
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
Кафедра фундаментальной и прикладной физики микро- и наноструктур

Направление подготовки / специальность: 03.04.01 Прикладные математика и физика

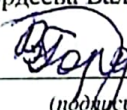
Направленность (профиль) подготовки: Общая и прикладная физика

СПИН-ВЕНТИЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ В СИСТЕМАХ СВЕРХПРОВОДНИК/АНТИФЕРРОМАГНЕТИК

(магистерская диссертация)

Студент:

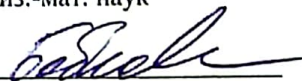
Гордеева Валерия Михайловна



(подпись студента)

Научный руководитель:

Бобкова Ирина Вячеславовна,
д-р физ.-мат. наук



(подпись научного руководителя)

Консультант (при наличии):

(подпись консультанта)

Москва 2024

Аннотация

Целью данной магистерской диссертации является теоретическое описание спин-вентильного эффекта в системах сверхпроводник/антиферромагнетик. В работе рассматривается гетероструктура AF/S/AF с полностью компенсированными антиферромагнетиками. Система изучается аналитически при помощи квазиклассической теории для функции Грина (уравнение Эйленбергера) и численно методом Боголюбова – де Жена. Данные методы используются для исследования зависимости критической температуры сверхпроводника от взаимной ориентации неелевских векторов антиферромагнетиков (спин-вентильный эффект). Также изучается влияние на проявление спин-вентильного эффекта таких параметров, как химический потенциал сверхпроводника и наличие примесей в системе.

Получено, что несмотря на отсутствие макроскопической намагниченности в исследуемой структуре возникают триплетные корреляции неелевского типа, приводящие к спин-вентильному эффекту. При этом в результате неелевского триплетного спаривания с конечным импульсом эффект существенно зависит от значения химического потенциала сверхпроводника. Также показано, что спин-вентильный эффект исчезает при добавлении примесей, поскольку они подавляют неелевские триплетные корреляции.

Оглавление

Глава 1. Введение	4
1.1. Спиновые вентили на основе систем сверхпроводник / ферромагнетик: обзор литературы	4
1.2. Спиновые вентили на основе систем сверхпроводник / антиферромагнетик	10
Глава 2. Модель и методы	13
2.1. Квазиклассическая теория	13
2.2. Метод Боголюбова – де Жена	22
Глава 3. Результаты	26
3.1. Квазиклассическая теория	26
3.2. Метод Боголюбова – де Жена	29
Заключение	36
Список публикаций по теме магистерской диссертации	37
Список литературы	38

Глава 1

Введение

Гетероструктуры, состоящие из сверхпроводников и магнетиков, являются важными объектами исследования мезоскопической физики. В нанометровых областях вблизи границ раздела происходит взаимное влияние сверхпроводимости и магнетизма через сверхпроводящий эффект близости, т. е. проникновение сверхпроводящих корреляций в магнетик, а магнитного порядка – в сверхпроводник. В частности, влияние магнетизма проявляется в частичной конвертации синглетных сверхпроводящих корреляций в триплетные [1, 2], что приводит к подавлению обычной, спин-синглетной сверхпроводимости обменным полем магнетика.

Эффект близости делает возможным использование гетероструктур сверхпроводник/магнетик в качестве приложений сверхпроводниковой спинтроники [3, 4]. Одно из таких приложений – сверхпроводящие спиновые вентили. Это структуры из сверхпроводника и нескольких магнетиков, сверхпроводящая критическая температура которых зависит от взаимной ориентации намагниченностей разных слоев (спин-вентильный эффект). Далее в этой главе обсуждается спин-вентильный эффект в системах сверхпроводник/ферромагнетик (S/F) и сверхпроводник/антиферромагнетик (S/AF). Спиновые вентили на основе структур с ферромагнетиками хорошо изучены и теоретически, и экспериментально, поэтому раздел об этих структурах представляет собой обзор литературы на данную тему. Раздел о системах с антиферромагнетиками, являющихся объектом моего исследования, посвящен причинам возникновения спин-вентильного эффекта в данных структурах.

1.1. Спиновые вентили на основе систем сверхпроводник / ферромагнетик: обзор литературы

Начнем обсуждение данных систем со структур F/S/F с ферромагнитными изоляторами (FI/S/FI). Этот случай проще для анализа, чем структура с ферромагнитными металлами, поскольку сверхпроводящие корреляции проникают в ферромагнетики только на толщину порядка одного атомного слоя. На рис. 1 изображена схема данной структуры. Стрелками обозначены направления обменных полей ферромагнетиков, угол θ между ними – это угол разориентации намагниченностей. Нас будет интересовать зависимость критической температуры сверхпроводника T_c от величины данного угла.

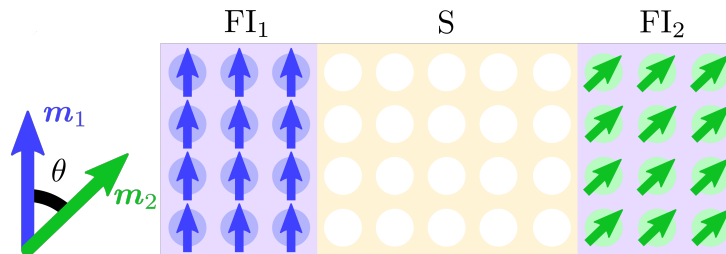


Рис. 1. Схема структуры F/S/F. θ – угол разориентации намагниченностей.

