

05

Вихревая решетка в LiFeAs-сверхпроводнике в рамках двухзонной модели Гинзбурга—Ландау

© И.Н. Аскерзаде^{1,2}

¹ Department of Computer Engineering and Center of Excellence of Superconductivity Research of Ankara University, Golbasl Kampus, I blok, Ankara, 06830 Turkey

² Институт физики НАН Азербайджана, AZ1143 Баку, Азербайджан

e-mail: iasker@science.ankara.edu.tr, solstphs@physics.ab.az

(Поступило в Редакцию 5 февраля 2014 г.)

Проведено численное моделирование нестационарных уравнений двухзонной модели Гинзбурга—Ландау. Вычисления проведены для тонких пленок двухзонного сверхпроводника LiFeAs квадратной формы вблизи критической температуры в перпендикулярном магнитном поле и показан квазигексагональный характер вихревой решетки в промежуточном состоянии.

Открытие новых сверхпроводников на основе Fe вызвало начало интенсивных исследований в этом направлении. В работе [1] была обнаружена сверхпроводимость в соединении LaOFeP с $T_c = 4$ К. К настоящему времени синтезированы и исследованы несколько типов этих материалов [2–8]. Материалы этого нового класса сверхпроводников 1111 (REFeAsO, RE = Sm, La, Dy, Eu, Th, Gd и т.д.) имеют наивысшую критическую температуру около $T_c = 50$ К. Соединение 122 (Ba(K)Fe₂As₂) переходит в сверхпроводящее состояние при температуре $T_c = 40$ К, в то время как сверхпроводники 111 (LiFeAs, NaFeAs) имеют температуру перехода 18 К. Еще одним представителем сверхпроводников на основе Fe также является соединение 11 (FeS) с наименьшей температурой перехода $T_c = 8$ К.

Подобно купратным сверхпроводникам соединения на основе Fe являются слоистыми. В пространственно разделенных слоях Fe происходит конденсация электронов в куперовские пары, а кислородные слои поставляют носителей заряда при отклонении от стехиометрического состава. Детальные обзоры современного состояния исследований этих материалов опубликованы в [9–13]. При сопоставлении свойств купратных сверхпроводников и сверхпроводников на основе Fe выявляют некоторые элементы схожести и много различий. Хорошо известно, что симметрия параметра порядка в купратных сверхпроводниках имеет d -волновой характер, в то время как для новых соединений предложен $s \pm$ тип симметрии [12]. Другим важным моментом является тот факт, что в отличие от купратных соединений сверхпроводники на основе Fe проявляют многозонный характер сверхпроводимости [13,14].

Одним из широко исследованных представителей новых сверхпроводников является представитель класса 111 LiFeAs. Как показывают исследования, в этом соединении параметр порядка $\Delta_1 = 1.5$ meV связан с дырочными носителями, в то время как параметр порядка $\Delta_2 = 2.5$ meV — с электроноподобными носителями тока [15,16]. Двухзонный характер параметра порядка в LiFeAs также подтверждается измерениями удельной

теплоемкости [17] и вычислениями из первопринципных данных [18]. Присутствие двух параметров порядка с различными степенями анизотропии приводит к разным физическим свойствам [19]. В отличие от однозонных сверхпроводников в двухзонных соединениях анизотропии верхнего критического поля $\gamma(T) = \frac{H_{c2}^{ab}(T)}{H_{c2}^c(T)}$ становится температурно-зависимым [20]. Совсем недавно в работе [21] был экспериментально исследован механизм зарождения абрикосовских вихрей в LiFeAs с использованием туннельной спектроскопии. Измерения в отсутствие внешнего магнитного поля подтверждают существование двух параметров порядка. Изображения вихрей в широком диапазоне внешних магнитных полей от 0.1 до 11 Т были получены измерением туннельной проводимости носителей на уровне Ферми. При разных магнитных полях был обнаружен квазигексагональный характер вихревой решетки, т.е. координационное число (число соседних вихрей) в некоторых местах равно 5 или 7 вместо 6. Однако, теоретический анализ симметрии вихревой решетки в двухзонных сверхпроводниках LiFeAs не был рассмотрен. В настоящей работе проведен анализ вихревой структуры в рамках двухзонной теории Гинзбурга—Ландау и результаты сравниваются с экспериментальными данными для LiFeAs [21].

