

Изменение симметрии параметра порядка у поверхности сверхпроводника с s_{\pm} -спариванием

© А.М. Бобков, И.В. Бобкова

Институт физики твердого тела РАН,
Черноголовка, Московская обл., Россия

E-mail: bobkov@issp.ac.ru

Для двухзонного сверхпроводника, в котором реализуется бесщелевое состояние с s_{\pm} -симметрией сверхпроводящего параметра порядка, теоретически исследованы поведение параметра порядка и локальная плотность состояний вблизи непрозрачной границы. Показано, что в широком диапазоне параметров пространственное поведение параметра порядка на поверхности не сводится к стандартному подавлению. Если вероятность межзонного отражения на поверхности порядка или больше вероятности внутризонного отражения, то энергетически может быть более выгодно изменить симметрию сверхпроводящего состояния вблизи поверхности с s_{\pm} - на обычную s -симметрию. Область существования этой поверхностной s -сверхпроводимости довольно чувствительна к относительным значениям межзонного и внутризонного потенциалов спаривания. Показано также, что самосогласованный расчет (т.е. с учетом отличия параметра порядка вблизи поверхности от своего объемного значения) может приводить к качественно иному поведению приповерхностной локальной плотности состояний по сравнению с результатом несамосогласованного расчета.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 09-02-00779.

1. Введение

Открытие нового семейства сверхпроводников на основе железа, которые определенно обладают мультиорбитальной зонной структурой [1–3], резко усилило интерес научного сообщества к проблеме многозонной сверхпроводимости, которая впервые обсуждалась около пятидесяти лет назад [4,5]. Было предложено теоретически [6,7], что сверхпроводники на основе железа реализуют первый пример многозонного сверхпроводящего состояния, в котором между параметрами порядка сверхпроводящих конденсатов, принадлежащими к различным зонам, существует разность фаз. Такое состояние уже обсуждалось ранее [8,9], но в природе пока не наблюдалось. Применительно к сверхпроводникам на основе железа в рамках наиболее простой модели можно считать, что параметры порядка сверхпроводящих конденсатов, существующих на дырочной Ферми-поверхности вокруг Γ -точки и на электронной Ферми-поверхности вокруг M -точки, проявляют разность фаз π . Это так называемое s_{\pm} -состояние, которое получается в ряде расчетов в рамках приближения случайных фаз [7,10,11] и ренорм-групповых подходах [12–14]. В настоящее время s_{\pm} -состояние считается наиболее вероятным кандидатом на роль сверхпроводящего параметра порядка в этих соединениях.

Явления, происходящие в s_{\pm} -сверхпроводниках на поверхностях и границах раздела, сейчас активно изучаются. Теоретически исследовалось формирование андреевских связанных состояний на свободной поверхности s_{\pm} -сверхпроводника [15–18], в S_{\pm}/N (s_{\pm} -сверхпроводник/нормальный металл) [19–22] и $N/S/S_{\pm}$ (нормальный металл/ s -сверхпроводник/ s_{\pm} -сверхпроводник) контактах [23], а также в джозефсоновских контактах, включающих s_{\pm} -сверхпроводники [22,24].

Однако большинство расчетов (за исключением отдельных численных результатов [19]) предполагает несамосогласованный параметр порядка (ОР).

В настоящей работе исследуется пространственное поведение ОР вблизи поверхности. Рассматривается непрозрачная граница чистого двухзонного сверхпроводника, в объеме которого ОР имеет s_{\pm} -симметрию, т.е. разность фаз между параметрами порядка в двух зонах (называемых 1 и 2) равна π . Предполагается, что идущие к границе квазичастицы из зоны 1 и 2 могут быть отражены поверхностью как в ту же зону (внутризонное отражение), так и в другую (межзонное отражение). В такой системе самосогласованно вычисляется сверхпроводящий параметр порядка и рассчитывается локальная плотность состояний (LDOS) вблизи границы.

