Письма в ЖЭТФ, том 76, вып. 9, с. 678 – 682

О граничных условиях к уравнениям Гинзбурга–Ландау на поверхности двойникования $(d+s)$-сверхпроводников

Е. А. Шаповал

Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы, 117334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 сентября 2002 г.

После переработки 14 октября 2002 г.

На основе микроскопической теории сверхпроводимости БКШ получены эффективные граничные условия к уравнениям Гинзбурга–Ландау на плоскости двойникования $(d+s)$-сверхпроводников орторомбической симметрии. Найдены области значений параметров орторомбической деформации, при которых параметр порядка ведет себя по-разному при переходе через двойниковую поверхность.

PACS: 74.20.–z

В последнее время уделяется большое внимание необычным высокотемпературным сверхпроводникам орторомбической симметрии [1 – 4]. Это вызвано, в частности, наблюдаемым нарушением тетрагональной симметрии плоскостей CuO_2 в YBCO за счет появления цепочек CuO, приводящих к орторомбической деформации электронного спектра и парного взаимодействия, что, в свою очередь, приводит к появлению s-составляющей параметра порядка, если без деформации он d-симметричен. Два возможных направления этих цепочек приводят к образованию поверхностей двойникования, разделяющих так называемые двойниковые домены с разным направлением цепочек. Целый ряд работ посвящен исследованию их поведению вблизи двойниковой плоскости [4 – 8], однако до сих пор открытым остается вопрос о граничных условиях к уравнениям Гинзбурга–Ландау (ГЛ) на поверхности двойникования. Оказывается, что граничные условия позволяют ответить на вопрос, как ведет себя параметр порядка орторомбических сверхпроводников при переходе в соседний домен.

Для рассматриваемых здесь квазидвумерных сверхпроводников введем орторомбичность, положив дисперсию энергии электронов (квазичастиц) равной

$$\epsilon(\mathbf{k}) = 2t(k_x^2 + k_y^2 \mp 2ak_xk_y) = \\ = 2t\left((1\mp a){k'}_x^2 + (1\pm a){k'}_y^2\right), \qquad (1)$$

где верхний и нижний знаки относятся соответственно к правому и левому доменам, а $k'_{x,y} = (k_y \pm k_x)/\sqrt{2}$. Соответствующие поверхности Ферми (при $a = 0.5$) показаны в верхней части рис.1.

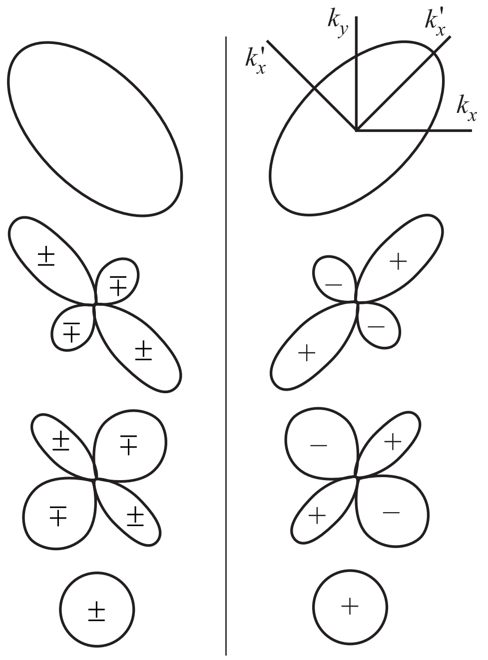

Рис.1. Поверхности Ферми (вверху), параметры порядка (второй ряд) и их d- и s-компоненты в соседних доменах (внизу) при $a = b = 0.5$. Знаки $(\pm)$ соответствуют четному (верхний знак) или нечетному (нижний знак) решениям

Уравнения для импульсов на поверхности Ферми можно описать, введя в правом и левом доменах отсчитываемые от k'_x квазиугловые параметры $\theta_{1,2}$:

$$k'_x = k_F\sqrt{1\pm a}\cos\theta_{1,2}, \quad k'_y = k_F\sqrt{1\mp a}\sin\theta_{1,2}, \quad (2)$$

где $k_F^2 = \sqrt{\epsilon_F/2t(1-a^2)}$ – квазиферми-импульс, а ϵ_F – энергия Ферми. Введение квазиуглового параметра θ удобно прежде всего тем, что усреднение по эллиптической поверхности Ферми с учетом локальной плотности состояний существенно упрощается:

$$<\cdots>_F = \frac{1}{\nu}\int \frac{dS}{v}(\cdots) = \int_{-\pi}^{\pi}\frac{d\theta}{2\pi}(\cdots), \qquad (3)$$

где v – локальная скорость, а ν – полная плотность состояний на поверхности Ферми.