В работе де Жена [5] было теоретически показано, что эффективное обменное поле, которое влияет на сверхпроводник в такой структуре, пропорционально $\cos(\theta/2)$,

то есть модули намагниченностей двух ферромагнетиков эффективно складываются при $\theta = 0$ и вычитаются при $\theta = \pi$. Будем называть конфигурации $\theta = 0$ и $\theta = \pi$ параллельной (P) и антипараллельной (AP) соответственно, а критические температуры в этих конфигурациях обозначать T_c^P и T_c^{AP} . Тогда, согласно результату де Жена, для структур FI/S/FI ожидается спин-вентильный эффект, при этом $T_c^P < T_c^{AP}$. Экспериментально такой результат был получен в работе [6], где для структуры EuS/Al/EuS величина спин-вентильного эффекта $T_c^{AP} - T_c^P$ составила около 1.55 К (см. рис. 2).

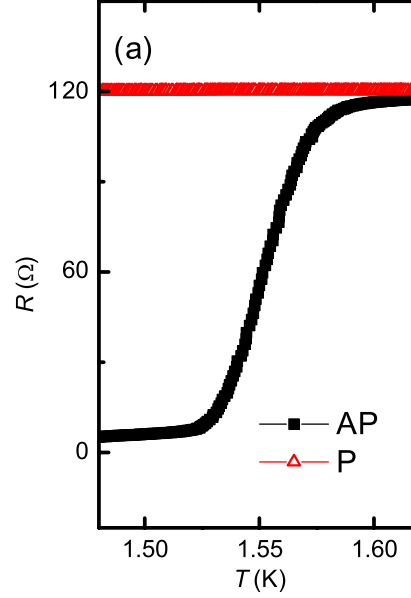


Рис. 2. Зависимость сопротивления от температуры для структуры EuS/Al/EuS в конфигурациях P и AP [6]. $T_c^P = 0$, $T_c^{AP} \approx 1.55$ К.

Теперь перейдем к системам с ферромагнитными металлами. В этом случае спин-вентильный эффект имеет место как в структурах F/S/F, так и S/F/F, и был исследован теоретически в работах [7–12] и экспериментально в работах [13–26]. Рассмотрим подробнее спин-вентильный эффект в гетероструктурах типа S/F/F, опираясь на его теоретическое описание, предложенное в работе [10].

Схема структуры S/F/F приведена на рис. 3. Жирными стрелками обозначены направления обменных полей ферромагнетиков, α – угол разориентации намагниченностей. Границе S/F1 соответствует точка $x = 0$, внешний ферромагнитный слой F2 считается полубесконечным в направлении x . В данной работе рассматривается систе-

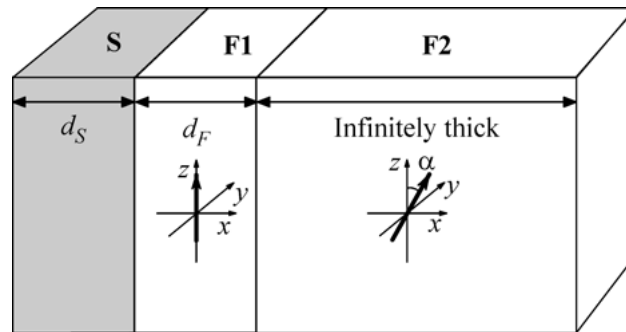


Рис. 3. Схема структуры S/F/F [10].

ма в грязном пределе, для ее описания используются уравнения Узаделя. Синглетная компонента аномальной функции Грина f_0 , описывающая синглетную сверхпроводимость в системе, подчиняется следующему граничному условию в точке $x = 0$:

$$-\xi \frac{df_0}{dx} = W f_0 \Big|_{x=0}, \quad (1)$$

где ξ – длина когерентности сверхпроводника, W – функция, характеризующая поведение f_0 на границе S/F1 и монотонно связанная с подавлением критической температуры. Решение уравнений Узаделя позволяет найти зависимость разности значений W в параллельной и антипараллельной конфигурации $W(0) - W(\pi)$ от толщины слоя F1 d_F . Эта зависимость оказывается немонотонной и знакопеременной и представлена на рис. 4. Ситуация $W(0) - W(\pi) > 0$ соответствует так называемому стандартному спин-

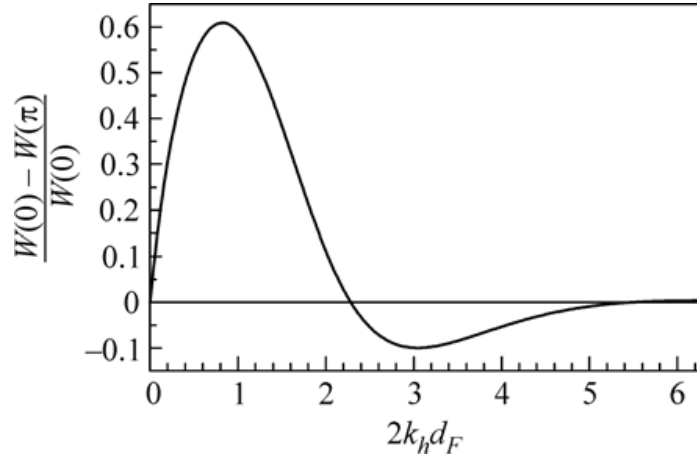


Рис. 4. Зависимость $W(0) - W(\pi)$ от толщины d_F слоя F1 [10]. $k_h = \sqrt{h/D}$, где h – величина обменных полей ферромагнетиков, D – коэффициент диффузии во всей системе.

вентильному эффекту с $T_c^P < T_c^{AP}$, согласующемуся с интуитивно понятным объяснением через эффективное сложение (вычитание) обменных полей в параллельной (антипараллельной) конфигурации. Эффект с $T_c^P > T_c^{AP}$, возникающий при $W(0) - W(\pi) < 0$, называется обратным спин-вентильным эффектом. Физически возможность реализации как стандартного, так и обратного эффекта в зависимости от толщины среднего слоя объясняется конструктивной или деструктивной интерференцией осциллирующих волновых функций куперовских пар, отраженных от границ этого слоя.

