно-групповой подход к СПП [20–26] основан на выводе Гинзбурга и Ландау о том, что СПП и волновая функция куперовской пары имеют одинаковую симметрию [27], на симметрийном описании Андерсона синглетных и триплетных пар в общей точке **k**-пространства [28] и методе индуцированных представлений [29,30]. В настоящей работе пространственно-групповым методом построены общие триплетные двухэлектронные функции для группы T_h и ее подгруппы D_{2h}, которая описывает симметрию триплетного спина при нарушении симметрии относительно обращения времени. На основании полученных результатов установлена симметрия фаз с различной структурой нулей СПП в $PrOs_4Sb_{12}$.

2. Метод расчета и результаты

В сферически-симметричном случае в куперовскую пару связываются два электрона с противоположными импульсами. Согласно Андерсону [28], волновые функции электронов в синглетной паре связаны обращением времени θ, а три компоненты волновой функции триплетной пары записываются во вторично-квантованном виде как

$$\langle C_k^+ C_{Ik}^+ \rangle, \tag{1}$$

$$\langle C_k^+ C_{\theta k}^+ - C_{Ik}^+ C_{I\theta k}^+ \rangle, \tag{2}$$

$$\langle C_{\theta k}^+ C_{I\theta k}^+ \rangle, \tag{3}$$

где I — пространственная инверсия.

В приближении $L-S$-связи синглетную двухэлектронную функцию и три компоненты триплетной функции запишем в виде

$$\Psi^s = \Phi^s S_0, \tag{4}$$

$$\Psi_m^t = \Phi^t S_m^l, \quad l = 1, \quad m = -1, 0, 1, \tag{5}$$

где S_0 и S_m^l — синглетная и триплетная спиновые функции. Соответствующие пространственные части даются формулами

$$\Phi_1^s = \varphi_1(r_1)\varphi_I(r_2) + \varphi_1(r_2)\varphi_I(r_1), \tag{6}$$

$$\Phi_1^t = \varphi_1(r_1)\varphi_I(r_2) - \varphi_1(r_2)\varphi_I(r_1), \tag{7}$$

где нижние индексы 1 и I обозначают произвольно выбранный волновой вектор внутри зоны Бриллюэна и результат действия на него пространственной инверсии.

Вследствие трансляционной симметрии одноэлектронные функции кристалла характеризуются звездой $\{\mathbf{k}\}$ вектора $\mathbf{k}$ и его группой H. Правильная трансляционно-инвариантная двухэлектронная волновая функция должна выражаться в виде линейной комбинации функций принадлежащих всем лучам звезды и быть антисимметричной относительно перестановок электронных координат. Как следует из теории индуцированных представлений [23,24,29,30], для построения пространственной части волновой функции пары нужно подействовать проекционными операторами на функции (6) и (7). Согласно теореме взаимности [29], в результате получаются только те НП полной группы, характеры которых не ортогональны НП, по которым преобразуются функции (6) и (7) на подгруппе $H + IH$. Отсюда, в частности, следует, что если группа H состоит только из единичного элемента, то для синглетных пар разрешены все четные НП точечной группы, а для триплетных — все нечетные, причем каждое НП встречается столько раз, какова его размерность. Если группа H содержит более одного элемента, то характеры НП пространственной части синглетной и триплетной пар строятся согласно следующим двум формулам [20–26]:

$$\chi^{\pm}(h) = \chi^2\big(D(h)\big), \tag{8}$$

$$\chi^{\pm}(\delta h) = \pm\chi\big(D(\delta h \delta h)\big). \tag{9}$$

Здесь h — элемент группы H; D — НП группы H; знак плюс соответствует синглетной паре, знак минус — триплетной, а δ — элемент двойного класса в разложении группы G в двойные классы по подгруппе H. Поскольку импульс куперовской пары равен нулю, рассматриваем только двойные классы, в которых δ переводит $\mathbf{k}$ в $-\mathbf{k}$. Если группа H состоит только из единичного элемента, то в качестве δ можно взять только инверсию. В некоторых симметричных направлениях в качестве δ можно взять также вращение вокруг оси, перпендикулярной $\mathbf{k}$.