2. Самосогласованный расчет параметра порядка

Для расчетов используется квазиклассическая теория сверхпроводимости в терминах Риккати-амплитуд [25]. В этой технике запаздывания гриновская функция, значения которой достаточно для полного описания равновесной системы, параметризуется двумя амплитудами Риккати: $\gamma_i(\varepsilon, \mathbf{p}_f, x)$ и $\tilde{\gamma}_i(\varepsilon, \mathbf{p}_f, x)$. Здесь ε — энергия квазичастицы, отсчитанная от уровня Ферми, \mathbf{p}_f — лежащий на Ферми-поверхности (которая может иметь несколько листов) импульс, соответствующий рассматриваемой траектории, x — координата вдоль нормали к поверхности, $i = 1, 2$ — индекс зоны. Риккати-амплитуды подчиняются транспортным уравнениям типа Риккати, которые в рассматриваемом случае чистого

двухзонного сверхпроводника с s_{\pm} -спариванием независимы для двух зон и имеют вид

$$iv_{ix}\partial_x\gamma_i + 2\varepsilon\gamma_i = -\Delta_i^*\gamma_i^2 - \Delta_i, \quad (1)$$

$$\tilde{\gamma}_i(\varepsilon, \mathbf{p}_f, x) = \gamma_i^*(-\varepsilon, -\mathbf{p}_f, x). \quad (2)$$

Здесь v_{ix} — нормальная к поверхности компонента Ферми-скорости квазичастицы из зоны i . Δ_i обозначает ОР в i -ой зоне, который должен находиться самосогласованно.

Граница расположена при $x = 0$ и сверхпроводник занимает полупространство $x > 0$. Для простоты предполагается, что отражение на границе зеркально; следовательно, сохраняется параллельная поверхности компонента квазиимпульса. Тогда для каждого значения параллельной поверхности компоненты квазиимпульса существуют четыре траектории квазичастиц, которые связываются в акте рассеяния на границе. Это две падающие траектории, принадлежащие к зонам 1 и 2 (с $v_{ix} < 0$), и две отраженные траектории (с $v_{ix} > 0$). Уравнение (1) для падающих траекторий решается с учетом асимптотических условий в объеме сверхпроводника, а для отраженных — с учетом граничных условий на поверхности [25,26]. Граничные условия формулируются в терминах матрицы рассеяния S , которая имеет элементы $S_{\mathbf{k},\mathbf{p}_j}$, связывающие отраженные квазичастицы из зоны i , имеющие импульс \mathbf{k}_i , с падающими квазичастицами из зоны j с импульсом \mathbf{p}_j .

В рассматриваемой нами модели S -матрица представляет собой матрицу 2×2 в пространстве траекторий (для каждого значения параллельной поверхности компоненты квазиимпульса). Она подчиняется условию унитарности $SS^+ = 1$ и без потери общности может быть параметризована тремя величинами: R_{12} , Θ и α ,

$$\begin{pmatrix} S_{\mathbf{k}_1\mathbf{p}_1} & S_{\mathbf{k}_1\mathbf{p}_2} \\ S_{\mathbf{k}_2\mathbf{p}_1} & S_{\mathbf{k}_2\mathbf{p}_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{R_0}e^{i\Theta} & i\alpha\sqrt{R_{12}} \\ i\alpha\sqrt{R_{12}} & \sqrt{R_0}e^{-i\Theta} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где R_0 и R_{12} — коэффициенты внутризонного и межзонного отражений соответственно. Они подчиняются ограничению $R_0 + R_{12} = 1$. Фазовые множители $\alpha = \pm 1$ и θ не играют роли в дальнейшем рассмотрении. Хотя в общем случае элементы S -матрицы являются функциями параллельной поверхности компоненты квазиимпульса \mathbf{p}_{\parallel} , мы пренебрегаем этой зависимостью для упрощения анализа. Стоит отметить, что зависимость элементов матрицы рассеяния от \mathbf{p}_{\parallel} качественно не влияет на результаты, полученные для сверхпроводящего ОР вблизи границы. Чувствительность LDOS к этой зависимости обсуждается далее.

