Письма в ЖЭТФ, том 61, вып.10, стр.802 - 807 © 1995г. 25 мая

О КРИТИЧЕСКОМ ПОЛЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В UPt_3

К.В.Самохин[1)]

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН

117334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 апреля 1995 г.

В рамках модели со смесью двух различных однокомпонентных параметров порядка в тяжелофермионном сверхпроводнике UPt_3 найдены феноменологические граничные условия для уравнений Гинзбурга–Ландау, на основании которых вычислено критическое поле поверхностной сверхпроводимости $H_{c3}(T)$.

Объяснение расщепления сверхпроводящего перехода и сложной структуры фазовой диаграммы $H-P-T$ в соединении UPt_3 [1] до сих пор остается нерешенной проблемой. В рамках феноменологической теории, использующей симметрийные соображения [2–4], был предложен ряд теоретических моделей, которые можно разделить на две группы.

1. Модели, оперирующие с двухкомпонентными параметрами порядка. Здесь уместно напомнить, что сверхпроводящий параметр порядка, соответствующий a-ому неприводимому представлению группы G_0 точечной симметрии кристалла, имеет вид (в случае сильного спин-орбитального взаимодействия) [2]

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k},\mathbf{r}) = \sum_j \eta_j(\mathbf{r})\hat{\Delta}_j^{(a)}(\mathbf{k})$$

где $\hat{\Delta}_j^{(a)}$ – базисные функции, являющиеся матрицами 2×2 в спиновом пространстве. Для синглетного спаривания $\Delta_{j,\alpha\beta}^{(a)}(\mathbf{k}) = (i\hat{\sigma}_2)_{\alpha\beta}\psi_j^{(a)}(\mathbf{k})$, а для триплетного спаривания $\Delta_{j,\alpha\beta}^{(a)}(\mathbf{k}) = (i\hat{\sigma}_\mu\hat{\sigma}_2)_{\alpha\beta}d_j^{(a),\mu}(\mathbf{k})$. В нашем случае $G_0 = D_{6h}$, и в качестве представления, по которому преобразуется параметр порядка, выбирается одно из двумерных представлений E_1 или E_2 [5], расщепленное взаимодействием с полем более низкой симметрии, например, с АФМ порядком в кристалле UPt_3, имеющим орторомбическую симметрию (обзор таких моделей и ссылки см., например, в [6]).

2. Модели, предполагающие, что сверхпроводящее состояние в UPt_3 есть суперпозиция двух параметров порядка разной симметрии (то есть принадлежащих разным представлениям группы D_{6h}) с немного отличающимися температурами перехода. Здесь мы рассмотрим случай смеси двух однокомпонентных параметров порядка ψ_1 и ψ_2, при этом возможны либо комбинации вида $(\psi_1,\psi_2)\sim(A,B)$ [7], где A и B - любые из представлений $A_{1,2}$ и $B_{1,2}$ группы D_{6h} [5] (отсюда другое название для данной модели – AB-модель), либо вида (A_1,A_2) и (B_1,B_2) [8].

В функционале Гинзбурга–Ландау мы должны написать все допустимые по симметрии члены, как однородные, так и градиентные, накладывая при этом следующие требования. Во-первых, необходимо воспроизведение экспериментальной ситуации, когда линии верхнего критического поля $H_{c2}(T)$

[1)]e-mail: samokhin@landau.ac.ru, samokhin@itp.ac.ru

пересекаются для всех направлений внешнего поля (см. рис. 1); во-вторых, рассматриваются только представления одинаковой пространственной четности (заметим, что данное требование не является обязательным - следствия отказа от него рассмотрены в [9]).

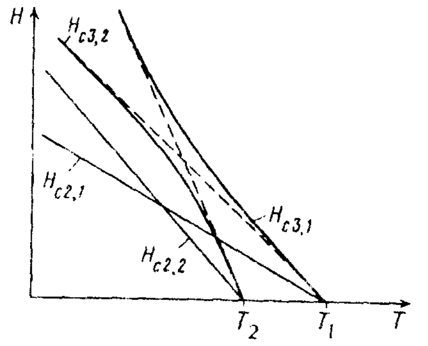

Рис.1. Фазовая диаграмма для AB-модели. Тонкими линиями показаны верхние критические поля $H_{c2,i}$, жирными - поверхностные критические поля $H_{c3,i}$