На рис. 5 представлены разные типы зависимости критической температуры от угла между намагниченностями для разных толщин слоя F1. Кривая 1 с постоянной T_c соответствует физически эквивалентным случаям $d_F = 0$ и $d_F = \infty$, кривые 2 и 4 – стандартному и обратному спин-вентильному эффекту, соответственно. Кривая 3 демонстрирует немонотонную зависимость $T_c(\alpha)$ с минимумом вблизи $\alpha = \pi/2$. Это проявление триплетного спин-вентильного эффекта: в случае неколлинеарной конфигурации намагниченностей у аномальной гриновской функции появляется дальнедействующая триплетная компонента, эффективно связывающая сверхпроводник с дальним ферромагнетиком F2, что усиливает подавление критической температуры.

Экспериментально для структур S/F/F с ферромагнитными металлами также наблюдались стандартный, обратный и триплетный спин-вентильный эффект. На рис. 6 приведены результаты эксперимента со структурой CoO/Fe/Cu/Fe/Pb из работы [17]. Измеренная величина спин-вентильного эффекта $\Delta T_c = T_c^{AP} - T_c^P$ качественно согласуется с теоретической формулой для $\Delta W = W(0) - W(\pi)$ из [10] и так же, как и ΔW ,

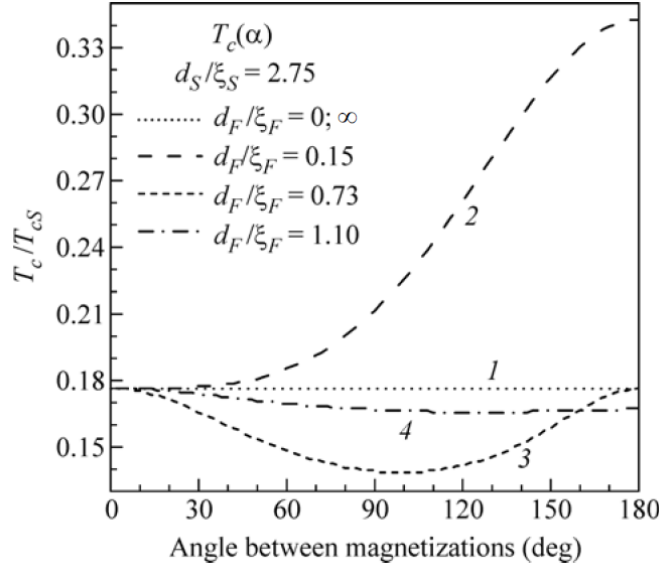


Рис. 5. Зависимость критической температуры структуры S/F1/F2 от угла разориентации намагниченностей для разных толщин F1 [10]. T_{cS} – критическая температура однородного сверхпроводника, $\xi_{S(F)}$ – длина когерентности сверхпроводника (ферромагнетиков).

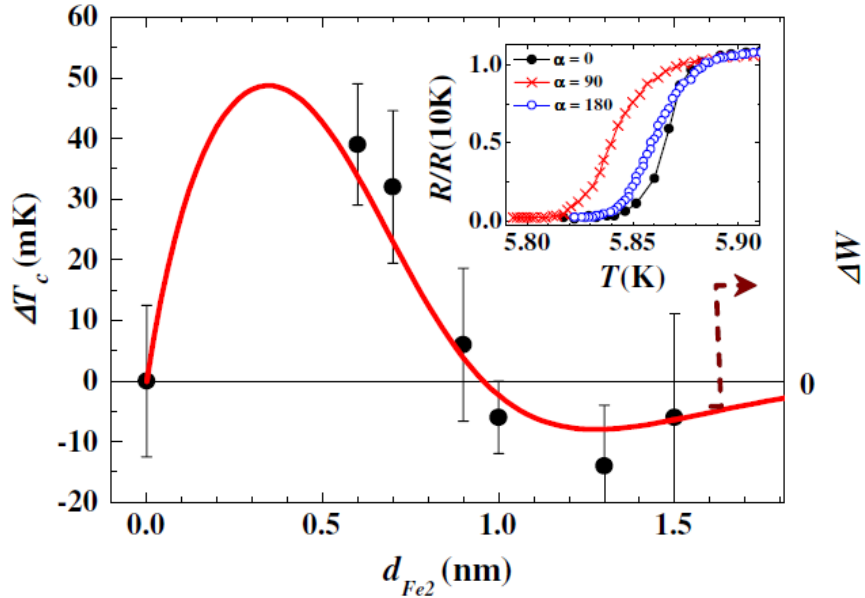


Рис. 6. Черные точки – зависимость $\Delta T_c = T_c^{AP} - T_c^P$ от толщины ближайшего к Pb слою Fe для структуры CoO/Fe/Cu/Fe/Pb [17]. Экспериментальные данные фитированы теоретической кривой для функции $\Delta W = W(0) - W(\pi)$ из работы [10]. На вставке – кривые сверхпроводящего перехода для разных углов разориентации намагниченностей α при $d_{Fe2} = 1.3$ нм.

может принимать положительные или отрицательные значения в зависимости от толщины ближайшего к сверхпроводнику ферромагнетика. Из кривых сверхпроводящего перехода для разных углов разориентации намагниченностей α на вставке к рис. 6 видно, что в этом эксперименте наблюдался и триплетный спин-вентильный эффект, когда T_c при $\alpha = \pi/2$ оказывалась ниже, чем в коллинеарных конфигурациях. На рис. 7 представлены экспериментальные зависимости критической температуры от угла разориентации намагниченностей из работы [22]. Для двух разных значений толщины