Чтобы получить пространственные профили сверхпроводящего параметра порядка, необходимо подставить рассчитанные значения Риккати-амплитуд в уравнение

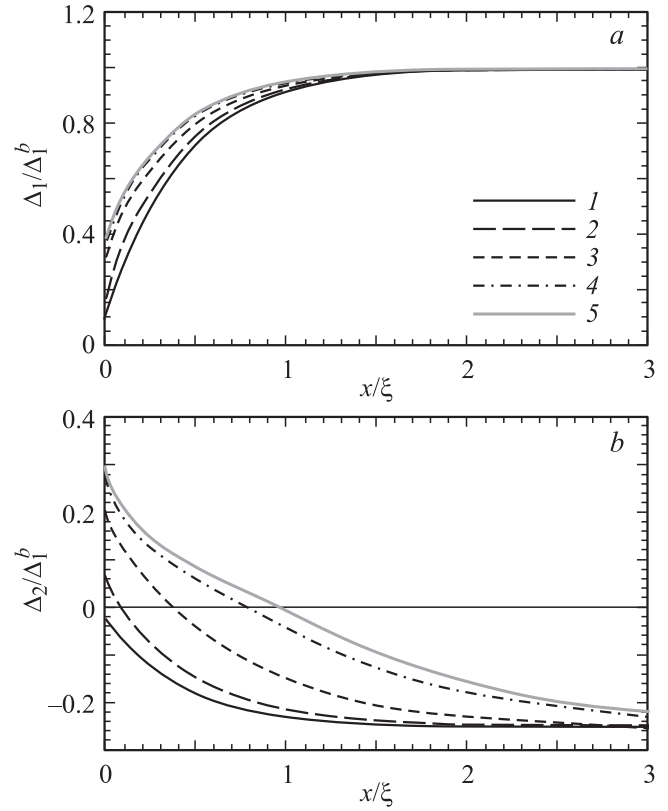


Рис. 1. Пространственная зависимость параметра порядка для зон 1 (a) и 2 (b) при различных значениях потенциала межзонного рассеяния $\lambda_{12} \cdot R_{12} = 1$, $\Delta_2^b = -0.25\Delta_1^b$, температура $T = 0.3\Delta_1^b$. Внутризонные потенциалы спаривания λ_{ii} подобраны для сохранения Δ_1^b и Δ_2^b при изменении λ_{12} . $\lambda_{12} = 0.006$ (1), 0.03 (2), 0.01 (3), 0.004 (4) и 0.002 (5).

самосогласования

$$\Delta_i(x) = -T \sum_{\varepsilon_n, j} \lambda_{ij} \left\langle \frac{-2i\pi\gamma_j \mathbf{p}_f}{1 + \gamma_i \mathbf{p}_f \gamma_j \mathbf{p}_f} \right\rangle_{\mathbf{p}_f} \quad (4)$$

и далее итерировать численно систему уравнений (1) и (4), пока решение не сойдется. В уравнении (4) $\lambda_{ii} < 0$ — это безразмерный потенциал спаривания в зоне i и $\lambda_{12} = \lambda_{21}$ — безразмерный потенциал, характеризующий рассеяние пар между зонами 1 и 2. Мы полагаем $\lambda_{12} > 0$, так как при этом условии в объеме сверхпроводника реализуется s_{\pm} -тип спаривания. ε_n — фермионная мацубаровская частота, $\langle \dots \rangle_{\mathbf{p}_f}$ означает усреднение по Ферми-поверхности аномальной гриновской функции, т.е. \mathbf{p}_f включает в себя как падающие траектории \mathbf{p} , так и отраженные траектории \mathbf{k} . В конкретном расчете предполагаются цилиндрические Ферми-поверхности, хотя это не оказывает качественного влияния на результаты.