Нестационарные уравнения Гинзбурга—Ландау для однозонных сверхпроводников впервые были выведены в [22] и нашли широкое применение при изучении динамики электромагнитного поведения таких сверхпроводников во внешнем магнитном поле. Стационарные уравнения для двухзонной модели Гинзбурга—Ландау рассмотрены в [23–26]. Согласно этой модели, функционал свободной энергии Гинзбурга—Ландау для изотропного двухзонного сверхпроводника запишем как

$$F_{SC} = \int d^3r (F_1 + F_{12} + F_2 + \mathbf{H}^2/8\pi), \quad (1)$$

где

$$F_i = \frac{\hbar^2}{4m_i} \left| \left(\nabla - \frac{2\pi i \mathbf{A}}{\Phi_0} \right) \Psi_i \right|^2 + \alpha_i(T) \Psi_i^2 + \beta_i \Psi_i^4/2, \quad (2)$$

$$F_{12} = \varepsilon(\Psi_1^* \Psi_2 + c.c.) + \varepsilon_1 \left\{ \left(\nabla + \frac{2\pi i \mathbf{A}}{\Phi_0} \right) \Psi_1^* \left(\nabla - \frac{2\pi i \mathbf{A}}{\Phi_0} \right) \Psi_2 + c.c. \right\}, \quad (3)$$

где m_i — обозначает массы электронов, принадлежащих к разным зонам ($i = 1, 2$). Коэффициенты α_i линейно зависят от температуры: $\alpha_i = \gamma_i(T - T_{c,i})$, в то время как β_i полагаются константами. Величины ε и ε_1 описывают межзонное взаимодействие между параметрами порядка и их градиентами соответственно. \mathbf{H} — внешнее магнитное поле, Φ_0 — квант магнитного потока. В выражениях (2) и (3) параметры порядка полагаются медленно меняющимися в пространстве. Минимизацию свободной энергии (1)–(3) дают уравнения Гинзбурга–Ландау для описания двузонных сверхпроводников в стационарном случае [23–26]. Нестационарные уравнения в двузонной теории Гинзбурга–Ландау выводятся из функционала (1)–(3) аналогично работе [22]

$$\begin{aligned} \eta_1 \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\kappa\varphi \right) \Psi_1 &= -\frac{\delta F}{\delta \Psi_1^*}, \\ \eta_2 \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\kappa\varphi \right) \Psi_2 &= -\frac{\delta F}{\delta \Psi_2^*}, \\ \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\varphi \right) \Psi_1 &= -\frac{1}{2} \frac{\delta F}{\delta \mathbf{A}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь использованы обозначения, принятые в работе [22]. В уравнениях (4) φ обозначает скалярный электрический потенциал, $\eta_{1,2}$ — релаксационные параметры для соответствующих параметров порядка, $\kappa = \frac{\lambda}{\xi}$ — параметр Гинзбурга–Ландау. Выбором соответствующей калибровки электростатический потенциал можно исключить из системы уравнений (4) [22]. При такой калибровке и выборе конфигурации магнитного поля (без ограничения общности) в виде $\mathbf{H} = (0, 0, H)$, нестационарные уравнения в двузонной теории Гинзбурга–Ландау принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \eta_1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{4m_1} \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{x^2}{l_s^2} \right) \Psi_1 + \alpha_1(T) \Psi_1 \\ &+ \varepsilon \Psi_2 + \varepsilon_1 \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{x^2}{l_s^2} \right) \Psi_2 + \beta_1 \Psi_1^3 = 0, \end{aligned} \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} \eta_2 \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{4m_2} \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{x^2}{l_s^2} \right) \Psi_2 + \alpha_2(T) \Psi_2 \\ &+ \varepsilon \Psi_1 + \varepsilon_1 \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{x^2}{l_s^2} \right) \Psi_1 + \beta_2 \Psi_2^3 = 0, \end{aligned} \quad (5b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} &= -\text{rot} \mathbf{A} + \frac{2\pi}{\Phi_0} \left\{ \frac{\hbar^2}{4m_1} n_1(T) \left(\frac{d\phi_1}{dr} - \frac{2\pi \mathbf{A}}{\Phi_0} \right) \right. \\ &+ \varepsilon_1 (n_1(T)n_2(T))^{0.5} \cos(\phi_1 - \phi_2) \\ &\left. + \frac{\hbar^2}{4m_2} n_2(T) \left(\frac{d\phi_2}{dr} - \frac{2\pi \mathbf{A}}{\Phi_0} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (5b)$$

