УДК 537.312.62

ИЗОЛИРОВАННАЯ МАГНИТНАЯ ПРИМЕСЬ В СВЕРХПРОВОДНИКЕ С ДВУХКОМПОНЕНТНЫМ ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКА

Ю. С. Бараш, А. Г. Гришин

Проведен микроскопический расчет коэффициента перед специфическим инвариантом в функционале Гинзбурга – Ландау, описывающим влияние магнитной примеси на свойства сверхпроводника с двухкомпонентным параметром порядка. Показано, что отличие от нуля данного коэффициента обусловлено взаимодействием спин-орбитального происхождения. Дана оценка величины этого коэффициента в применении к сверхпроводнику с тяжелыми фермионами UPt_3.

Фазовая диаграмма гексагонального сверхпроводящего соединения с тяжелыми фермионами UPt_3 включает несколько различных сверхпроводящих фаз, разделенных линиями фазовых переходов второго рода на плоскости магнитное поле – температура. Этот и ряд других экспериментальных результатов являются важными аргументами в пользу реализации одного из анизотропных типов спаривания в UPt_3, описываемых двухкомпонентным параметром порядка $\vec{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$, который преобразуется по одному из неприводимых двумерных представлений E_1 или E_2 группы D_{6h} как в случае синглетного, так и для триплетного спариваний (см., например, обзорные работы [1, 2]). Наличие у сверхпроводящего параметра порядка двух компонент приводит ко многим специфическим для таких типов спаривания новым эффектам, один из которых привлек недавно внимание в связи с экспериментами по прецессии мюонного спина для измерения локального распределения магнитного поля в сверхпроводниках с тяжелыми фермионами [3 – 5]. Уже в рамках теории Гинзбурга – Ландау можно показать, что изолированная точечная примесь, находящаяся в состоянии, не инвариантном относительно операции обращения времени (например, магнитный примесный атом или мюон, инжектируемый в сверхпроводник в упомянутых выше экспериментах), может индуцировать в своей окрестности в сверхпроводнике с двухкомпонентным параметром порядка сверхтекучие токи, создающие в месте нахождения примеси не равное нулю магнитное поле (хотя в отсутствие такой примеси магнитное поле в сверхпроводнике равно нулю) [6].

В теории с однокомпонентным параметром порядка η в функционале Гинзбурга – Ландау имеется только один инвариант второго порядка, обусловленный присутствием изолированной точечной примеси: $\kappa|\eta|^2\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ (где $\mathbf{r}_0$ – местоположение примеси; далее полагаем $\mathbf{r}_0 = 0$). Такой член приводит лишь к локальному сдвигу критической температуры сверхпроводника и, кроме того, имеет один и тот же вид для немагнитной и для магнитной примесей. В случае же сверхпроводника с двухкомпонентным параметром порядка влияние примеси описывается, вообще говоря, четырьмя слагаемыми вида [6]

$$\mathcal{F}_{imp} = \kappa(|\eta_1|^2+|\eta_2|^2)\delta(\mathbf{r})+\nu(|\eta_1|^2-|\eta_2|^2)\delta(\mathbf{r})+\gamma(\eta_1\eta_2^*+\eta_1^*\eta_2)\delta(\mathbf{r})+i\mu(\eta_1\eta_2^*-\eta_1^*\eta_2)\delta(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь коэффициенты ν, γ и μ не являются скалярами, что существенно для обеспечения инвариантности выписанных выражений относительно элементов пространственной симметрии системы "кристалл+примесь", а также операции обращения времени. Вследствие этого отличие коэффициентов ν и γ от нуля возможно, только если состояние примеси не симметрично относительно поворотов в базисной плоскости гексагонального кристалла на углы, кратные $\pi/3$. Отличие же от нуля коэффициента μ оказывается непосредственно связано с условием нахождения примеси в состоянии, не инвариантном относительно обращения времени. Инвариант, связанный с коэффициентом μ, как раз и оказывается ответствен в теории Гинзбурга – Ландау за индуцирование примесью в сверхпроводнике магнитного поля в месте ее положения. Цель предлагаемой работы – микроскопическое вычисление коэффициента μ.