Если НП группы волнового вектора одномерные и действительные, то из формул (8) и (9) для синглетных пар получаем единичное НП, а для триплетных пар характеры элементов, меняющих направление волнового вектора, равны -1. Очевидно, что два указанных НП не исчерпывают все возможные НП группы $H + \delta H$, поэтому при индуцировании в полную группу мы получим не все ее НП. Кроме того, если НП группы H двумерные, то среди разрешенных НП для пар с нулевым полным спином могут существовать нечетные, а для пар с единичным спином — четные [20]. Таким образом, формулы (8) и (9) обобщают подход Андерсона [28] на случай симметричных направлений и плоскостей в зоне Бриллюэна.

Рассмотрим случай, когда волновой вектор $\mathbf{k}_1$ лежит на плоскости симметрии внутри зоны Бриллюэна и $H = C_s$. Получаем, что синглетная волновая функция принадлежит НП A_g группы C_{2h}, а триплетная — НП B_u группы C_{2h}. В случае синглетных пар отсутствие второго четного НП B_g группы C_{2h} означает, что некоторые четные НП полной группы будут запрещены на этой плоскости симметрии. Для триплетных пар без учета спина запрет второго нечетного НП на плоскости симметрии также означает, что будут разрешены не все НП полной группы. Однако учет симметрии триплетного спина отменяет этот запрет. Если существует симметрия относительно обращения времени, то обычно выбирают действительные линейные комбинации спиновых волновых функций, обозначаемые $\hat{x}$, $\hat{y}$ и $\hat{z}$, которые на плоскости симметрии преобразуются по двум различным четным НП группы C_{2h}. Произведения этих НП на НП B_u, соответствующее пространственной части волновой функции триплетной пары, включают все нечетные НП группы C_{2h}. Согласно теореме взаимности, это означает, что на плоскостях нет симметрийных оснований для обращения в нуль триплетного СПП (теорема Блунта [17]). В то же время при наличии магнитных полей (нарушении симметрии относительно обращения времени) различные направления спина неэквивалентны, и куперовскому спариванию соответствует только одно из из них. В этом случае число разрешенных НП сокращается, так как возможны симметрийные запреты некоторых из них. Если одно из запрещенных на плоскости НП полной группы отвечает куперовскому спариванию, то пересечение этой плоскости с поверхностью Ферми даст линии нулей функции пары. Аналогично если НП куперовской пары запрещено на линии симметрии, то пересечение этой линии с поверхностью Ферми дает точечный нуль волновой функции пары.

Сравнивая теоретическую узловую структуру параметра порядка с экспериментальной, можно найти НП, которые могут отвечать куперовскому спариванию [22].

Таблица 1. Симметрия двухэлектронных функций для направления k_z (группа T_h)

Базис	НП D_{2h}	НП группы T_h
Φ_z^s	A_g	A_{1g}, E_{1g}, E_{2g}
Φ_z^t	B_{1u}	T_u
$\Phi_z^t\hat{x}$	B_{2u}	T_u
$\Phi_z^t\hat{y}$	B_{3u}	T_u
$\Phi_z^t\hat{z}$	A_u	A_u, E_{1u}, E_{2u}

Таблица 2. Триплетные двухэлектронные функции для звезды $\{k_x, k_y, k_z\}$ (группа T_h)

НП T_h	Функция	НП D_{2h}
T_u^α	$\Phi_x^t\hat{y}$	B_{1u}
	$\Phi_y^t\hat{z}$	B_{3u}
	$\Phi_z^t\hat{x}$	B_{2u}
T_u^β	$\Phi_x^t\hat{z}$	B_{2u}
	$\Phi_y^t\hat{x}$	B_{1u}
	$\Phi_z^t\hat{y}$	B_{3u}
A_u	$\Phi_z^t\hat{z} + \Phi_y^t\hat{y} + \Phi_x^t\hat{x}$	A_u
E_{1u}	$\Phi_z^t\hat{z} + \varepsilon\Phi_y^t\hat{y} + \varepsilon^2\Phi_x^t\hat{x}$	A_u
E_{2u}	$\Phi_z^t\hat{z} + \varepsilon^2\Phi_y^t\hat{y} + \varepsilon\Phi_x^t\hat{x}$	A_u