Пространственные профили параметра порядка, рассчитанные, как описано выше, представлены на рис. 1–3. Для определенности предполагается, что в объеме сверхпроводника $|\Delta_1^b| > |\Delta_2^b|$. Рис. 1, a–3, a демонстри-

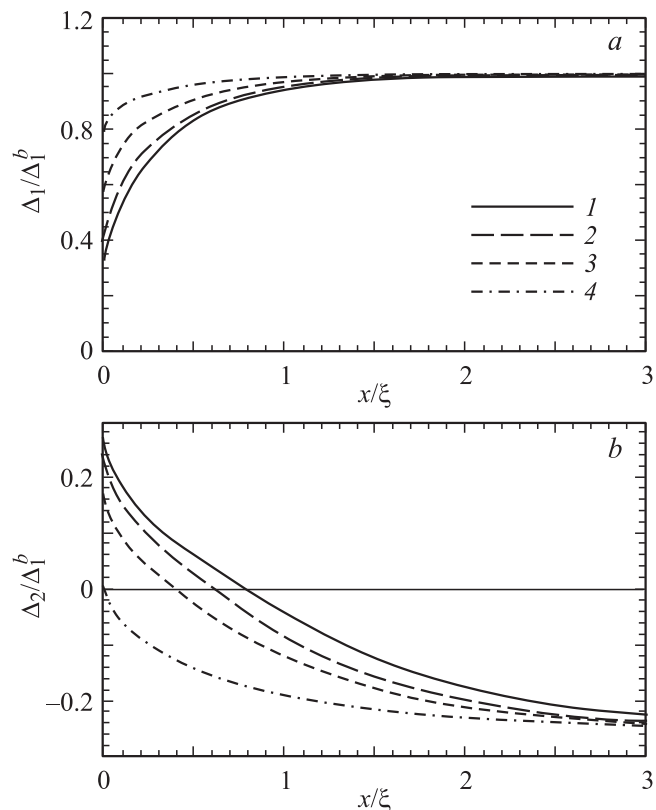


Рис. 2. Пространственная зависимость параметра порядка для зон 1 (a) и 2 (b) при различных значениях коэффициента межзонного отражения R_{12} . $\Delta_2^b = -0.25\Delta_1^b$, $T = 0.3\Delta_1^b$, $(\lambda_{12}, \lambda_{11}, \lambda_{22}) = (0.004, -0.2771, -0.2241)$. $R_{12} = 1$ (1), 0.8 (2), 0.5 (3) и 0.2 (4).

руют пространственные профили ОР для зоны 1, а рис. 1, b-3, b — для зоны 2.

Рис. 1 показывает зависимость эффекта от величины потенциала межзонного рассеяния пар λ_{12} . В то время как больший параметр порядка (в зоне 1) просто подавляется у поверхности и величина этого подавления слабо чувствительна к значению λ_{12} , меньший параметр порядка (в зоне 2) меняет знак у поверхности. Таким образом, существует приповерхностная область порядка сверхпроводящей длины когерентности ξ , где s_{\pm} -сверхпроводимость замещается сверхпроводимостью s -типа. Причиной этого изменения знака является наличие межзонного отражения на границе, так как если квазичастица при отражении переходит в другую зону, то энергетически более выгодно минимизировать градиент ОР вдоль ее траектории. Здесь следует отметить, что родственный эффект изменения знака меньшего параметра порядка для двухзонного сверхпроводника обсуждался для задачи о влиянии магнитных примесей на объемный параметр порядка и критическую температуру в двухзонном сверхпроводнике [8].

Рис. 1 демонстрирует, что чем меньше величина λ_{12} , тем шире область существования сверхпроводимости s -типа. Это можно качественно понять на основе урав-

нения самосогласования (4): фаза меньшего параметра порядка в значительной степени определяется фазой доминирующего ОР через член, пропорциональный λ_{12} . Чем слабее это взаимодействие, тем легче изменить фазу на π . В конкретных вычислениях мы считаем, что $|\lambda_{12}| \ll |\lambda_{11}|$. Такой выбор параметров согласуется с экспериментальными оценками потенциала спаривания для FeSe [27].

Кривые, представленные на рис. 1, получены в предположении чисто межзонного отражения $R_{12} = 1$, когда эффект изменения симметрии параметра порядка наиболее силен. Для того чтобы исследовать более реалистичную ситуацию, необходимо учесть ненулевую вероятность внутризонного отражения. Соответствующие результаты приведены на рис. 2. Видно, что область существования сверхпроводимости s -типа уменьшается при увеличении $R_0 = 1 - R_{12}$. Однако эффект остается заметным, даже если вероятность внутризонного отражения превышает 50%. Поэтому мы полагаем, что самосогласованное рассмотрение ОР существенно для поликристаллических образцов, например, при анализе спектроскопических данных.