При микроскопическом рассмотрении теории Гинзбурга – Ландау исходным, как обычно, является уравнение самосогласования для сверхпроводящего параметра порядка, который в случае синглетного спаривания можно представить в виде $\hat{\Delta}(\mathbf{p}) = i\hat{\tau}_y\psi(\mathbf{p})$, а для триплетного спаривания – в виде $\hat{\Delta}(\mathbf{p}) = i(\mathbf{d}(\mathbf{p})\cdot\hat{\vec{\tau}})\hat{\tau}_y$, где $\hat{\tau}_i$ – матрицы Паули. Хотя для UPt_3 тип спаривания однозначно пока не идентифицирован, анализ экспериментов, в которых проявляется анизотропия парамагнитного предела, показывает, что в случае триплетного спаривания в UPt_3 должно быть $\mathbf{d}\|z$, где z – гексагональная кристаллическая ось [9]. Ниже синглетный и триплетный случаи рассматриваются совместно, при этом вводим обозначения $\Delta(\mathbf{p}) = \psi(\mathbf{p})$ для синглетного случая и $\Delta(\mathbf{p}) = d_z(\mathbf{p})$ для триплетного спаривания указанного вида.

Вблизи T_c выражение для $\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ может быть представлено в виде

$$\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \eta_1(\mathbf{r})\varphi_1(\mathbf{p}) + \eta_2(\mathbf{r})\varphi_2(\mathbf{p}). \tag{2}$$

Здесь $\varphi_{1,2}(\mathbf{p})$ – базисные функции двумерного неприводимого представления, по которому происходит фазовый переход, а $\eta_{1,2}(\mathbf{r})$ – две компоненты параметра порядка, фигурирующие в функционале Гинзбурга – Ландау. Такое представление имеет весьма общий характер вблизи T_c, поскольку при этом в выражении для спаривательного анизотропного потенциала взаимодействия, фигурирующего в уравнении самосогласования, достаточно оставить лишь член, имеющий ту же симметрию, что и реализуемый в сверхпроводящем состоянии тип спаривания:

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -g(\varphi_1(\mathbf{p})\varphi_1(\mathbf{p}') + \varphi_2(\mathbf{p})\varphi_2(\mathbf{p}')). \tag{3}$$

Если же весь потенциал спаривания с хорошей точностью описывается приведенным факторизованным выражением, то такое представление для $\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ имеет место во всей области температур.

Для описания влияния изолированной примеси на свойства сверхпроводника с анизотропным спариванием мы используем подход, развитый в работах [7, 8] в применении к сверхтекучему ^3He (см. также [10, 11]). Введем матричную гриновскую функцию размерности 4×4:

$$\hat{\mathcal{G}} = \begin{pmatrix} \hat{G} & -\hat{F} \\ -\hat{\bar{F}} & \hat{\bar{G}} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Здесь все пропагаторы вида $\hat{G}$, $\hat{F}$ есть матрицы 2×2 в спиновом пространстве. Матрицу $\hat{\mathcal{G}}$ удобно представить в следующем виде

$$\hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \hat{\mathcal{G}}_{imt}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \hat{\mathcal{G}}_{imt}\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{r} = 0\right) \hat{T}_{kk} \hat{\mathcal{G}}_{imt}\left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{r} = 0\right). \tag{5}$$

Импульс $\mathbf{k}$ в (5) отвечает относительному движению электронов в паре, а импульс $\mathbf{q}$ есть импульс куперовской пары как целого ($\mathbf{r}$ – координата центра масс куперовской пары). Длина рассеяния l электронов на примеси предполагается порядка межатомных расстояний ($l << \xi_0$). Фигурирующий здесь пропагатор $\hat{\mathcal{G}}_{imt}$ удовлетворяет уравнениям для сверхпроводника без примеси, если не уточнять поведение величины Δ, для которой предполагается выполненным точное уравнение самосогласования (в присутствии примеси).

Далее, входящая в (5) T-матрица удовлетворяет уравнению

$$\hat{T}_{k_1k_2} = \hat{U}_{k_1k_2} + \int \frac{d\tilde{k}}{(2\pi)^3} \hat{U}_{k_1\tilde{k}} \hat{\mathcal{G}}_{imt}(\tilde{\mathbf{k}}; \mathbf{r} = 0) \hat{T}_{\tilde{k}k_2}, \tag{6}$$

где матрица $\hat{U}_{k_1k_2}$ размерности 4×4 связана с потенциалом рассеяния на примеси:

$$\hat{U}_{k_1k_2} = iv_{k_1k_2}\hat{l} + w_{k_1k_2}\hat{D}_1 + u_{k_1k_2}\hat{D}_2. \tag{7}$$