Такой симметрийный анализ для направления k_z в группе T_h сделан в табл. 1. Для триплетных пар использовалось приближение сильного спин-орбитального взаимодействия. В этом случае пространственные операции действуют одинаковым образом на пространственную и спиновую части волновой функции. Как следует из данных этой таблицы, для синглетных пар разрешены все четные одномерные НП группы T_h. Для триплетных пар без учета спина разрешено трехмерное нечетное НП, а при включении спина разрешены все нечетные НП, причем тип НП зависит от ориентации спина по отношению к оси Z. Триплетные базисные функции для случая, когда волновой вектор направлен вдоль координатной оси, приведены в табл. 2. Несмотря на то что вид базисных функций для НП T_u совпадает с базисными функциями [31], физический смысл результатов различный. В работах [1,16,17,31] величины k_x, k_y и k_z изменяются непрерывно, и одна формула для СПП (например, формула (12) из работы [31]) относится ко всем направлениям в зоне Бриллюэна. В то же время данные табл. 2 справедливы только для направлений вдоль координатных осей, и при переходе к другим точкам зоны Бриллюэна базисные функции того же НП будут иметь другой вид.

Если группа H содержит только единичный элемент, то размерность звезды волнового вектора равна числу элементов точечной группы кристалла, а число базисных (триплетных или синглетных) функций в 2 раза меньше этого числа, так как инверсия уже использована при построении функции пары. В этом случае функции, пре-

Таблица 3. Триплетные двухэлектронные функции для группы T_h

НП	Функция *	Нули
$A_u(\hat{x})$	$(\Phi_1^t+\Phi_2^t-\Phi_3^t-\Phi_4^t)\hat{x}+(\Phi_9^t+\Phi_{11}^t-\Phi_{12}^t-\Phi_{10}^t)\hat{y}+(\Phi_5^t+\Phi_8^t-\Phi_6^t-\Phi_7^t)\hat{z}$	Y, Z
$A_u(\hat{y})$	$(\Phi_1^t-\Phi_2^t+\Phi_3^t-\Phi_4^t)\hat{y}+(\Phi_9^t-\Phi_{11}^t+\Phi_{12}^t-\Phi_{10}^t)\hat{z}+(\Phi_5^t-\Phi_8^t+\Phi_6^t-\Phi_7^t)\hat{x}$	X, Z
$A_u(\hat{z})$	$(\Phi_1^t-\Phi_2^t-\Phi_3^t+\Phi_4^t)\hat{z}+(\Phi_9^t-\Phi_{11}^t-\Phi_{12}^t+\Phi_{10}^t)\hat{x}+(\Phi_5^t-\Phi_8^t-\Phi_6^t+\Phi_7^t)\hat{y}$	X, Y
$T_u^\alpha(\hat{x})$	$(\Phi_1^t+\Phi_2^t+\Phi_3^t+\Phi_4^t)\hat{x}$ $(\Phi_9^t+\Phi_{11}^t+\Phi_{12}^t+\Phi_{10}^t)\hat{y}$ $(\Phi_5^t+\Phi_8^t+\Phi_6^t+\Phi_7^t)\hat{z}$	X, Y, Z
$T_u^\alpha(\hat{y})$	$(\Phi_1^t-\Phi_2^t-\Phi_3^t+\Phi_4^t)\hat{y}$ $(\Phi_9^t-\Phi_{11}^t-\Phi_{12}^t+\Phi_{10}^t)\hat{z}$ $(\Phi_5^t-\Phi_8^t-\Phi_6^t+\Phi_7^t)\hat{x}$	X, Y
$T_u^\alpha(\hat{z})$	$(\Phi_1^t-\Phi_2^t+\Phi_3^t-\Phi_4^t)\hat{z}$ $(\Phi_9^t-\Phi_{11}^t+\Phi_{12}^t-\Phi_{10}^t)\hat{x}$ $(\Phi_5^t-\Phi_8^t+\Phi_6^t-\Phi_7^t)\hat{y}$	X, Z
$T_u^\beta(\hat{z})$	$(\Phi_5^t+\Phi_8^t-\Phi_6^t-\Phi_7^t)\hat{y}$ $(\Phi_1^t+\Phi_2^t-\Phi_3^t-\Phi_4^t)\hat{z}$ $(\Phi_9^t+\Phi_{11}^t-\Phi_{12}^t-\Phi_{10}^t)\hat{x}$	Y, Z

* Функция Φ_1^t определена формулой (7), а функции Φ_i^t — как результат действия на нее вращений h_i группы T_h в обозначениях Ковалева [32].