Из уравнения (2) следуют выражения для импульсов в исходной системе:

$$\begin{aligned} k_x^{(1,2)} &= k_F \cos(\theta_{1,2} - \alpha_{1,2}), \\ k_y^{(1,2)} &= k_F \cos(\theta_{1,2} - \alpha_{1,2}), \end{aligned} \qquad (4)$$

где индексы $(1,2)$ по-прежнему относятся соответственно к правому и левому доменам, а $\operatorname{tg}\alpha_1 = \operatorname{ctg}\alpha_2 = \sqrt{(1-a)/(1+a)}$. Отсюда следует, что $\alpha_1 + \alpha_2 = \pi/2$. Введем $\alpha = \alpha_2 - \alpha_1$, тогда $\alpha_{1,2} = \pi/4 \mp \alpha/2$, а $\sin\alpha = a$, $(-\pi/2 < \alpha < \pi/2)$.

При проходе электрона через плоскость двойникования в соседним домен сохраняются его энергия и y-проекция его импульса. Из уравнения (4) и сделанного выше определения α следует, что $\theta_2 - \theta_1 = \alpha$. Определяя $\theta = (\theta_1 + \theta_2)/2 + \pi/4$, получаем

$$k_x^{(1,2)} = k_F \cos(\theta \mp \alpha); \quad k_y^{(1,2)} = k_F \sin\theta. \qquad (5)$$

Проводя аналогичные вычисления для скорости $\mathbf{v} = \partial\epsilon(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$, находим, что на поверхности Ферми

$$v_x^{(1,2)} = v_F \cos\theta; \quad v_y^{(1,2)} = v_F \sin(\theta \mp \alpha), \qquad (6)$$

где $v_F = 2\sqrt{2t\epsilon_F}$ – ферми-скорость. Отсюда видно, что электрон при переходе в соседний домен сохраняет перпендикулярную плоскости двойникования проекцию своей скорости . Более того, в работе [6] было показано, что, по крайней мере в модели сильной связи, электрон проходит плоскость двойникования свободно, без отражения.

Эффективные граничные условия к уравнениям ГЛ определяются из линеаризованного уравнения для параметра упорядочения $\Delta^*(\mathbf{p}_f, \mathbf{r})$ вблизи температуры сверхпроводящего перехода:

$$\begin{aligned} \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{p}', \mathbf{p}''} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}'') \times \\ &\times \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{p}', \mathbf{r}') \pi T \sum_{\omega} \Phi_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{p}''; \mathbf{r}', \mathbf{p}'), \end{aligned} \qquad (7)$$

где $\mathbf{p}$ – ферми-векторы, определяющие зависимость параметра порядка от направления, суммирование по ним означает на самом деле интегрирование по поверхности Ферми с учетом локальной плотности состояний, V – потенциал взаимодействия электронов, ω – мацубаровские частоты, а функции Φ_ω определяются через функции Грина в нормальном состоянии:

$$\begin{aligned} \Phi_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{p}; \mathbf{r}', \mathbf{p}') &= \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} G_\omega(\mathbf{p}' + \mathbf{q}'/\mathbf{2}, \mathbf{p} + \mathbf{q}/\mathbf{2}) \times \\ &\times G_{-\omega}(-\mathbf{p}' + \mathbf{q}'/\mathbf{2}, -\mathbf{p} + \mathbf{q}/\mathbf{2}) \exp i(\mathbf{q}'\mathbf{r}' - \mathbf{q}\mathbf{r}) \end{aligned} \qquad (8)$$

Потенциал межэлектронного взаимодействия можно разложить по системе взаимно ортогональных, нормированных на поверхности Ферми функций:

$$V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \sum_n V_n \phi_n(\mathbf{p}) \varphi_n(\mathbf{p}'), \qquad (9)$$

где положительные V_n соответствуют притяжению. Как было показано Покровским [9], вблизи температуры перехода $(1 - T/T_c \ll 1)$ в приближении слабой связи можно ограничиться главным членом этого разложения, соответствующего максимальному значению V_n, тогда параметр упорядочения $\Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{p})$, где опущен индекс у функции $\varphi(\mathbf{p})$.