Смысл матричных элементов $v_{k_1k_2}$, $w_{k_1k_2}$, $u_{k_1k_2}$, характеризующих взаимодействие электронов с примесью, следует из вида соответствующей части гамильтониана:

$$\hat{h} = w(r) + u(r)\mathbf{M} \cdot \hat{\vec{\tau}} + v(r)\mathbf{M} \cdot \hat{\mathbf{L}}. \tag{8}$$

Таким образом, $w(r)$ описывает обычный потенциал рассеяния на немагнитной примеси, $u(r)$ характеризует взаимодействие магнитного момента примеси $\mathbf{M}$ со спином электронов, а $v(r)$ относится к взаимодействию спин-орбитального происхождения ($\hat{\mathbf{L}}$ есть оператор орбитального момента электронов).

Введенные в (7) матрицы $\hat{D}_1$ и $\hat{D}_2$ определены следующим образом:

$$\hat{D}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{D}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{M}\hat{\vec{\tau}} & 0 \\ 0 & -\mathbf{M}\hat{\vec{\tau}}^* \end{pmatrix}. \tag{9}$$

В уравнении самосогласования, как известно, фигурирует гриновская функция $\hat{F}$, которую вблизи T_c при нахождении линейных по Δ членов в уравнении Гинзбурга – Ландау достаточно найти в первом по Δ приближении. Поскольку функция $\hat{F}$ занимает один из блоков матричного пропагатора $\hat{\mathcal{G}}$, то и при нахождении $\hat{\mathcal{G}}$ (точнее, речь идет о выражении $\hat{\mathcal{G}}$ через Δ) можно ограничиться указанной точностью. Соответствующее решение для $\hat{\mathcal{G}}_{imt}(\mathbf{k})$ имеет вид:

$$\hat{\mathcal{G}}_{imt}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = -\frac{i\omega_n\hat{l} + \epsilon(\mathbf{k})\hat{D}_1 + \hat{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\omega_n^2 + \epsilon^2(\mathbf{k})}, \tag{10}$$

где $\omega_n = (2n+1)\pi T$ – мацубаровская частота. Входящая сюда матрица $\hat{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ имеет для синглетного и триплетного спариваний различный вид:

$$\hat{\sigma}_s = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta^* & 0 & 0 \\ \Delta^* & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{tr} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & \Delta^* & 0 & 0 \\ \Delta^* & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Выражение для T-матрицы ищем, учитывая лишь первые два порядка борновского приближения, что позволяет сделать замену $T \to U$ в подынтегральном выражении в (6). Подставляя затем выражения для $\hat{\mathcal{G}}_{imt}$ и $\hat{T}_{kk}$ в соотношение (5), получаем выражение для матричного пропагатора $\hat{\mathcal{G}}$ через параметр порядка Δ. Правый верхний блок этого пропагатора размерности 2×2 есть величина $\hat{F}$, которую и следует подставить в уравнение самосогласования

$$\Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = -T \sum_{\omega_n} \sum_{\bar{p}, s_3, s_4} V_{s_2 s_1 s_3 s_4}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') F_{s_3 s_4}(\omega_n; \mathbf{p}', \mathbf{q}). \tag{12}$$

Спиновую структуру фигурирующего здесь спаривательного потенциала считаем известной, исходя из четности спаривания. Так, для синглетной сверхпроводимости полагаем $V_{s_1 s_2 s_3 s_4}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -(\tau_y)_{s_1 s_2} (\tau_y)_{s_3 s_4} V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$. В случае же рассматриваемого типа триплетного спаривания $(\mathbf{d} \| z)$ имеем $V_{s_1 s_2 s_3 s_4}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = (\tau_x)_{s_1 s_2} (\tau_x)_{s_3 s_4} V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$.

Используя в уравнении самосогласования соотношения (2), (3) и учитывая линейную независимость базисных функций $\varphi_1(\mathbf{p})$, $\varphi_2(\mathbf{p})$, получаем два связанных уравнения Гинзбурга – Ландау для двухкомпонентного параметра порядка $\eta_{1,2}$ и микроскопические выражения для соответствующих коэффициентов. Приведем здесь кратко некоторые результаты, касающиеся введенных в (1) коэффициентов перед членами, обусловленными присутствием изолированной примеси. В первом борновском приближении все коэффициенты кроме κ оказываются равными нулю, причем отличие κ от нуля имеет место лишь при учете асимметрии частица-дырка. Во втором борновском приближении роль взаимодействия спина примеси со спином электронов сводится лишь к появлению дополнительного вклада в коэффициент κ. В то же время, взаимодействие спина примеси с орбитальным моментом электронов обусловливает появление во втором борновском приближении отличных от нуля коэффициентов γ, ν и μ. В частности, для интересующего нас коэффициента μ находим

$$\mu = 1,22 M_z \alpha v_f \lambda N^2(0) \int d\Omega \int d\Omega' \Phi_{kk'} w_{kk'} (\hat{k}_y \hat{k}'_x - \hat{k}_x \hat{k}'_y) \varphi_1(\hat{k}) \varphi_2(\hat{k}'), \tag{13}$$