образующиеся по НП группы (базисные волновые функции), строятся действием проекционных операторов на функции (6) и (7). Триплетные двухэлектронные волновые функции для НП A_u, и T_u, построенные методом проекционных операторов, приведены в табл. 3. Функции симметрии E_{1u} и E_{2u} имеют такую же структуру нулей на координатных осях, что и функции A_u, и их явный вид не приводится. Исходная функция обозначена Φ_1^t. Остальные базисные функции получаются действием элементов группы на Φ_1^t. Для элементов точечных групп использованы обозначения Ковалева [32]. В этих обозначениях h_1, h_2, h_3, h_4 соответствуют единичному элементу и вращениям на 180° вокруг осей X, Y и Z. Вращения вокруг осей третьего порядка h_5 и h_9 переводят ось Z в положения Y и X и функции последней строки НП T_u в функции второй и первой строк соответственно. В случае НП A_u, E_{1u}, E_{2u} имеется по одному пространственному базису, и включение спина увеличивает размерность втрое. В случае НП T_u три различных базиса, существование которых следует из теоремы взаимности, могут быть получены, если начинать проектирование с каждой из трех строк НП T_u. Такие базисы будем обозначать верхними индексами α, β и γ. При учете спина размерность триплетного базиса увеличивается в 3 раза. Всего имеется девять различных базисов симметрии T_u. Такая размерность следует из того, что полная размерность двухэлектронного базиса равна квадрату размерности одноэлектронного. В табл. 3 приведены только четыре базиса для НП T_u, которые имеют различную узловую структуру. Если волновой вектор k_1 приближается к одной из координатных осей, то функции табл. 3 переходят в функции табл. 2, соответствующие тем же НП, или обращаются в нуль. Нулевые направления также указаны в табл. 3. Приведенные в табл. 3 различные линейные комбинации симметрии A_u и T_u обращаются в нуль на разных координатных осях. Поскольку в отсутствие внешних магнитных полей все линейные комбинации, преобразующиеся по одному НП, физически эквивалентны, нет симметрийных оснований для обращения в нуль функции пары. Этот вывод является обобщением теоремы Блунта [17] на случай симметричных направлений, в которых размерность НП группы волнового вектора равна единице.

Полученный результат означает, что экпериментально наблюдаемые точечные нули СПП связаны с понижением симметрии. Таким понижением симметрии может быть экспериментально наблюдаемое нарушение симметрии относительно обращения времени: связанное с появлением спонтанных магнитных полей [13]. В присутствии магнитного поля спиновые функции $M_S = 1$ и $M_S = -1$ неэквивалентны, и их линейным комбинациям $\hat{x}$ и $\hat{y}$ не будет соответствовать определенная энергия. При наличи магнитных полей происходит энергетическое расщепление триплетного двухэлектронного состояния на три компоненты, соответствующие трем проекциям полного спина. Согласно Андерсону [28], куперовская пара обладает симметрией относительно обращения времени. Синглетная пара и $M_S = 0$ (в принятых обозначениях $\hat{z}$) компонента триплетной пары инвариантны относительно такой операции. Обращение времени переводит неэквивалентные состояния $M_S = 1$ и $M_S = -1$ друг в друга, поэтому такие состояния следует исключить из рассмотрения. Таким образом, при наличии магнитных полей группа симметрии спиновой части волновой функции сужается до группы D_{2h}. Состояние $\hat{z}$ с противоположными спинами электронов в паре соответствует антиферромагнитному случаю. Отметим, что вывод об антиферромагнитной структуре СПП в

Таблица 4. Триплетные двухэлектронные функции для группы D_{2h}

НП D_{2h}	Функция	Нули
A_{1u}	$(\Phi_1^t - \Phi_2^t - \Phi_3^t + \Phi_4^t)\hat{z}$	X, Y
B_{1u}	$(\Phi_1^t - \Phi_2^t + \Phi_3^t - \Phi_4^t)\hat{z}$	X, Z
B_{2u}	$(\Phi_1^t + \Phi_2^t - \Phi_3^t - \Phi_4^t)\hat{z}$	Y, Z
B_{3u}	$(\Phi_1^t + \Phi_2^t + \Phi_3^t + \Phi_4^t)\hat{z}$	X, Y, Z