Простейшей такой функцией, удовлетворяющей условию орторомбической симметрии и нормированной на поверхности Ферми, является функция, которую справа и слева от плоскости двойникования можно написать в виде

$$\varphi_{1,2} = \frac{\pm\sqrt{2}\cos 2\theta_{1,2} + b}{\sqrt{1+b^2}} = \frac{\pm\sqrt{2}\sin(2\theta \mp \alpha) + b}{\sqrt{1+b^2}}. \qquad (10)$$

Если s–компонента $|b| < \sqrt{2}$, энергетическая щель имеет нули, в противном случае, при $|b| > \sqrt{2}$, щель нигде в нуль не обращается. Функция $\varphi(\theta)$ по обе стороны поверхности двойникования показана во втором ряду на рис.1, а ниже ее d- и s-компоненты. Знаки указывают на их поведение при четном или нечетном решении пространственной функции $\Psi(\mathbf{r})$.

Ядро линеаризованного интегрального уравнения проще всего вычислить методом квазиклассических траекторий, обобщенным на анизотропные сверхпроводники [10, 11]. Учитывая, что все пространственные величины зависят только от координаты x, находим:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \nu V_0 \int_0^\infty K_{11}(x - x')\Psi(x')dx' + \\ &+ \nu V_0 \int_{-\infty}^0 K_{12}(x - x')\Psi(x')dx'; \quad x > 0; \\ \Psi(x) &= \nu V_0 \int_0^\infty K_{21}(x - x')\Psi(x')dx' + \\ &+ \nu V_0 \int_{-\infty}^0 K_{22}(x - x')\Psi(x')dx'; \ x < 0, \end{aligned} \qquad (11)$$

где $K_{11} = K_{22}$ учитывают вклад электронных траекторий в пределах одного домена, а $K_{12} = K_{21}$ учитывают вклад траекторий электронов, прошедших из одного домена в другой через плоскость двойникования:

$$
\begin{gathered}
K_{11}(x) = \\
= \sum_{n=-\omega_D/2\pi T_c}^{\omega_D/2\pi T_c} \left\langle \frac{(\varphi_{1,2}(\theta))^2}{|\cos\theta|} \exp\left|\frac{(2n+1)x}{\cos\theta}\right| \right\rangle_F ; \\
K_{12}(x) = \\
= \sum_{n=-\omega_D/2\pi T_c}^{\omega_D/2\pi T_c} \left\langle \frac{(\varphi_1(\theta)\varphi_2(\theta))}{|\cos\theta|} \exp\left|\frac{(2n+1)x}{\cos\theta}\right| \right\rangle_F .
\end{gathered}
\tag{12}
$$

Для упрощения формул здесь и ниже длина измеряется в единицах длины когерентности $\xi_0 = v_F/2\pi T_c$, а ω_D – обычная в модели БКШ дебаевская частота, служащая для обрезания логарифмически расходящихся интегралов и сумм.

В силу симметрии эта система имеет два линейно независимых решения, четное и нечетное, каждое из которых является единственным решением (с точность до произвольного коэффициента) уравнения

$$
\begin{gathered}
\Psi^{\pm}(x) = \nu V_0 \times \\
\times \int_0^\infty \left(K_{11}(x-x) \pm K_{12}(x+x')\right) \Psi^{\pm}(x')\, dx' = \\
= \nu V_0 \int_0^\infty K^{\pm}(x,x')\Psi^{\pm}(x')\, dx'.
\end{gathered}
\tag{13}
$$

Здесь и ниже индексы $(\pm)$ относятся соответственно к четному и нечетному решениям.

Эффективные граничные условия для уравнения ГЛ следуют из асимптотического решения этого интегрального уравнения при $x \gg 1$. Непосредственной подстановкой легко убедиться, что таким асимптотическим решением является линейная функция $\Psi \sim x + \lambda$, где λ – экстраполяционная длина, определяющая граничное условие $\Psi'(0) = \Psi(0)/\lambda$. Наша задача как раз и состоит в вычислении этой экстраполяционной длины из уравнения (13), что мы сделаем, используя вариационное приближение, предложенное Свидзинским [12,13]. Согласно этому методу, в первом приближении экстраполяционную длину можно представить в виде

$$
\lambda = \frac{H + G^2/E}{F + G}, \tag{14}
$$

где

$$
\begin{aligned}
E &= \int_0^\infty \left[1 - \nu V_0 \int_0^\infty K(x,x')\, dx'\right] dx, \\
F &= \int_0^\infty \left[1 - \nu V_0 \int_0^\infty K(x,x')\, dx'\right] x\, dx, \\
G &= \int_0^\infty \left[\nu V_0 \int_0^\infty K(x,x')\, dx' - x\right] dx, \\
H &= \int_0^\infty \left[\nu V_0 \int_0^\infty K(x,x')\, dx' - x\right] x\, dx,
\end{aligned}
\tag{15}
$$