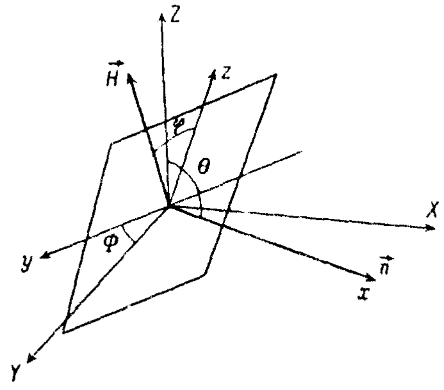

Рис.2. Взаимное расположение главных осей кристаллической решетки, плоской поверхности сверхпроводника и магнитного поля

Итак, функционал Гинзбурга-Ландау с точностью до квадратичных по ψ_1 и ψ_2 членов имеет вид

$$F_0 = F[\psi_1] + F[\psi_2], \tag{1}$$

где

$$F[\psi_i] = \alpha_i|\psi_i|^2 + K_i|\mathrm{D}_\perp\psi_i|^2 + K_i'|\mathrm{D}_z\psi_i|^2$$

(суммирования по i нет), $\alpha_i = a\tau_i = a(T - T_i)$; $K_i, K_i' > 0$; $T_{1,2}$ - близкие температуры перехода: $T_1 = T_0 + \epsilon$ $T_2 = T_0 - \epsilon$, $(0 < \epsilon \ll T_0)$, а $\mathrm{D} = -i\nabla - (2\pi/\Phi_0)\mathrm{A}$ (Φ_0 - квант потока). Существенным обстоятельством является то, что в (1) нет членов, перекрестных по ψ_1, ψ_2 и их градиентам (такие члены появляются лишь в более высоких порядках [8]). Это приводит к тому, что линии $H_{c2,i}(T)$ являются независимыми и при условиях $K_1 > K_2$, $K_1K_1' > K_2K_2'$ пересекаются для всех направлений поля [7].

Для вычисления критического поля поверхностной сверхпроводимости необходимо знать граничные условия для уравнений Гинзбурга-Ландау. В рамках рассматриваемой феноменологической теории поверхностные эффекты (в том числе и граничные условия) учитываются путем добавления к объемному функционалу F_0 допустимых по симметрии, локализованных вблизи поверхности слагаемых, составленных из компонент параметра порядка и вектора нормали n [3, 4]. При этом, помимо квадратичных членов, содержащих ψ_1 и ψ_2 по отдельности, в нашем случае возникают перекрестные члены, включающие $\psi_1^*\psi_2$: $n_Z(n_X^3 - 3n_Xn_Y^2)(\psi_1^*\psi_2 + \text{c.c.})$ для (A_1, B_1) и (A_2, B_2), $n_Z(n_Y^3 - 3n_Yn_X^2)(\psi_1^*\psi_2 + \text{c.c.})$ для (A_1, B_2) и (A_2, B_1) или $n_Z^2(n_Y^3 - 3n_Yn_X^2)(n_X^3 - 3n_Xn_Y^2)(\psi_1^*\psi_2 + \text{c.c.})$ для (A_1, A_2) и (B_1, B_2) ((X, Y, Z) - главные оси гексагональной решетки). Таким образом, плотность поверхностной энергии, например, для пары (A_1, B_1) имеет вид

$$\begin{aligned}F_{surf} &= \Big\{ \Big(g_1(n_X^2+n_Y^2)+g_2n_Z^2\Big)|\psi_1|^2+\\ &+\Big(g_3(n_X^2+n_Y^2)+g_4n_Z^2+g_5n_Z^2(n_X^3-3n_Xn_Y^2)^2\Big)|\psi_2|^2+\\ &+g_6n_Z(n_X^3-3n_Xn_Y^2)(\psi_1^*\psi_2+c.c.)\Big\}\delta(\mathbf{R}\cdot\mathbf{n}),\end{aligned}$$

где g_i – феноменологические коэффициенты.

Мы видим, что, хотя объемные критические поля $H_{c2,i}(T)$ независимы для разных компонент параметра порядка при всех ориентациях поля, для соответствующих поверхностных полей это не так из-за зацепления граничных условий и задача о нахождении $H_{c3,i}(T)$ становится более сложной.