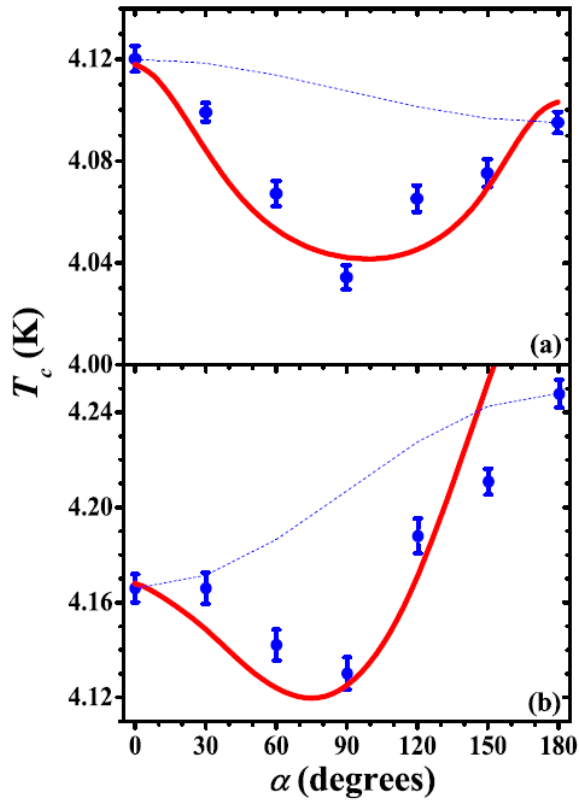


Рис. 7. Зависимость T_c от угла разориентации намагниченностей α для структур $\text{CoO}_x/\text{Pb}/\text{Cu}/\text{HA}/\text{Cu}/\text{Pb}$ с толщинами слоя $\text{HA} = \text{Co}_2/\text{Cr}_{1-x}/\text{Fe}_x\text{Al}_y$ 4 нм (а) и 1 нм (б) [22]. Синие точки – эксперимент, красные кривые – теоретический фит, синие пунктирные кривые – теоретические кривые без учета триплетного спин-вентильного эффекта.

ближайшего к сверхпроводнику ферромагнитного слоя наблюдался стандартный (б) и обратный (а) спин-вентильный эффект, при этом в обоих случаях заметен минимум T_c в неколлинеарной конфигурации, соответствующий триплетному эффекту.

В работе [20] было выполнено качественное сравнение теории, описывающей триплетный спин-вентильный эффект в структуре S/F/F, и экспериментального проявления этого эффекта. На рис. 8 представлены зависимости от угла разориентации намагниченностей α для двух характеристик: вычисленной из уравнений Боголюбова – де Жена средней амплитуды триплетных корреляций в дальнем от сверхпроводника ферромагнитном слое (красная кривая) и экспериментально измеренной для структуры $\text{CoO}/\text{Co}/\text{Cu}/\text{Co}/\text{Nb}$ величины $\Delta T_c = T_c(\alpha) - T_c(\alpha = 0)$ (синяя кривая, шкала для этой величины перевернута, чтобы показать подавление T_c триплетными корреляциями). Согласие между двумя этими зависимостями наглядно демонстрирует связь минимума критической температуры вблизи ортогональной конфигурации намагниченностей с генерацией дальнедействующей триплетной компоненты.

Теперь рассмотрим структуру типа F/S/F с ферромагнитными металлами. В работе [9] была теоретически описана система, изображенная на рис. 9. Ферромагнетики имеют одинаковые толщины d_f , угол разориентации их обменных полей в данных обозначениях составляет 2α . Рассматривается система в грязном пределе, описываемая уравнениями Узаделя. На рис. 10 изображены зависимости критической температуры от угла разориентации для разных толщин ферромагнитных слоев. Всем рассмотренным значениям d_f соответствуют монотонно неубывающие кривые $T_c(2\alpha)$. Таким образом, в отличие от структуры S/F/F, исследованной в [10], для структуры F/S/F теория

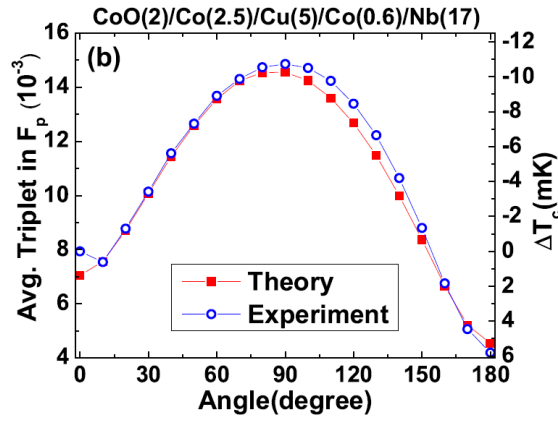


Рис. 8. Сравнение теории и эксперимента для триплетного спин-вентильного эффекта в системе S/F/F [20]. Красными квадратами обозначена посчитанная теоретически средняя амплитуда триплетных корреляций в дальнем от сверхпроводника ферромагнетике, нормированная на амплитуду синглетных корреляций в однородном сверхпроводнике. Синие точки – экспериментально измеренная для структуры CoO/Co/Cu/Co/Nb величина $\Delta T_c = T_c(\alpha) - T_c(\alpha = 0)$.

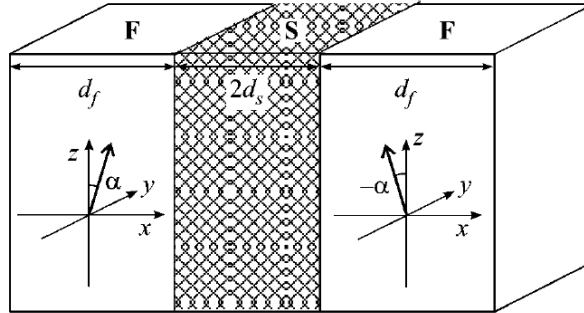


Рис. 9. Схема структуры F/S/F [9]. Жирными стрелками обозначены направления обменных полей ферромагнетиков, угол разориентации составляет 2α .