В рассматриваемой нами задаче

$$
\begin{aligned}
E^{\pm} &= \frac{\pi^2}{8} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} |\cos\theta| \left(\varphi_1^2(\theta) \mp \varphi_1(\theta)\varphi_2(\theta)\right), \\
F^{\pm} &= \frac{7\zeta(3)}{8} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos^2\theta \left(\varphi_1^2(\theta) \mp \varphi_1(\theta)\varphi_2(\theta)\right), \\
G^{\pm} &= \frac{7\zeta(3)}{8} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos^2\theta \left(\varphi_1^2(\theta) \pm \varphi_1(\theta)\varphi_2(\theta)\right), \\
H^{\pm} &= \frac{\pi^4}{96} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} |\cos^3\theta| \left(\varphi_1^2(\theta) \pm \varphi_1(\theta)\varphi_2(\theta)\right).
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Здесь

$$
\begin{gathered}
\varphi_1^2(\theta) = \phi_2^2(\theta) = 1 - \cos 2\alpha \cos^2\beta \cos 4\theta - \\
- \sqrt{2} \sin\alpha \sin 2\beta \cos 2\theta + \cdots , \\
\varphi_1(\theta)\varphi_2(\theta) = \cos^2\beta(\cos 4\theta - \cos 2\alpha) + \\
+ \sin^2\beta - \sqrt{2} \sin\alpha \sin 2\beta \cos 2\theta + \cdots ,
\end{gathered}
\tag{17}
$$

где многоточием обозначены члены, нечетные по θ, а потому исчезающие при интегрировании. Кроме того, для удобства мы параметр орторомбической деформации параметра порядка, b, описывающего его s-компоненту, положили равным $b = \operatorname{tg}\beta\,(-\pi/2 \le \beta \le \pi/2)$.

Используя (17), можно вычислить $E^{\pm}, F^{\pm}, G^{\pm}, H^{\pm}$, а затем найти из (14) экстраполяционные длины $\lambda^{\pm}$. Получаемые алгебраические выражения столь громоздки, что приводить их здесь нет смысла, проще вычислить экстраполяционные длины из уравнений (16), (17) при заданных параметрах орторомбической деформации $a = \sin\alpha$ и $b = \operatorname{tg}\beta$. На рис.2 показаны зависимости λ^+ и λ^- от параметра b при различных положительных значениях параметра a. При отрицательных a длины экстраполяции $\lambda^{\pm}(a,b) = \lambda^{\pm}(-a,-b)$.

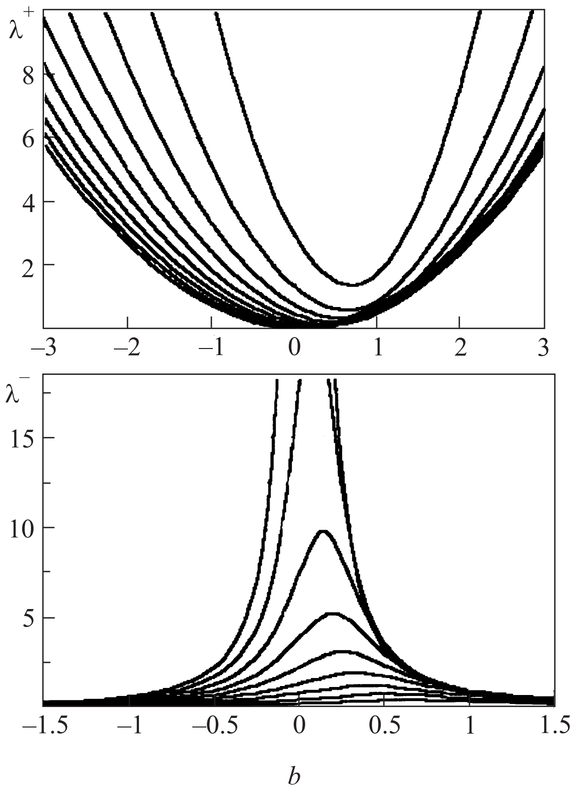

Рис.2. Относительные длины экстраполяции для четного (вверху) и нечетного (внизу) решений уравнения(13) в единицах $\xi_0 = v_F/2\pi T_c$ в зависимости от параметра орторомбической деформации (s—компоненты параметра порядка) b при различных значениях параметра орторомбической деформации поверхности Ферми a от 0 (верхние кривые) до 0.9 с интервалами 0.1