где $l_s^2 = \hbar c / 2eH$ — так называемая магнитная длина, $\phi_{1,2} \mathbf{r}$ — фаза параметра порядка $\Psi_{1,2}(\mathbf{r}) =$

$|\Psi_{1,2}| \exp(i\phi_{1,2})$, $n_{1,2}(T) = 2|\Psi_{1,2}|^2$ — концентрация сверхпроводящих электронов в равновесном состоянии, которые представлены в [25,26]. К этим уравнениям надо добавить еще естественные граничные условия для параметров порядка в виде

$$\mathbf{n} \left(\nabla - \frac{2\pi i \mathbf{A}}{\Phi_0} \right) \Psi_1 = a_{11} \Psi_1 + a_{12} \Psi_2, \quad (6a)$$

$$\mathbf{n} \left(\nabla - \frac{2\pi i \mathbf{A}}{\Phi_0} \right) \Psi_2 = a_{21} \Psi_1 + a_{22} \Psi_2, \quad (6b)$$

$$(\mathbf{n} \times \mathbf{A}) \times \mathbf{n} = \mathbf{H}_0 \times \mathbf{n}, \quad (6b)$$

где a_{ij} ($i, j = 1, 2$) являются константами. Первые два условия соответствуют отсутствию сверхтока через границу двузонного сверхпроводника, а второе соответствует непрерывности нормальной компоненты магнитного поля на границе сверхпроводника с вакуумом.

Рассмотрим поведение однородной двузонной сверхпроводящей пленки постоянной толщины, помещенной в постоянное перпендикулярное магнитное поле. При такой конфигурации модель становится двумерной и аналогично [27] для дальнейшего численного анализа удобно ввести связанные переменные типа

$$W(x, y) = \exp \left(i\kappa \int^x A(\xi, y) d\xi \right), \quad (7a)$$

$$V(x, y) = \exp \left(i\kappa \int^y B(x, \eta) d\eta \right). \quad (7b)$$

Для получения пространственно-дискретной системы уравнений (5) используем улучшенный метод Эйлера [28]. При проведении численных экспериментов размеры сверхпроводящей пленки полагались равными $40\lambda \times 40\lambda$, где λ — длина проникновения магнитного поля для двузонного сверхпроводника и определяется формулой из работы [26]

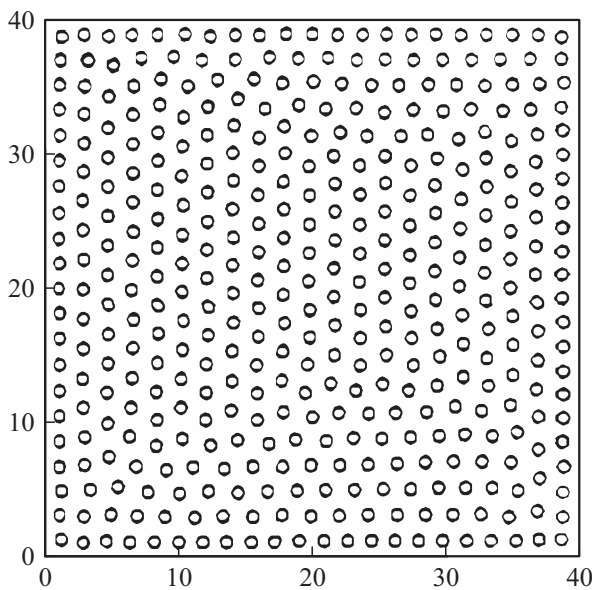
$$\lambda^{-2}(T) = \frac{4\pi e^2}{c^2} \left(\frac{n_1(T)}{m_1} + 2\varepsilon_1 (n_1(T)n_2(T))^{0.5} + \frac{n_2(T)}{m_2} \right). \quad (8)$$