Значительная область приповерхностной сверхпроводимости s -типа может существовать только при условии, что в объеме сверхпроводника параметры порядка в

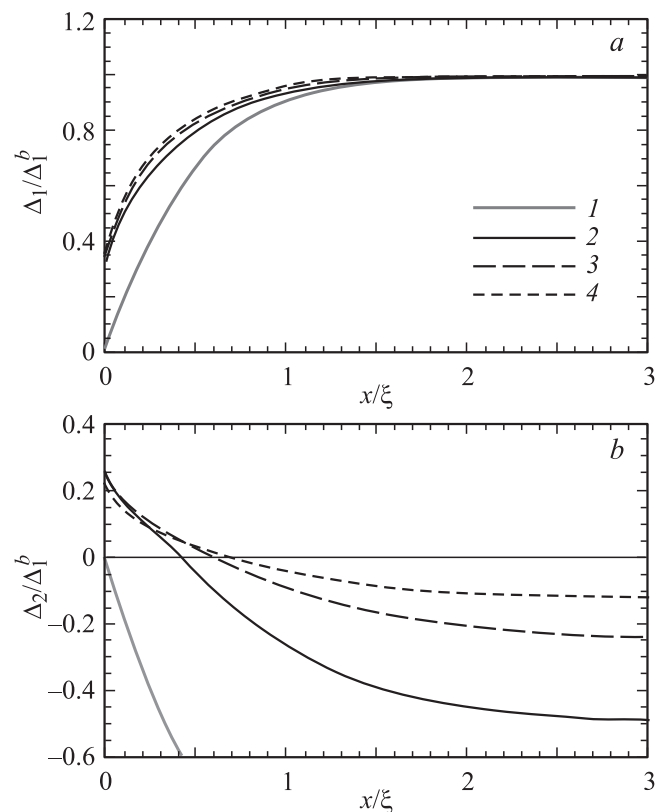


Рис. 3. Пространственная зависимость параметра порядка для зон 1 (a) и 2 (b) при различных значениях отношения Δ_2^b/Δ_1^b . $T = 0.3\Delta_1^b$, $\lambda_{12} = 0.005$, $R_{12} = 1$. $\Delta_2^b/\Delta_1^b = -1$ (1), -0.5 (2), -0.25 (3) и -0.125 (4).