Из полученных результатов следуют граничные условия на поверхности двойникования:

$$\mathbf{n}\left(\nabla - \frac{ie}{c}\mathbf{A}\right)\Psi(\mathbf{r})|_{+0} =$$
$$= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\lambda^+} + \frac{1}{\lambda^-}\right)\Psi(+0) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\lambda^+} - \frac{1}{\lambda^-}\right)\Psi(-0),$$
$$\mathbf{n}\left(\nabla - \frac{ie}{c}\mathbf{A}\right)\Psi(\mathbf{r})|_{-0} =$$
$$= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\lambda^-} - \frac{1}{\lambda^+}\right)\Psi(+0) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\lambda^+} + \frac{1}{\lambda^-}\right)\Psi(-0). \tag{18}$$

Они, естественно, удовлетворяют условию сохранению тока через поверхность.

Из граничных условий (18) следует, что функционал ГЛ для свободной энергии для сверхпроводника включает вызванную двойникованием плотность поверхностной энергии, равную в соответствующих единицах

$$\mathcal{F}_{\mathrm{surf}} = \frac{1}{2\lambda^+}\left|\Psi(+0) + \Psi(-0)\right|^2 +$$
$$+ \frac{1}{2\lambda^-}\left|\Psi(+0) - \Psi(-0)\right|^2. \tag{19}$$

Таким образом, четность или нечетность пространственного поведения параметра порядка относительно поверхности двойникования зависит от соотношения длин экстраполяции, λ^+ и λ^-. На рис.3 показана эллипсоподобная кривая, разделяющая об-

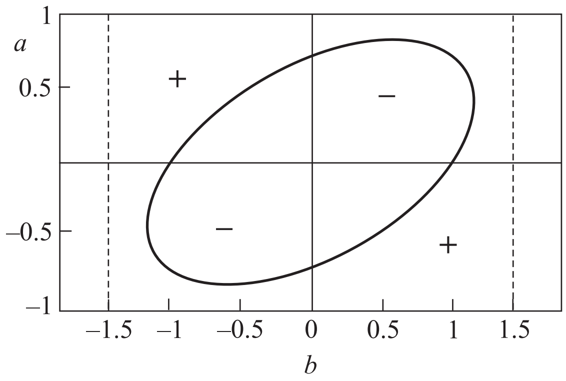

Рис.3. Области четного (вне эллипсоподобной кривой) и нечетного (внутри нее) поведения пространственного решения в зависимости от параметров орторомбической деформации a и b. Вертикальным штрихом отделены области, где модуль s-компоненты $|b| > \sqrt{2}$, так что там энергетическая щель не имеет нулей

ласти нечетного (внутри) и четного (вовне) поведения $\Psi(\mathbf{r})$ в зависимости от значений параметров орторомбической деформации a и b. В первом случае доминирует d—-компонента параметра порядка, она, согласно определению (10), иллюстрируемую на рис.1, лишь деформируется при переходе через поверхность двойникования за счет орторомбической деформации поверхности Ферми, при этом s-компонента меняет знак, что подтверждает общепринятое предположение о поведении компонент параметра порядка $(d + s)$-сверхпроводников относительно двойниковой границы [5–8]. Если пространственное решение $\Psi(\mathbf{r})$ четно, это означает доминирование s-компоненты параметра порядка, она, естественно, четна относительно плоскости двойникования, а d-компонента меняет при этом знак. Вертикальным штрихом на рис.3 отделены области, где энергетическая щель не имеет нулей.