В дополнение к системе координат (X, Y, Z) введем систему (x, y, z), связанную с плоской поверхностью образца (см. рис. 2). Вектор нормали $\mathbf{n}$ имеет компоненты: $n_X = \sin\theta\cos\Phi$, $n_Y = \sin\theta\sin\Phi$, $n_Z = \cos\theta$. Граничные условия при $x = 0$ можно написать в следующем общем виде:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi_1}{\partial x} &= \beta_{11}\psi_1+\beta_{12}\psi_2,\\ \frac{\partial\psi_2}{\partial x} &= \beta_{21}\psi_1+\beta_{22}\psi_2,\end{aligned} \qquad (2)$$

где зависимости вещественных коэффициентов $\beta_{ij} = \beta_{ji}$ от направления $\mathbf{n}$ определяются видом поверхностных инвариантов.

Пусть внешнее магнитное поле направлено в плоскости yz: $H_x = 0$, $H_y = H\sin\phi$, $H_z = H\cos\phi$, тогда удобно использовать следующую калибровку: $A_x = 0$, $A_y = Hx\cos\phi$, $A_z = -Hx\sin\phi$. Уравнения Гинзбурга–Ландау в координатах (x, y, z) имеют одинаковый вид для обоих параметров порядка, поэтому индекс i мы временно опустим. Кроме того, поскольку y и z явно в уравнения не входят, можно сразу искать параметр порядка в виде $\psi = \exp(ip_yy)\exp(ip_zz)\ f(x)$, тогда имеем

$$\begin{aligned}a\tau f - K_{xx}\frac{d^2f}{dx^2} + K_{yy}(p_y - h_0x\cos\phi)^2f + K_{zz}(p_z + h_0x\sin\phi)^2f -\\ -2iK_{xz}p_z\frac{df}{dx} - iK_{xz}h_0\sin\phi(f + 2x\frac{df}{dx}) = 0,\end{aligned} \qquad (3)$$

где введены обозначения

$$K_{xx} = K\sin^2\theta + K'\cos^2\theta, \qquad K_{yy} = K,$$

$$K_{zz} = K\cos^2\theta + K'\sin^2\theta, \qquad K_{xz} = (K-K')\cos\theta\sin\theta,$$

а $h_0 = 2\pi H/\Phi_0$.

Для того чтобы устранить последние два члена в (3) и привести это уравнение к простому виду, сделаем подстановку (см. также [10])

$$f(x) = \exp\Big(-i\frac{K_{xz}}{2K_{xx}}h_0\sin\phi(x-x^*)^2\Big)\ F(x), \qquad h_0x^*\sin\phi = -p_z, \qquad (4)$$

и изменим масштаб вдоль оси z: $\tilde{p}_z = p_z\sqrt{K'/K_{xx}}$, в результате чего получаем окончательно следующее уравнение:

$$a\tau F - K_{xx}\frac{d^2F}{dx^2} + K\left((p_y - \sqrt{\frac{K}{K_{xx}}}\ hx\cos\alpha)^2 + (\tilde{p}_z + \sqrt{\frac{K}{K_{xx}}}\ hx\sin\alpha)^2\right)F = 0, \quad (5)$$

где

$$h = \frac{2\pi\tilde{H}}{\Phi_0}, \qquad \tilde{H} = H\sqrt{\frac{K_{xx}}{K}}\sqrt{\cos^2\phi + \frac{K'}{K_{xx}}\sin^2\phi}, \qquad \operatorname{tg}\alpha = \sqrt{\frac{K'}{K_{xx}}}\ \operatorname{tg}\phi, \quad (6)$$

Уравнение (5) выглядит точно так же, как уравнение для изотропного случая в магнитном поле $\tilde{\mathrm{H}}$, имеющем компоненты $\tilde{H}_x = 0$, $\tilde{H}_y = \tilde{H}\sin\alpha$, $\tilde{H}_z = \tilde{H}\cos\alpha$. По этой причине удобно разделить зависимости параметра порядка от направлений вдоль $\tilde{\mathrm{H}}$ и перпендикулярно ему и ввести два параметра x_0 и k, связанные с p_y и p_z следующим образом:

$$\sqrt{\frac{K}{K_{xx}}}\ hx_0 = p_y\cos\alpha - \sqrt{\frac{K'}{K_{xx}}}\ p_z\sin\alpha, \qquad q = p_y\sin\alpha + \sqrt{\frac{K'}{K_{xx}}}\ p_z\cos\alpha, \quad (7)$$