PrO_4Sb_{12} был сделан в работе [7]. Построенные базисные функции $\hat{z}$-компоненты триплетной пары для группы D_{2h} приведены в табл. 4. Если группа H состоит только из единичного элемента, то симметрийно возможны все состояния. Однако построенные базисные функции по-разному ведут себя, если исходный вектор $\mathbf{k}_1$ направлен вдоль одной из координатных осей. Функция пары симметрии A_u имеет четыре нуля в направлениях $\pm X$ и $\pm Y$. Две функции B_{1u} и B_{2u} имеют нули в направлениях $\pm X, \pm Z$ и $\pm Y$, $\pm Z$ соответственно. Поскольку в рассматриваемом случае магнитное поле и ось квантования направлены по оси Z, последние две функции физически эквивалентны, и симметрийно обусловлены только два нуля $\pm Z$. Функция B_{3u} имеет шесть нулей в направлениях координатных осей. Таким образом, для параметра порядка в группе симметрии спина имеются три возможные структуры нулей СПП: симметрия A_u с четырьмя нулями, симметрия $B_{1u} + B_{2u}$ с двумя нулями и симметрия B_{3u} с шестью нулями.

3. Обсуждение результатов

Для описания наблюдаемой структуры нулевых точек в $PrOs_4Sb_{12}$ использовались различные феноменологические полиномы [31,33–37]. В модели $p + h$-симметрии [33] параметр порядка A-фазы с шестью нулями имеет вид

$$\Delta_A(k) = \Delta(1 - k_1^4 - k_2^4 - k_3^4). \tag{10}$$

В то же время в работе [34] для A-фазы использовалась функция с четырьмя нулями

$$\Delta_A(k) = \Delta(1 - k_x^4 - k_y^4). \tag{11}$$

Такая неоднозначность связана с не вполне очевидной интерпретацией экспериментов [10]. Феноменологическим формулам (10) и (11) соответствуют функции B_{3u} и A_{1u} из табл. 4.

Для B-фазы в предположении, что нули СПП находятся на оси Z, использовалась формула [33,34]

$$\Delta_B(k) = \Delta(1 - k_3^4). \tag{12}$$

Этому случаю в табл. 4 соответствует сумма двух физически эквивалентных НП B_{1u} и B_{2u}. В работе [35] для объяснения экспериментальных данных была предложена комбинация функций симметрии s- и d-типов: для A-фазы — анизотропная функция s-типа с шестью нулями, а для B-фазы — функция типа $s + id_{x^2-y^2}$. В работе [36] для обоих состояний предложены базисные функции типа $s + g$. Для описания состояний с шестью нулями использовались также функции симметрии f-типа [37]. Как видно, феноменологический подход позволяет описать экспериментальную структуру нулей различными типами функций. Отметим, что используя правила редукции группы полных вращений на группу D_{2h}, приведенным в табл. 4 функциям также можно сопоставить нечетные сферические функции, однако, поскольку мы использовали лишь общие правила построения двухэлектронных функций, вывод относительно нулей каждого из НП точечной группы однозначен и не зависит от выбора базиса.

Полученные теоретико-групповые результаты имеют простой физический смысл. Согласно стандартной модели куперовской пары, в ней присутствует только взаимодействие между состояниями $+\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$. Поэтому вдали от симметричных направлений лучи звезды вектора $\mathbf{k}$ расположены далеко друг от друга, взаимодействие между остальными функциями пренебрежимо мало, и энергия пары не зависит от знаков в линейной комбинации. В этом случае все четыре базисные функции табл. 4 физически эквивалентны. В симметричных направлениях при сильном спин-орбитальном взаимодействии правильная полная функция пары должна преобразовываться операциями симметрии группы вектора $\mathbf{k}$. При приближении вектора $\mathbf{k}$ к оси Z только функции симметрии A_{1u} соответствуют преобразованиям группы симметрии этого вектора, а остальные линейные комбинации обращаются в нуль. Аналогично функции B_{1u} и B_{2u} образуют правильные спин-орбитали при приближении только к осям Y и X соответственно. Предельный переход от функции B_{3u} к каждой из трех осей симметрии не дает правильной симметрии, поэтому на осях возникают нулевые точки. При наложении магнитных полей состояния A_{1u}, B_{1u}, B_{2u} и B_{3u} становятся неэквивалентными, и сверхпроводимости соответствуют только некоторые из них, что и выражается в переходах между состояниями с различной узловой структурой [10]. В нашем подходе узловая структура СПП следует только из симметрии волновой функции пары и не предполагает дополнительных взаимодействий. Поэтому можно сказать, что наши результаты не противоречат квадрупольной модели [5–7] спаривания в $PrOs_4Sb_{12}$.