До сих пор мы рассматривали случай, когда электроны свободно, без отражения, проходят через плоскость двойникования. При учете отражения электронов от двойниковой границы с коэффициентом R четное решение не изменится, так как вклад траектории электрона, отраженного от плоскости двойникования, совпадает с траекторией электрона, пришедшего из симметричной точки соседнего домена, что хорошо видно из рис.1. Напротив, нечетное решение изменится существенным образом, т.к. вклад отраженных электронов окажется прямо противоположным вкладу электронов, пришедших из симметричной точки соседнего домена, так что вторые члены в формулах (16) для E^-, F^-, G^-, H^- приобретут множитель $(1-2R)$. В частности, при $R=1/2$ отраженные электроны целиком погасят вклад пришедших из соседнего домена, так что вторые члены в (16) исчезнут, а λ^- окажется равной длине экстраполяции для сверхпроводника, граничащего с нормальным металлом при свободном, без отражения прохождении электронов через границу. В этом случае задача может быть точно решена методом Винера–Хопфа. Длины экстраполяции квазидвумерых $s-$ и d_{xy}-сверхпроводников, вычисленные методом Винера–Хопфа, равны 0.696 и 0.744, соответственно [14], а применяемое здесь вариационное приближение дает 0.688 (при $a=\alpha=0, b=\infty$, то есть $\beta=\pi/2$) и 0.754 (при $a=\alpha=0, b=\beta=0$), что указывает на погрешность вариационного приближения менее 1.5%.

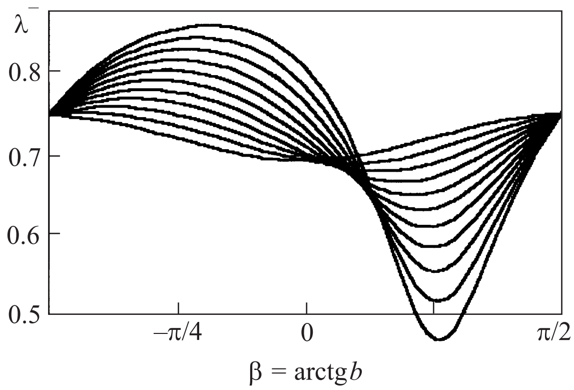

Рис.4. Длины экстраполяции λ^- для нечетного решения при коэффициенте отражения электронов от двойниковой поверхности $R=1/2$ в зависимости от $\beta=\mathrm{arctg}\,b$ при различных значениях параметра орторомбической деформации поверхности Ферми a. Верхней кривой справа соответствует $a=0$, нижней $a=1$, остальные для значений a с интервалами 0.1

На рис.4 показана длина экстраполяции λ^- при $R=1/2$ и значениях параметра a от 0 до 1 в зависимости от от параметра $\beta=\mathrm{arctg}\,b$, что удобно для включения предельного $s-$состояния, когда $b=\infty$.

Удивительно, но кривые, отделяющие области четного и нечетного пространственного решения в зависимости от параметров орторомбической деформации a и b при всех $D=1-R>0$ практически совпадают с кривой при $R=0$, показанной на рис.3, отличаясь от нее не более, чем на 1%, то есть меньше, чем оцененная выше погрешность вариационного приближения. Другими словами, в рассмотренной модели области четного и нечетного решений относительно поверхности двойникования практически не зависят от коэффициента отражения R при ненулевом коэффициенте прохождения D.

Работа поддерживается Научным советом направления “Сверхпроводимость” ГНТП “Актуальные направления физики конденсированных сред”.

1. C. O’Donovan and J.R. Carbotte, Phys. Rev. **B52**, 16208 (1995).
2. M.T. Beal-Monod and K. Maki, Phys. Rev. **B3**, 5775 (1995); **55**, 1194 (1996).
3. R. Modre, I. Schűrrel, and E. Schachinger, Phys. Rev. **B57**, 5496 (1995).
4. D. Einzel and I. Schűrrel, Physica **B284-288**, 451 (2000).
5. M. Sigrist, K. Kuboki, A. Lee et al., Phys. Rev. **B53**, 2835 (1995).
6. M.E. Zhitomirsky, M.B. Walker, Phys. Rev. Lett. **79**, 1734 (1997).
7. D.L. Feder, A. Beadsall, A.J. Berlinsky, and C. Kallin, Phys. Rev. **B56**, R5751 (1997).
8. W. Belzig, C. Bruder, and V. Sigrist, cond-mat 9801107 (1998).
9. В.Л. Покровский, ЖЭТФ **40**, 641 (1961).
10. Е.А. Шаповал, ЖЭТФ **47**, 1007 (1964); **49**, 930 (1965); **88**, 1073 (1985).
11. Е.А. Шаповал, Письма в ЖЭТФ **64**, 350 (1996).
12. АВ̇. Свидзинский, *Пространственно-неоднородные задачи теории сверхпроводимости*, М.: Наука, 1982.
13. В.П. Минеев, К.В. Самохин, *Введение в теорию необычной сверхпроводимости*, М.: Изд. МФТИ, 1998.
14. Е.А. Шаповал, Письма в ЖЭТФ **74**, 224 (2001).