где введена безразмерная константа связи $\lambda = gN(0)$ и базисные функции предполагаются нормированными: $\int d\Omega\varphi_{1,2}^2(\hat{k}) = 4\pi$. Интегрирование в (13) выполняется по направлениям импульса на поверхности Ферми, v_f есть скорость Ферми, а $\Phi_{kk'}$ – матричный элемент функции $\Phi(r)$, которая связана с $v(r)$ следующим образом: $d\Phi(r)/dr = rv(r)$. Коэффициент α в (13) фигурирует также в первом члене в функционале Гинзбурга – Ландау: $\alpha(T - T_c)(|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2)$.

Поскольку выражение (13) пропорционально M_z, коэффициент μ меняет знак при операции обращения времени, обеспечивая инвариантность всего выражения $i\mu(\eta_1\eta_2^* - \eta_1^*\eta_2)$. Задавшись определенными $w(r)$ и $v(r)$, можно оценить значение коэффициента μ. Положим для оценки $\omega(r) \propto \epsilon_f a^3\delta(r)$, $v(r) \propto \mu_B/r^3$, где a – межатомное расстояние, e_f – энергия Ферми, а μ_B – магнетон Бора. Будем пользоваться базисными функциями $\varphi_1(\hat{k}) = \sqrt{15}k_xk_z$, $\varphi_2(\hat{k}) = \sqrt{15}k_yk_z$ (другие базисные функции приводят к изменению числового множителя в два-три раза). Из (13) с учетом сказанного получаем $\mu \propto (M_z/\mu_B)\mu_B^2\alpha\lambda$. Чтобы оценить произведение $\alpha\lambda$, используем следующие данные для UPt_3 [12]: $\Delta C_+/T_{c+} = 205J/(mol \cdot K^2)$, $T_{c+} = 441mK$ и следующие соотношения:

$$\frac{\Delta C_+}{T_{c+}} = \frac{N_a}{n}\frac{\alpha^2}{3\beta_1},\ \beta_1 \sim \frac{\alpha\lambda}{T_c},\ T_c \propto \epsilon_c exp(-1/2\lambda). \tag{14}$$

Выражая μ через известные из эксперимента значения, имеем

$$\mu \propto (10^{-26}K)(M_z/\mu_B)\frac{\Delta C_+/T_{c+}}{T_c ln^2(\epsilon_c/T_c)} \propto 0,05(M_z/\mu_B)K^{-1}. \tag{15}$$

ЛИТЕРАТУРА

[1] Sigrist M. and Ueda K. Rev. Mod. Phys., **63**, 239 (1991).

[2] Sauls J. A. Adv. Phys., **43**, 113 (1994).

[3] Heffner R. H. et al. Phys. Rev. Lett., **65**, 2816 (1990).

[4] Luke G. M. et al. Phys. Rev. Lett., **71**, 1466 (1993).

[5] De Réotier P. D. et al. Preprint (cond-mat/9511057) (1995).

[6] Barash Yu. S., Sigrist M., Grishin A. (готовится к печати).

[7] Rainer D. and Vuorio M. J. Phys. C: Solid State Phys., **10**, 3093 (1977).

[8] Thuneberg E. V., Kurkijärvi J., and Rainer D. J. Phys. C: Solid State Phys., **14**, 5615 (1981).

[9] Choi C. H. and Sauls J. Phys. Rev., **B48**, 13684 (1993).

[10] Choi C. H. and Muzikar P. Phys. Rev. B, **39**, 9664 (1989).
[11] Choi C. H. and Muzikar P. Phys. Rev. B, **41**, 1812 (1990).
[12] Fisher R. A., Kim S., Woodfield B. F. et al. Phys. Rev. Lett., **62**, 1411 (1989).

Поступила в редакцию 6 марта 1996 г.