тогда (5) становится простым уравнением гармонического осциллятора, решение которого, убывающее при $x \to +\infty$, имеет вид

$$F(x) = \exp\left(-\frac{Kh}{2K_{xx}}(x - x_0)^2\right)\ H_\nu\left(\sqrt{\frac{Kh}{K_{xx}}}\ (x - x_0)\right),$$

где $H_\nu(x)$ - функции Эрмита [11] с индексом $\nu = -(1 + (a\tau + Kq^2)/(Kh))/2$.

Окончательно зависящие от $\mathrm{p} = (p_y, p_z)$ частные решения уравнений Гинзбурга-Ландау для параметров порядка ψ_1 и ψ_2 выглядят следующим образом:

$$\psi_{i,\mathrm{p}} = C_{i,\mathrm{p}}\ e^{ip_y y}\ e^{ip_z z}\ \exp\left(i\frac{K_{xz,i}}{2K_{xx,i}}h_0\sin\phi\ (x - x_i^*)^2\right)\cdot$$
$$\cdot\exp\left(-\frac{K_i h_i}{2K_{xx,i}}(x - x_{0,i})^2\right)\ H_{\nu_i}\left(\sqrt{\frac{K_i h_i}{K_{xx,i}}}\ (x - x_{0,i})\right), \quad (8)$$

где зависимости x_i^*, $x_{0,i}$ и ν_i от p даются выражениями (4), (6) и (7). Непосредственной проверкой можно убедиться, что данное выражение удовлетворяет, как и должно быть, условию равенства нулю тока через границу (вдоль x).

Общее решение уравнений Гинзбурга-Ландау имеет вид $\psi_i = \sum_{\mathrm{p}}\psi_{i,\mathrm{p}}$. Подставляя его в граничные условия (2), убеждаемся в том, что компоненты с разными p независимы и, следовательно, условие разрешимости (бесконечной) системы уравнений на $C_{i,\mathrm{p}}$ сводится к равенству нулю детерминанта 2×2 при каком-либо p. Вводя безразмерный параметр $r_i = \sqrt{K_i h_i/K_{xx,i}}\ x_{0,i}$, получаем трансцендентное уравнение, неявно определяющее зависимость $h(\tau, \mathrm{p})$, то есть $H(T, \mathrm{p})$:

$$\left(r_1 - \sqrt{\frac{K_{xx,1}}{K_1h_1}}\beta_{11} + 2\nu_1\frac{H_{\nu_1-1}(-r_1)}{H_{\nu_1}(-r_1)}\right)\cdot$$
$$\cdot\left(r_2 - \sqrt{\frac{K_{xx,2}}{K_2h_2}}\beta_{22} + 2\nu_2\frac{H_{\nu_2-1}(-r_2)}{H_{\nu_2}(-r_2)}\right) - \sqrt{\frac{K_{xx,1}K_{xx,2}}{K_1K_2h_1h_2}}\beta_{12}^2 = 0. \quad (9)$$

Искомое критическое поле поверхностной сверхпроводимости получается путем нахождения максимума $H(T, \mathrm{p})$ по двум параметрам p_y и p_z, при этом форма появляющегося зародыша определяется уравнением (8).

Ввиду значительной сложности уравнения (9) выполнение данной программы аналитически не представляется возможным, однако оно может решаться численно при различных значениях β_{ij} и параметров функционала (1). Подчеркнем, что уравнение (9) описывает лишь ход "внешней" линии $H_{c3}(T)$ на рис. 1; для вычисления "внутренней" линии линеаризованные уравнения Гинзбурга–Ландау с однородным магнитным полем, очевидно, непригодны.