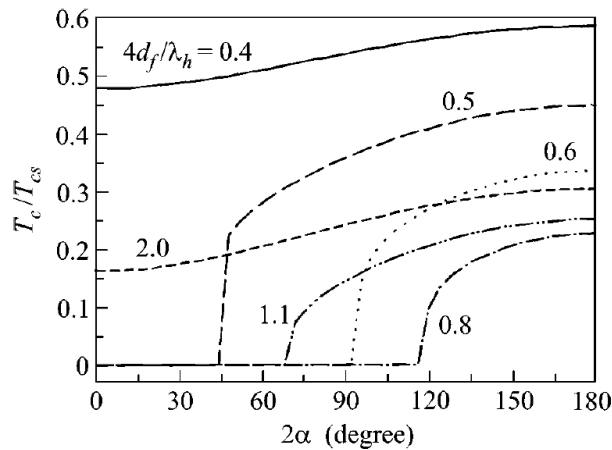


Рис. 10. Зависимость критической температуры структуры F/S/F от угла разориентации намагниченностей 2α для разных толщин ферромагнетиков d_f при $d_s/\xi_S = 1.2$ [9]. T_c нормирована на критическую температуру однородного сверхпроводника T_{cs} . $\lambda_h = 2\pi\sqrt{D_f/\hbar}$, где D_f – коэффициент диффузии в ферромагнетиках, \hbar – величина обменных полей.

предсказывает исключительно стандартный спин-вентильный эффект с $T_c^P < T_c^{AP}$.

Однако экспериментально для систем F/S/F с ферромагнитными металлами наблюдался и стандартный [15], и обратный [14, 19] эффект спинового вентиля. В работе [19] было предложено следующее объяснение полученного для структуры Py/Ho/Nb/Ho/Pu/FeMn результата $T_c^P > T_c^{AP}$, проиллюстрированное на рис. 11. Предполагает-

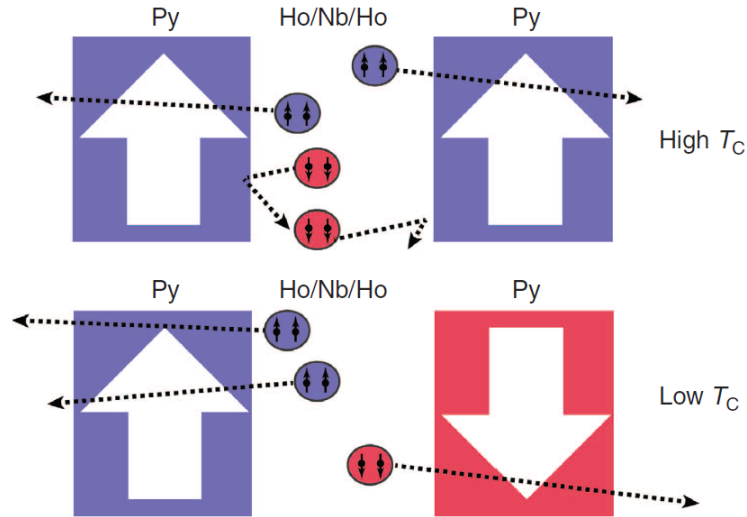


Рис. 11. Возможное объяснение обратного спин-вентильного эффекта в структуре Py/Ho/Nb/Ho/Pu/FeMn [19].

ся, что повышение критической температуры в параллельной конфигурации связано со спиновой селективностью границ S/F при прохождении триплетных пар: пары с направлением спина, совпадающим с направлением обменного поля, с большей вероятностью пройдут в ферромагнетик, а пары с противоположным направлением спина отразятся от границы и вернуться в сверхпроводник за счет условия сохранения спина на границе. Тогда в параллельной конфигурации (верхняя часть рис. 11) триплетные пары с противоположным обменному полю направлению спина не будут покидать сверхпроводник, что приводит к повышению критической температуры по сравнению с антипараллельной конфигурацией (нижняя часть рис. 11), когда любая триплетная пара может перейти в ферромагнетик с соответствующим направлением обменного поля.

1.2. Спиновые вентили на основе систем сверхпроводник / антиферромагнетик

Сверхпроводящие спиновые вентили на основе систем S/AF ранее не изучались, в то время как использование антиферромагнетиков вместо ферромагнетиков выглядит перспективным в связи с пренебрежимо малыми полями рассеяния и более высокими частотами магнонов [27–31]. В данной работе исследуется спин-вентильный эффект в гетероструктурах AF/S/AF с антиферромагнитными изоляторами с магнитным упорядочением типа G (с шахматным порядком намагниченности в каждом из базисных направлений кристаллической решетки) и полностью компенсированными границами S/AF, т. е. с нулевой суммарной намагниченностью. Схема рассматриваемой структуры и определение угла разориентации намагниченностей для нее приведены на рис. 12.

Может показаться, что такая система является инвариантной относительно изменения направления неелевских векторов одного из антиферромагнетиков на противоположное и конфигурации $\phi = 0$ и $\phi = \pi$ физически эквивалентны. Однако, как будет

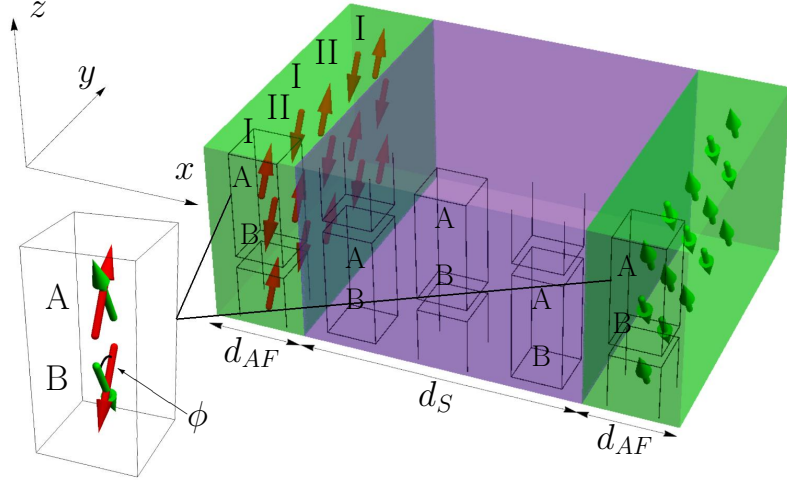


Рис. 12. Схема структуры AF/S/AF. Система разбита на две подрешетки A и B и элементарные ячейки, состоящие из двух узлов, относящихся к разным подрешеткам. Красными и зелеными стрелками показаны намагниченности левого и правого антиферромагнетиков на двух подрешетках. Угол разориентации ϕ определяется как угол между намагниченностями двух антиферромагнетиков на узлах, относящихся к одной и той же подрешетке. Вдоль оси y система разбита на слои двух чередующихся типов I и II (это разбиение будет полезно при описании системы методом Боголюбова – де Жена, см. раздел 2.2).