4. Заключение

Построены общие триплетные двухэлектронные функции для групп симметрии T_h (группа симметрии сверхпроводника $PrOs_4Sb_{12}$) и D_{2h} (группа симметрии спиновой части куперовской пары при нарушении симметрии относительно обращения времени) и исследована их узловая структура. Полный базис для группы T_h включает каждое одномерное НП 3 раза и каждое трехмерное НП 9 раз, и различные базисные функции, принадлежащие одному НП, обращаются в нуль на разных направлениях. Поэтому в общем случае нет симметрийных оснований для обращения в нуль триплетного СПП (теорема Блунта [17]). Наличие спонтанных магнитных полей в $PrOs_4Sb_{12}$ [13] (нарушение симметрии относительно обращения времени) приводит к понижению симметрии спиновой части до D_{2h}. В этом случае имеются три физически неэквивалентных базиса, соответствующие нулевой проекции полного спина на ось квантования: базис НП A_u с четырьмя нулями в направлениях $\pm X$ и $\pm Y$, базис НП $B_{1u} + B_{2u}$ с двумя нулями в направлениях $\pm Z$ и базис B_{3u} с шестью нулями в направлениях $\pm X, \pm Y$ и $\pm Z$. Базис A_u с четырьмя нулями (или базис B_{3u} с шестью нулями [10]) соответствует A-фазе $PrOs_4Sb_{12}$, а базис $B_{1u} + B_{2u}$ с двумя нулями соответствует B-фазе. Таким образом, теоретико-групповой учет нарушения симметрии относительно обращения времени позволил связать экспериментальную структуру нулей СПП $PrOs_4Sb_{12}$ с индексом НП группы симметрии без введения дополнительных предположений о виде базисных функций. Это означает, что наблюдаемая узловая структура СПП [9–11] может быть описана в принятой квадрупольной модели спаривания [5–7] без введения дополнительных (в частности, магнитных) взаимодействий, если учтена симметрия спиновой и орбитальной частей пары в пространственной группе кристалла.