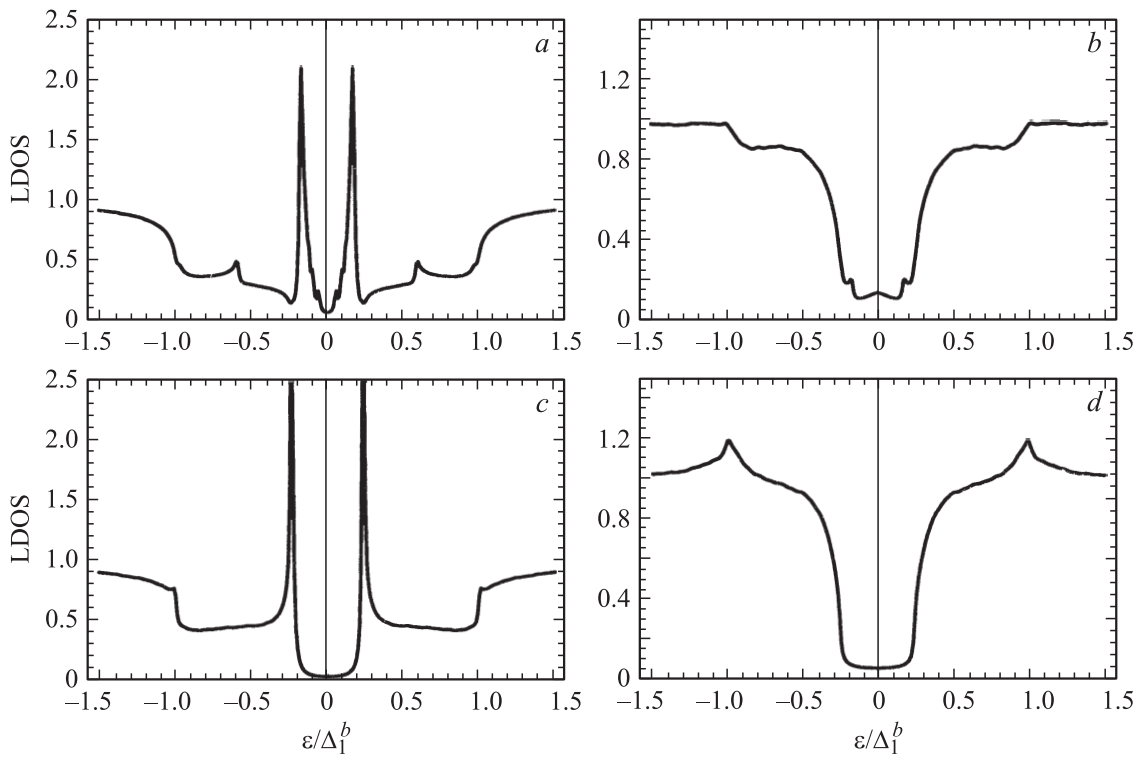


Рис. 4. Локальная плотность состояний на поверхности как функция энергии квазичастицы для зон 1 (*a, c*) и 2 (*b, d*). *a, b* — результаты самосогласованных расчетов, *c, d* — для несогласованного параметра порядка. $(\lambda_{12}, \lambda_{11}, \lambda_{12}) = (0.004, -0.2771, -0.2241)$, $\Delta_2^b = -0.25\Delta_1^b$, $T = 0.3\Delta_1^b$, $R_{12} = 0.5$.

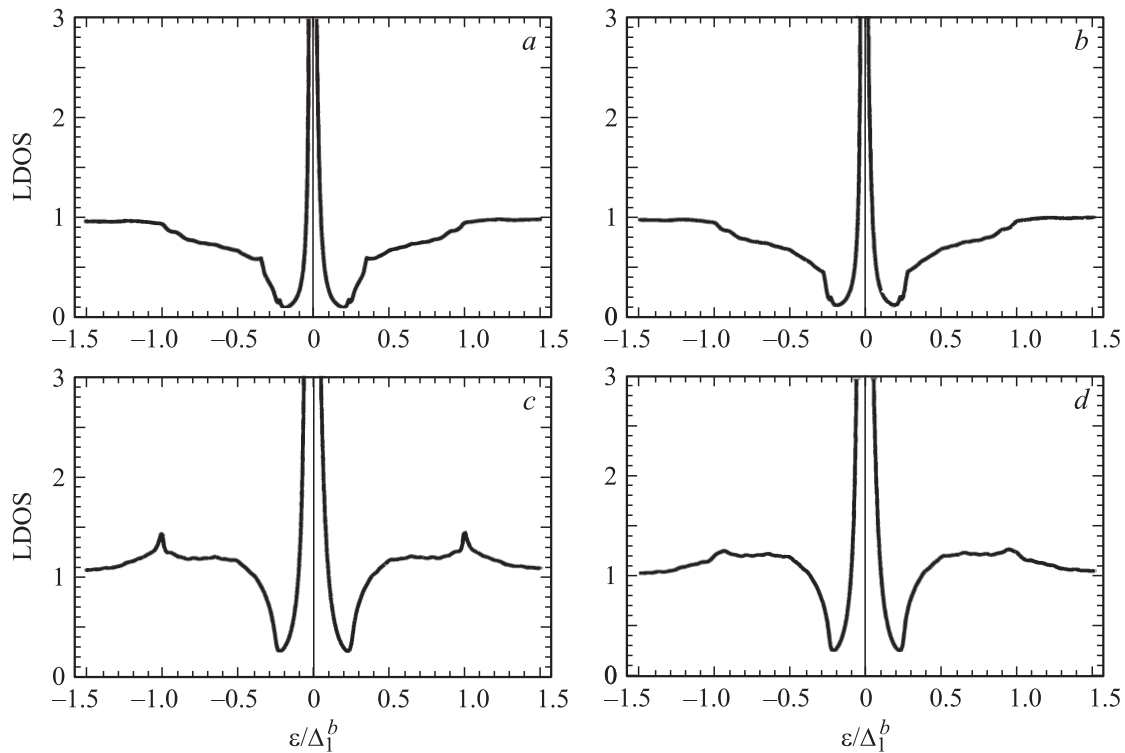


Рис. 5. То же, что и на рис. 4, для $R_{12} = 1$.