видно из представленных далее результатов, в исследуемой структуре может наблюдаться спин-вентильный эффект, несмотря на отсутствие макроскопической намагниченности в антиферромагнитных слоях. Объяснение состоит в том, что на каждой из S/AF границ генерируются триплетные корреляции неелевского типа, амплитуда которых меняет знак от атома к атому, повторяя неелевский магнитный порядок антиферромагнетиков [32]. Механизм влияния неелевских триплетов на возникновение спин-вентильного эффекта в структуре AF/S/AF с полностью компенсированными границами проиллюстрирован на рис. 13. Каждый антиферромагнетик по отдельности наводит в

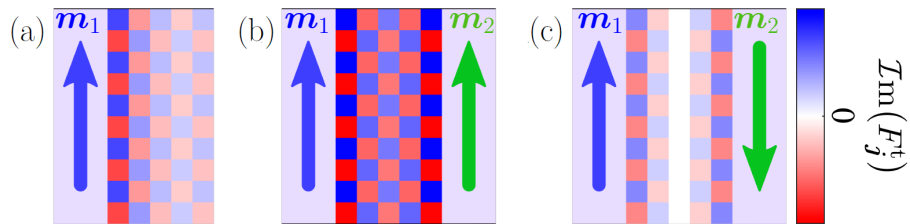


Рис. 13. Влияние неелевских триплетов на возникновение спин-вентильного эффекта в структуре AF/S/AF. m_1 , m_2 – намагниченности антиферромагнетиков на одной из подрешеток. Синий и красный цвета атомов в сверхпроводнике соответствуют разным знакам амплитуды триплетных корреляций на этих атомах F_j^t . (a) Амплитуда неелевских триплетных корреляций в бислое AF/S. (b) Конструктивная интерференция неелевских триплетов от двух границ S/AF в P-конфигурации. (c) Деструктивная интерференция неелевских триплетов от двух границ S/AF в AP-конфигурации.

сверхпроводнике неелевские триплетные корреляции, амплитуда которых изображена на панели (a). В случае $\phi = 0$ (b) амплитуды неелевских триплетов, генерируемых дву-

мя границами, эффективно суммируются внутри сверхпроводника и усиливают друг друга. В случае $\phi = \pi$ (с) эти амплитуды, наоборот, компенсируют друг друга, что должно приводить к менее эффективному подавлению сверхпроводимости, чем в параллельной конфигурации. Далее в работе, однако, будет показано, что вдали от половинного заполнения (т. е. нулевого значения химического потенциала сверхпроводника) в зависимости от толщины сверхпроводящего слоя в системе становится возможен как стандартный ($T_c^P < T_c^{AP}$), так и обратный ($T_c^P > T_c^{AP}$) спин-вентильный эффект.

Результаты, представленные в данной магистерской диссертации, были опубликованы в статьях [33] и [34].

Глава 2

Модель и методы

Рассматривается структура AF/S/AF с полностью компенсированными границами, схематически изображенная на рис. 12. Синглетный s -волновой сверхпроводник с толщиной d_S помещен между двумя антиферромагнитными изоляторами с одинаковыми толщинами d_{AF} , границы S/AF полностью прозрачные. Мы считаем кристаллические решетки сверхпроводника и антиферромагнетиков одинаковыми и применяем ко всей структуре единое разбиение на две подрешетки A и B и элементарные ячейки из двух узлов, относящихся к разным подрешеткам. Угол разориентации неелевских векторов ϕ определяется как угол между намагниченностями двух антиферромагнетиков на одной и той же подрешетке. Система координат $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ выбрана так, что $\mathbf{e}_x \parallel (\mathbf{h}_l \times \mathbf{h}_r)$ и $\mathbf{e}_z \parallel (\mathbf{h}_l + \mathbf{h}_r)$, где $\mathbf{h}_{l,r}$ – обменные поля на подрешетке A в левом и правом антиферромагнетике соответственно:

$$\mathbf{h}_l = h \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(\phi/2) \\ \cos(\phi/2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}_r = h \begin{pmatrix} 0 \\ -\sin(\phi/2) \\ \cos(\phi/2) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Точка $x = 0$ соответствует середине сверхпроводящего слоя. Для простоты мы будем рассматривать двумерную систему с периодическими граничными условиями вдоль направления границ S/AF.

Зависимость критической температуры структуры от угла разориентации неелевских векторов антиферромагнетиков исследуется двумя методами: аналитически в рамках квазиклассической теории и численно при помощи уравнений Боголюбова – де Жена. Дальнейшие разделы данной главы посвящены описанию этих методов.

2.1. Квазиклассическая теория

2.1.1. Уравнение Эйленбергера

В статье [32] была разработана квазиклассическая теория для гриновской функции, применяемая к описанию систем, состоящих из двух подрешеток. Мы воспользуемся этой теорией для исследования зависимости $T_c(\phi)$ и структуры сверхпроводящих корреляций в системе AF/S/AF в чистом случае.