При моделировании также вводятся безразмерные параметры

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \frac{\mathbf{r}}{\lambda}, & \Psi'_{1,2} &= \frac{\Psi_{1,2}}{\Psi_{(1,2)0}}, & \mathbf{A} &= \frac{\mathbf{A}}{\lambda H_c \sqrt{2}}, \\ F'(\Psi'_{1,2}, \mathbf{A}') &= \frac{F(\Psi_{1,2}, \mathbf{A})}{\alpha_0^2 |\Psi_{1,0}|^2 + \alpha_1^2 |\Psi_{2,0}|^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Выражения для $\Psi_{(1,2)0}$, а также для термодинамического магнитного поля H_c представлены в работах [23–26].

Для решения соответствующих дискретных уравнений теории Гинзбурга–Ландау (3 а,б,в) после применения метода Эйлера применяется метод адаптивной сетки [28]. При этом использовались следующие значения параметров: $T_c = 18$ К, $T_{c1} \approx 4.6$ К, $T_{c2} \approx 11.55$ К,



Структура вихревой решетки в перпендикулярном магнитном поле в тонкой пленке двухзонного сверхпроводника LiFeAs с размерами $40\lambda \times 40\lambda$, где λ — длина проникновения магнитного поля.

$\frac{\varepsilon^2}{\gamma_1 \gamma_2 T_c^2} \approx 0.175$, $\eta = \frac{T_c m_2 \varepsilon_1 \gamma_2}{\hbar^2 \varepsilon} \approx -0.016$. При подборе критических температур сверхпроводящих конденсатов двух разных зон пользуемся уравнением (3), а также результатами измерений аномалий теплоемкости в LiFeAs [17]. Параметр, связанный соотношением эффективных масс носителей тока в разных зонах, выбран равным 3. Надо отметить, что подобные параметры были использованы [20] для подгонки параметра анизотропии верхнего критического в LiFeAs, и достигнуто хорошее согласие со существующими экспериментальными данными из литературы.

На рисунке мы представили структуру вихревой решетки в LiFeAs-сверхпроводнике для значения параметра Гинзбурга–Ландау, равного 5. В некоторых местах обнаруживается полная гексагональная структура, т.е. число ближайших соседей равно 6. Однако в некоторых областях вихревой структуры координационное число равно то 5, то 7. По нашему мнению, такое поведение симметрии вихревой решетки объясняется двухзонным характером сверхпроводимости в LiFeAs-соединении и конечными размерами исследуемого образца $40\lambda \times 40\lambda$. Как отмечено выше, подобные экспериментальные результаты недавно были получены в работе [21] с использованием туннельной спектроскопии. Изображение вихревой решетки имеет квазигексагональный характер для разных внешних магнитных полей. Надо отметить, что точная гексагональная структура имеет место в бесконечных сверхпроводниках с одним параметром порядка [29]. Конечность размеров образца и двухзонный характер сверхпроводимости в LiFeAs приводят к изменению симметрии в некоторых местах образца. В вышеприведенных вычислениях не было учтено влияние пиннинг-центров [29] на численные результаты.

Также представляет интерес влияние геометрии образца на распределение вихрей. Другой актуальной задачей является структура вихревой решетки в двухзонных сверхпроводниках наноразмеров [30].