Список литературы

[1] M. Sigrist, K. Ueda. Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
[2] R.H. Heffner, J.L. Smith, J.O. Willis, P. Birrer, C. Baines, F.N. Gygax, B. Hitti, E. Lippelt, H.R. Ott, A. Schenck, E.A. Knetsch, J.A. Mydosh, D.E. MacLaughlin. Phys. Rev. Lett. **65**, 2816 (1990).
[3] K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka, K. Asayama, Z.Q. Mao, Y. Mori, Y. Maeno. Nature **396**, 658 (1998).
[4] G.M. Luke, Y. Fudamoto, K.M. Kojima, M.I. Larkin, J. Merrin, B. Nachumi, Y.J. Uemura, Y. Maeno, Z.Q. Mao, Y. Mori, H. Nakamura, M. Sigrist. Nature **394**, 558 (1998).
[5] E. Bauer, N.A. Frederik, P.-C. Ho, V.S. Zapf, M.B. Maple. Phys. Rev. B **65**, 100 506 (2002).
[6] R. Vollmer, A. Faißt, C. Pfleiderer. Phys. Rev. Lett. **90**, 057 001 (2003).
[7] W. Hugemoto, S. Saha, A. Koda, K. Ohishi, R. Kadono, Y. Aoki, H. Sugevara, H. Sato. Phys. Rev. B **75**, 020 510 R (2007).
[8] K. Kaneko, N. Metoki, R. Sniina, T.D. Matsuda, M. Kohgi, K. Kuwahara, N. Berhoeft. Phys. Rev. B **75**, 094 408 (2007).
[9] E.E. Chia, M.B. Salamon, H. Sugawara, H. Sato. Phys. Rev. Lett. **91**, 247 003 (2002).
[10] K. Izawa, Y. Nakajima, J. Goryo, Y. Matsuda, S. Osaki, H. Sugawara, H. Sato, P. Thalmeier, K. Maki. Phys. Rev. Lett. **90**, 117 001 (2003).
[11] Y. Matsuda, K. Izawa, I. Vekhter. J. Phys.: Cond. Matter **18**, R 705 (2006).
[12] H. Kotegawa, M. Yogi, Y. Imamura, Y. Kawasaki, G.-Q. Zheng, Y. Kitaoka, S. Ohsaki, H. Sugawara, Y. Aoki, H. Sato. Phys. Rev. Lett. **90**, 027 001 (2003).
[13] Y. Aoki, A. Tsuchiya, T. Kanayama, S.R. Saha, H. Sugawara, H. Sato, W. Higemoto, A. Koda, K. Ohishi, K. Nishiyama, R. Kadono. Phys. Rev. Lett. **91**, 067 003 (2003).
[14] L. Shu, D.E. MacLaughlin, R.H. Heffner, G.D. Morris, O.O. Bernal, F. Callaghan, J.E. Sonier, A. Bosse, J.E. Anderson, W.M. Yuhasz, N.A. Frederick, M.B. Maple. Physica B **374**, 247 (2006).
[15] D.E. MacLaughlin, Lei Shu, R.H. Heffner, J.E. Sonier, F.D. Callaghan, G.D. Morris, O.O. Bernal, W.M. Yuhasz, N.A. Frederick, M.B. Maple, D.E. MacLaughlin, L. Shu, R.H. Heffner. Physica B **403**, 1132 (2008).
[16] Г.Е. Воловик, Л.П. Горьков. ЖЭТФ **88**, 1412 (1985).
[17] E.I. Blount. Phys. Rev. B **32**, 2935 (1985).
[18] S. Yip, A. Garg. Phys. Rev. B **48**, 3304 (1993).
[19] S.C. Zhang. Science **275**, 1089 (1997).
[20] V.G. Yarzhemsky, E.N. Muraviev. J. Phys: Cond. Matter **4**, 3525 (1992).
[21] V.G. Yarzhemsky. Z. Phys. B: Cond. Matter **99**, 19 (1995).
[22] V.G. Yarzhemsky. Phys. Status Solidi B **209**, 101 (1998).
[23] В.Г. Яржемский, В.И. Нефедов. ДАН **404**, 481 (2005).
[24] V.G. Yarzhemsky, V.I. Nefedov. Phil. Mag. Lett. **86**, 733 (2006).
[25] В.Г. Яржемский, В.И. Нефедов. ДАН **412**, 624 (2007).
[26] В.Г. Яржемский, В.И. Нефедов. Неорган. материалы **41**, 1415 (2005).
[27] В.Л. Гинзбург, Л.Д. Ландау. ЖЭТФ **20**, 1064 (1950).
[28] P.W. Anderson. Phys. Rev. B **30**, 4000 (1984).
[29] C.J. Bradley, A.P. Cracknel. The Mathematical theory of symmetry in solids. Representation theory of point groups and space groups. Clarendon, Oxford (1972). 672 p.
[30] Р.А. Эварестов, В.П. Смирнов. Методы теории групп в квантовой химии твердого тела. Изд-во ЛГУ, Л. (1987). 376 с.
[31] I.A. Sergienko, S.H. Curnoe. Phys. Rev. B **70**, 144 522 (2004).
[32] О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Наука, М. (1986). 340 с.
[33] H. Won, Q. Yuan, P. Thalmeier, K. Maki. Braz. J. Phys. **33**, 675 (2003).
[34] K. Maki, H. Won, P. Thalmeier, Q. Yuan, K. Izawa, Y. Matsuda. Europhys. Lett. **64**, 496 (2003).
[35] J. Goryo. Phys. Rev. B **67**, 184 511 (2003).
[36] M. Ichoka, N. Nakai, K. Machida. J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 1322 (2003).
[37] K. Miyake, H. Kondo, H. Harima. J. Phys.: Cond. Matter **15**, L 275 (2003).