двух зонах сильно различаются по абсолютной величине. В случае если $|\Delta_2^b|$ стремится к $|\Delta_1^b|$, область сверхпроводимости s -типа уменьшается, и, наконец, приповерхностное поведение ОП сводится к стандартному подавлению для двух зон при $|\Delta_2^b| = |\Delta_1^b|$. Наоборот, с уменьшением отношения $|\Delta_2^b|/|\Delta_1^b|$ — поверхностная область становится шире вплоть до насыщения при некотором значении этого отношения ($\sim 1/4$ для рассматриваемого нами случая). Этот эффект проиллюстрирован на рис. 3.

3. Локальная плотность состояний вблизи поверхности

Перейдем к обсуждению того, как влияет приповерхностное изменение симметрии ОП на LDOS. На рис. 4 и 5 изображена LDOS на поверхности (при $x = 0$) как функция энергии квазичастицы. Части *a, c* и *b, d* этих рисунков демонстрируют LDOS для зон 1 и 2 соответственно. На частях *a, b* каждого рисунка приведены результаты самосогласованных расчетов LDOS. Эти кривые следует сравнить с соответствующими рисунками на частях *c, d*, где LDOS вычислена при тех параметрах, но для несамосогласованного ОП, равного своему значению в объеме. Результаты, представленные на рис. 4, соответствуют случаю $R_{12} = 0.5$, а рис. 5 иллюстрирует случай полного межзонного отражения $R_{12} = 1$.

Как уже обсуждалось в литературе, если $R_{12} \neq 0$, то в системе существуют поверхностные андреевские связанные состояния, которые проявляют себя пиками в LDOS. Если $R_{12} \rightarrow 1$, то энергия поверхностных связанных состояний стремится к нулю, что ясно видно из рис. 5. В этом случае в LDOS доминирует сильный пик при $\epsilon = 0$ и различие между самосогласованными и несамосогласованными расчетами не является качественным. Можно только отметить, что особенности LDOS, соответствующие краям сверхпроводящей щели, размываются при самосогласованном вычислении (рис. 5, *c*). В то же время для промежуточной величины межзонного отражения существуют качественные различия между самосогласованными и несамосогласованными результатами, как это видно из рис. 4. Их можно суммировать следующим образом: 1) если при несамосогласованном расчете пики LDOS, соответствующие связанным состояниям, разделены четко определенной щелью, то учет самосогласования трансформирует эту внутреннюю щель в V -образную особенность, типичную для сверхпроводников, в которых параметр порядка обращается в нуль для некоторых направлений на поверхности Ферми; 2) при учете самосогласования и подщелевой области появляются дополнительные особенности (маленькие пики). Здесь следует отметить, что в отличие от результатов для пространственного поведения ОП форма LDOS может быть очень чувствительна к деталям микроскопической модели, описывающей поверхность, в частности к конкретной зависимости элементов матрицы

рассеяния от \mathbf{p}_{\parallel} . Однако, если конкретная микроскопическая модель приводит к существованию внутренней щели в LDOS, она неизбежно трансформируется в V -образное поведение при самосогласованном расчете. Причиной этого является возникновение вблизи границы некоторой линии, на которой меньший параметр порядка обращается в нуль.