Таким образом, в настоящей работе проведено численное моделирование нестационарных уравнений двухзонной теории Гинзбурга–Ландау во внешнем магнитном поле и проанализирована симметрия вихревой решетки в новом сверхпроводнике LiFeAs. Представлены результаты расчета структуры вихревой решетки в промежуточном состоянии двухзонного сверхпроводника, что обнаруживает изменение координационного числа в некоторых местах образца в отличие от идеальной гексагональной структуры. Полученные результаты представляют интерес с точки зрения структуры вихревой решетки в сверхпроводниках со сложной структурой параметра порядка.

Настоящая работа поддержана исследовательским грантом ТУБИТАК 110Т748.

Список литературы

- [1] Kamihara Y, Hiramatsu H, Nirano M, Kawamura R, Yanagi H, Kamiya T, Hosono H. // J. Am. Chem. Soc. 2006. Vol. 128. P. 10 012.
- [2] Kamihara Y, Watanabe T, Nirano M, Hosono H. // J. Am. Chem. Soc. 2008. Vol. 130. P. 3296.
- [3] Ren Z-A, Lu W, Yang J, Yi W. et al. // Chin. Phys. Lett. 2008. Vol. 25. P. 2215.
- [4] Rotter M, Tegel M, Johrendt D. // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 101. P. 107 006.
- [5] Prozorov R, Ni N, Tanatar M.A. et al. // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78. P. 224 506.
- [6] Wang X.C., Liu Q.Q., Lv Y.X. et al. // Sol. Stat. Commun. 2008. Vol. 148. P. 538.
- [7] Chu C.V, Lorentz B. // Physica. C. 2009. Vol. 469. P. 385.
- [8] Hu, Luo J-Y, Yeh K.-W. et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2008. Vol. 105. P. 14 262.
- [9] Ивановский А.И. // УФН. 2008. Т. 178. С. 1273.
- [10] Садовский М.В. // УФН. 2008. Т. 178. С. 1243.
- [11] Ren Z.A., Zhao Z.X. // Adv. Mater. 2009. Vol. 21. P. 4584.
- [12] Hanaguri T, Niitaka S, Kuroki K, Takagi H. // Science. 2010. Vol. 328. P. 474.
- [13] Пудалов В.М. и др. // УФН. 2008. Т. 181. С. 672.
- [14] Khasanov R, Evtushinsky D, Amado A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. P. 187 005.
- [15] Sasmal K, Lv B, Tang, Z. et al. // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81. P. 144 512.
- [16] Borisenko S.V. et al. // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 105. P. 067 002.
- [17] Wei A, Chen A, Sasmal L. et al. // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81. P. 134 527.
- [18] Shein I.R., Ivanovskii A.I. // Sol. Stat. Commun. 2010. Vol. 150. P. 152.
- [19] Askerzade I. // Unconventional Superconductors: anisotropy and multiband effects. Springer-Verlag, 2012. 177 p.

- [20] *Аскерзаде И.Н., Guclu N., Тагиева Р.Т.* // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 6. С. 114–117.
- [21] *Hanaguri T., Kitagawa K., Matsubayashi K. et al.* // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 85. P. 214 505.
- [22] *Schmid A.* // Phys. Kondens. Matter. 1966. Vol. 5. P. 302–312.
- [23] *Askerzade I.N. et al.* // Supercond. Sci. Technol. 2002. Vol. 15. P. L13.
- [24] *Askerzade I.N., Gencer A.* // Sol. Stat. Commun. 2002. Vol. 123 (1–2). P. 63–67.
- [25] *Askerzade I.N.* // Mod. Phys. Lett. B. 2003. Vol. 17 (1). P. 11–18.
- [26] *Аскерзаде И.Н.* // УФН. 2006. Т. 176. С. 1025–1040.
- [27] *Kwong M.K., Kaper H.G.* // J. Comput. Phys. 1995. Vol. 119. P. 120.
- [28] *Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Martin C.W.* Numerical Grid Generation. 1985. NY: Elsevier.
- [29] *Абрикосов А.А.* // Основы теории металлов. М.: Наука, 1987. С. 520.
- [30] *Juan C.P. et al.* // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 86. P. 024 512.