Сверхпроводящий слой описывается следующим гамильтонианом в приближении сильной связи и представлении двух подрешеток:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i j \nu \bar{\nu} \rangle, \sigma} \hat{\psi}_{i\sigma}^{\nu\dagger} \hat{\psi}_{j\sigma}^{\bar{\nu}} + \sum_{i, \nu} (\Delta_i^\nu \hat{\psi}_{i\uparrow}^{\nu\dagger} \hat{\psi}_{i\downarrow}^{\nu\dagger} + \text{H.c.}) - \mu_S \sum_{i\nu, \sigma} \hat{n}_{i\sigma}^\nu + \sum_{i\nu, \alpha\beta} \hat{\psi}_{i\alpha}^{\nu\dagger} (\mathbf{h}_i^\nu \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta} \hat{\psi}_{i\beta}^\nu. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{i}, \mathbf{j} – радиус-векторы элементарных ячеек как целого, индекс $\nu = A, B$ обозначает два узла элементарной ячейки, относящиеся к разным подрешеткам, $\bar{\nu} = B(A)$ при $\nu = A(B)$. $\hat{\psi}_{i\sigma}^{\nu\dagger}$ ($\hat{\psi}_{i\sigma}^\nu$) – операторы рождения (уничтожения) электрона со спином σ на узле элементарной ячейки $\mathbf{i} = (i_x, i_y)^T$ (i_x, i_y – безразмерные, т. е. измеряемые в терминах количества узлов, компоненты радиус-вектора \mathbf{i} вдоль соответствующих осей) на подрешетке ν . Оси x и y направлены перпендикулярно и параллельно границам S/AF соответственно. Суммирование по $\langle i j \nu \bar{\nu} \rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям, H.c. – эрмитово сопряженное слагаемое. t – энергия прыжка между соседними узлами, μ_S – химический потенциал сверхпроводника, $\hat{n}_{i\sigma}^\nu = \hat{\psi}_{i\sigma}^{\nu\dagger} \hat{\psi}_{i\sigma}^\nu$ – оператор числа

частиц на узле (\mathbf{i}, ν) . Δ_i^ν и \mathbf{h}_i^ν – сверхпроводящий параметр порядка и обменное поле соответственно на узле (\mathbf{i}, ν) . Вектор $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$ – вектор матриц Паули в спиновом пространстве.

Обменное поле в левом и правом антиферромагнетике соответственно описывается формулой $\mathbf{h}_i^{A(B)} = +(-)\mathbf{h}_{l,r}$, при этом на всех узлах антиферромагнетиков мы считаем модуль намагниченности постоянным: $|\mathbf{h}_l| = |\mathbf{h}_r| = h$. В сверхпроводнике обменное поле равно нулю. Для сверхпроводящего параметра порядка имеем $\Delta_i^A = \Delta_i^B = \Delta_i$, вне сверхпроводника $\Delta_i = 0$.

В рамках формализма двух подрешеток система описывается спинором в 8-мерном пространстве (прямом произведении спинового, частично-дырочного и подрешеточного пространств): $\check{\psi}_i = (\hat{\psi}_{i\uparrow}^A, \hat{\psi}_{i\downarrow}^A, \hat{\psi}_{i\uparrow}^B, \hat{\psi}_{i\downarrow}^B, \hat{\psi}_{i\uparrow}^{A\dagger}, \hat{\psi}_{i\downarrow}^{A\dagger}, \hat{\psi}_{i\uparrow}^{B\dagger}, \hat{\psi}_{i\downarrow}^{B\dagger})^T$. Мацубаровская функция Грина определяется следующим образом:

$$\check{G}_{ij}(\tau_1, \tau_2) = -\langle T_\tau \check{\psi}_i(\tau_1) \check{\psi}_j^\dagger(\tau_2) \rangle, \quad (4)$$

где $\langle T_\tau \dots \rangle$ – усредненное по температуре упорядочение по мнимому времени τ . Поскольку в рассматриваемой задаче все характерные пространственные масштабы велики по сравнению с межатомным расстоянием, мы можем заменить дискретные индексы \mathbf{i} и \mathbf{j} на непрерывную пространственную переменную \mathbf{R} . Это соответствует переходу к функции Грина в смешанном представлении, зависящей от импульса \mathbf{p} , координаты \mathbf{R} и мацубаровской частоты $\omega_m = \pi T(2m + 1)$:

$$\check{G}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_m) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \check{G}_{ij}(\omega_m), \quad (5)$$

где $\mathbf{R} = (\mathbf{i} + \mathbf{j})/2$, $\mathbf{r} = \mathbf{i} - \mathbf{j}$. Далее удобно определить следующую преобразованную функцию Грина:

$$\check{\check{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_m) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_y \end{pmatrix}_\tau \rho_x e^{-\frac{i\rho_z a_z \rho_z}{2}} \check{G}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_m) e^{\frac{i\rho_z a_z \rho_z}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_y \end{pmatrix}_\tau, \quad (6)$$

где a_i – модуль базисного вектора решетки \mathbf{a}_i , ρ_i и τ_i – матрицы Паули в подрешеточном и частично-дырочном пространствах, соответственно, $i = x, y, z$, индекс τ означает, что приведен явный вид матрицы в частично-дырочном пространстве. Наконец, проинтегрировав $\check{\check{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_m)$ по отсчитанной от энергии Ферми дисперсии электрона $\xi(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m - \mu$, мы можем перейти к квазиклассической функции Грина

$$\check{g}(\mathbf{R}, \mathbf{p}_F, \omega_m) = -\frac{1}{i\pi} \int \check{\check{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_m) d\xi, \quad (7)$$

зависящей от радиус-вектора \mathbf{R} , направления импульса электрона на поверхности Ферми \mathbf{p}_F и мацубаровской частоты ω_m .