Здесь мы приведем некоторые качественные соображения, касающиеся поведения $H_{c3}(T)$. Прежде всего, очевидным следствием (6) является то, что для любой ориентации поверхности при вращении магнитного поля в плоскости yz должна наблюдаться одноосная анизотропия поверхностного критического поля. Важным и специфическим именно для нетривиальной сверхпроводимости свойством при этом является существенная анизотропия параметров этого эллипса при изменении направления нормали $\mathbf{n}$ в базисной плоскости (то есть при изменении угла Φ), обусловленная угловой зависимостью параметров β_{ij}. Например, для (A_1, B_1) имеем

$$\beta_{11} = g_1 \sin^2\theta + g_2 \cos^2\theta \quad , \qquad \beta_{22} = g_3 \sin^2\theta + g_4 \cos^2\theta + g_5 \cos^2\theta \sin^6\theta \cos^2 3\Phi ,$$

$$\beta_{12} = g_6 \cos\theta \sin^3\theta \cos 3\Phi$$

Решение уравнения (9) должно зависеть от угла Φ, и в данном случае поверхностное критическое поле будет иметь анизотропию 6-го порядка (см. также [12]). Подчеркнем, что, согласно [13], объемные критические поля H_{c2} в гексагональном кристалле не зависят от направления в базисной плоскости и поэтому не могут быть использованы для определения симметрии параметра порядка.

Что касается зависимости поверхностного критического поля от температуры, то удобно начать с простейшего случая $\beta_{12} = 0$. Тогда параметры порядка становятся независимыми, и линии $H_{c3,i}(T)$, определяемые аналогично однокомпонентному случаю [12], пересекаются (штриховые линии на рис. 1). Если $\beta_{12} \neq 0$, то ситуация напоминает, очевидно, квантовомеханическую задачу о пересечении уровней [5], поэтому следует ожидать, что линии поверхностного поля будут "отталкиваться" (см. рис. 1). Из явного выражения для перекрестных поверхностных членов мы видим, что β_{12} обращается в нуль при определенных направлениях нормали (в частности, для (A_1, B_1) - при $\theta = 0, \pi/2$ или $\Phi = (2n+1)\pi/6$), следовательно, при различных ориентациях поверхности образца должно наблюдаться, помимо анизотропии наклонов, и качественное изменение картины, связанное с характером пересечения линий $H_{c3,i}(T)$. Кроме того, при $h \gg \beta_{ij}^2$ все члены в (9), явно содержащие магнитное поле, пропадают, и наклоны прямых линий $H_{c3,i}(T)$ определяются стандартными уравнениями, то есть $H_{c3}/H_{c2} = 1.69$ [14].

Заметим, что для комбинации (B_1, B_2) при условии, что $\mathbf{H}$, $\mathbf{n} \perp \hat{\mathbf{c}}$, получаем, что выше и ниже точки пересечения анизотропия 6-го порядка линий $H_{c3,i}(T)$ имеет противоположные знаки, что согласуется с результатами эксперимента [15].

В заключение я хотел бы поблагодарить В.П.Минеева за инициирование интереса к задаче о поверхностной сверхпроводимости в UPt_3 и многочисленные полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке

Международного Научного Фонда (ISF) (грант MGI000) и Landau Scholarship Commitee (KFA, Julich, Germany).

---

1. L.Taillefer, J.Flouquet and G.G.Lonzarich, Physica B **169**, 257 (1991).
2. Г.Е.Воловик, Л.П.Горьков, ЖЭТФ **88**, 1412 (1985).
3. L.P.Gor'kov, Sov. Sci. Rev. A **9**, 1 (1987).
4. M.Sigrist, K.Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика М.: Наука, 1989.
6. J.A.Sauls, Adv. in Physics **43**, 113 (1994).
7. A.Garg and D.-C.Chen, Phys.Rev. B**49**, 479 (1994).
8. V.P.Mineev, Annales de Physique Fr. **19**, 367 (1994).
9. В.П.Минеев, К.В.Самохин, ЖЭТФ **105**, 747 (1994).
10. D.K.Tilley, Proc.Phys.Soc.London **85**, 1977 (1965).
11. А.Ф.Никифоров, В.Б.Уваров, Специальные функции математической физики М.: Наука, 1984.
12. К.В.Самохин, ЖЭТФ **107**, 906 (1995).
13. Л.И.Бурлачков, ЖЭТФ **89**, 1382 (1985).
14. D.Saint-James and P.G. de Gennes, Phys.Lett. **7**, 306 (1963).
15. N.Keller, J.L.Tholence, A.Huxley, and J.Flouquet, Phys. Rev. Lett. **73**, 2364 (1993).