4. Заключение

Для двухзонного s_{\pm} -сверхпроводника теоретически исследовано поведение ОП на непрозрачной границе. Показано, что если на поверхности существует вероятность межзонного отражения, значение которой порядка или больше вероятности внутризонного отражения, то симметрия сверхпроводящего параметра порядка на границе меняется: параметр порядка, абсолютное значение которого в объеме сверхпроводника меньше, меняет знак вблизи поверхности. Эта область приповерхностной сверхпроводимости s -типа максимальна для чисто межзонного отражения на границе и уменьшается с увеличением вероятности внутризонного отражения. Эффект тем более выражен, чем меньше модуль потенциала межзонного рассеяния пар. Если изменение симметрии параметра порядка вблизи поверхности происходит, расчеты LDOS следует производить самосогласованно по параметру порядка, так как наличие пространственной линии нуля параметра порядка оказывает качественное влияние на ее форму.

Список литературы

- [1] E.M. Brüning, C. Krellner, M. Baenitz, A. Jesche, F. Steglich, C. Geibel. Phys. Rev. Lett. **101**, 117 206 (2008).
- [2] J. Zhao, Q. Huang, C. de la Cruz, S. Li, J.W. Lynn, Y. Chen, M.A. Grenn, G.F. Chen, G. Li, Z.C. Li, J.L. Luo, N.L. Wang, P. Dai. Nature Mater. **7**, 953 (2008).
- [3] L. Pourovskii, V. Vildosola, S. Biermann, A. Georges. Europhys. Lett. **84**, 37 006 (2008).
- [4] H. Suhl, B.T. Matthias, L.R. Walker. Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
- [5] В.А. Москаленко. ФММ **8**, 503 (1959).
- [6] I.I. Mazin, D.J. Singh, M.D. Johannes, M.H. Du. Phys. Rev. Lett. **101**, 057 003 (2008).
- [7] K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, H. Aoki. Phys. Rev. Lett. **101**, 087 004 (2008).
- [8] A.A. Golubov, I.I. Mazin. Phys. Rev. B **55**, 15 146 (1997).
- [9] D.F. Agterberg, V. Barzykin, L.P. Gor'kov. Phys. Rev. B **60**, 14 868 (1999).
- [9] V. Cvetković, Z. Tešanović. Europhys. Lett. **85**, 37 002 (2009).
- [11] S. Graser, T.A. Maier, P.J. Hirschfeld, D.J. Scalapino. New J. Phys. **11**, 025 016 (2009).
- [12] A.V. Chubukov, D. Efremov. I. Eremin. Phys. Rev. B **78**, 134 512 (2008).

- [13] F. Wang, H. Zhai, Y. Ran, A. Vishwanath, D.-H. Lee. Phys. Rev. Lett. **102**, 047 005 (2009).
- [14] V. Cvetković, Z. Tešanović. Phys. Rev. B **80**, 024 512 (2009).
- [15] P. Ghaemi, F. Wang, A. Vishwanath. Phys. Rev. Lett. **102**, 157 002 (2009).
- [16] Y. Nagai, N. Hayashi. Phys. Rev. B **79**, 224 508 (2009).
- [17] S. Onari, Y. Tanaka. Phys. Rev. B **79**, 174 526 (2009).
- [18] Y. Nagai, N. Hayashi, M. Macgida. ArXiv: 0910.4040.
- [19] H.Y. Choi, Y. Bang. ArXiv: 0807.4604.
- [20] J. Linder, A. Sudbo. Phys. Rev. B **79**, 020 501(R) (2009).
- [21] A.A. Golubov, A. Brinkman, Y. Tanaka, I.I. Mazin, O.V. Dolgov. Phys. Rev. Lett. **103**, 077 003 (2009).
- [22] I.B. Sperstad, J. Linder, A. Sudbo. Phys. Rev. B **80**, 144 507 (2009).
- [23] X.Y. Feng, T.K. Ng. Phys. Rev. B **79**, 184 503 (2009).
- [24] W.F. Tsai, D.X. Yao, B.A. Bernevig, J.P. Hu. Phys. Rev. B **80**, 012 511 (2009).
- [25] M. Eschrig. Phys. Rev. B **61**, 9061 (2000).
- [26] M. Eschrig. Phys. Rev. B **80**, 134 511 (2009).
- [27] R. Khasanov, M. Bendele, A. Amato, K. Conder, H. Keller, H.-H. Klauss, H. Luetkens, E. Pomjakushina. ArXiv: 0912.0471.