Квазиклассическая функция Грина в сверхпроводнике подчиняется следующему уравнению Эйленберга в баллистическом пределе [32]:

$$\left[\left(i\omega_m \tau_z + \mu_S + \tau_z \check{\Delta}(\mathbf{R}) - \mathbf{h}(x) \boldsymbol{\sigma} \rho_z \tau_z a \right) \rho_x, \check{g} \right] + i\mathbf{v}_F \nabla \check{g} = 0, \quad (8)$$

где $\mathbf{h}(x) = \mathbf{h}_l \delta(x + d_S/2) + \mathbf{h}_r \delta(x - d_S/2)$, $\check{\Delta}(\mathbf{R}) = \Delta(\mathbf{R}) \tau_x$, $a \equiv a_x$, \mathbf{v}_F – скорость Ферми для траектории \mathbf{p}_F . Член, пропорциональный $\mathbf{h}_{l,r} \boldsymbol{\sigma} a \delta(x \pm d_S/2)$, описывает обменное поле на левой и правой S/AF границах $x = \mp d_S/2$. В силу трансляционной инвариантности системы в направлении границ S/AF функция Грина зависит только от координаты x , поэтому член $i\mathbf{v}_F \nabla \check{g}$ в (8) можно переписать в виде $i\mathbf{v}_{F,x} d\check{g}/dx$. В рамках данной задачи мы предполагаем толщину сверхпроводника d_S малой по сравнению

со сверхпроводящей длиной когерентности $\xi_S = v_F/2\pi T_{c0}$, где T_{c0} – критическая температура однородного сверхпроводника. Поэтому параметр порядка в сверхпроводнике можно считать пространственно однородным: $\Delta(\mathbf{R}) \approx \Delta$.

Определим функции Грина, соответствующие падающей и отраженной по отношению к правой границе S/AF траекториям, как $\check{g}_+(x) \equiv \check{g}(x, v)$ и $\check{g}_-(x) \equiv \check{g}(x, -v)$, где для краткости введено обозначение $v \equiv |v_{F,x}|$. Уравнение Эйленбергера (8) на функцию Грина для заданной траектории $\check{g}_{+(-)}(x)$ также сопровождается условием нормировки

$$[\check{g}_{+(-)}(x)]^2 = 1 \quad (9)$$

и граничными условиями в точках $x = \mp d_S/2$. В связи с симметрией, возникающей при данном выборе системы координат, они сводятся к одному условию на одной из границ (далее мы будем использовать граничное условие в точке $x = d_S/2$).

Структура функции Грина в частично-дырочном пространстве имеет вид

$$\check{g} = \begin{pmatrix} \hat{g} & \hat{f} \\ \hat{f} & \hat{g} \end{pmatrix}_\tau, \quad (10)$$

где все компоненты – это матрицы 4×4 в пространстве, являющемся прямым произведением спинового и подрешеточного пространств. Компоненты \hat{g} и \hat{g} соответствуют нормальным функциям Грина, а \hat{f} и \hat{f} – аномальным. Мы рассматриваем систему при температурах, близких к критической, поэтому уравнение Эйленбергера (8) можно линеаризовать по параметру Δ/T_c . Тогда задача о вычислении функций Грина сводится к тому, что мы сначала находим компоненты \hat{g} и \hat{g} для сверхпроводника в нормальном состоянии (при $\Delta = 0$), а затем подставляем их в линеаризованное по Δ/T_c уравнение Эйленбергера, из которого определяем аномальные компоненты \hat{f} и \hat{f} .

2.1.2. Граничные условия

Уравнение Эйленбергера на функцию Грина сверхпроводника в нормальном состоянии

$$\check{g}^N = \begin{pmatrix} \hat{g} & 0 \\ 0 & \hat{g} \end{pmatrix}_\tau \quad (11)$$

принимает вид

$$\left[\left(i\omega_m \tau_z + \mu_S - \mathbf{h}(x) \boldsymbol{\sigma} \rho_z \tau_z a \right) \rho_x, \check{g}^N \right] + i v_{F,x} \frac{d}{dx} \check{g}^N = 0. \quad (12)$$

Получим граничное условие на \check{g}^N , т. е. соотношение между функциями Грина для падающей и отраженной траекторий $\check{g}_+^N(x)$ и $\check{g}_-^N(x)$ на правой S/AF границе $x = d_S/2$. Вблизи правого края сверхпроводника уравнение (12) запишется как

$$\left[\left(i\omega_m \tau_z + \mu_S - \mathbf{h}_r \boldsymbol{\sigma} \rho_z \tau_z a \delta(x - d_S/2) \right) \rho_x, \check{g}^N \right] + i v_{F,x} \frac{d}{dx} \check{g}^N = 0, \quad (13)$$

что приводит к соотношению

$$i v \left(\check{g}_-^N(x = d_S/2) - \check{g}_+^N(x = d_S/2) \right) = \int_C [\mathbf{h}_r \boldsymbol{\sigma} a \rho_z \rho_x \tau_z \delta(x - d_S/2), \check{g}^N] dx, \quad (14)$$

где интеграл берется по множеству $C = [d_S/2 - \varepsilon, d_S/2] \cup [d_S/2, d_S/2 + \varepsilon]$, $\varepsilon \rightarrow 0$. Отсюда получаем граничное условие:

$$\delta \check{g}^N \equiv \check{g}_-^N(x = d_S/2) - \check{g}_+^N(x = d_S/2) = \frac{2\tau_z}{v} \left[a \mathbf{h}_r \boldsymbol{\sigma} \rho_y, \frac{\hat{g}_+(x = d_S/2) + \hat{g}_-(x = d_S/2)}{2} \right]. \quad (15)$$

Аномальная функция Грина \hat{f} определяется из соответствующей компоненты уравнения Эйленберга (8), записанной в линейном порядке по Δ/T_c :

$$\left\{ \left(i\omega_m - \mathbf{h}(x) \boldsymbol{\sigma} \rho_z a \right) \rho_x, \hat{f} \right\} + \mu_S [\rho_x, \hat{f}] + \Delta (\rho_x \hat{g} - \hat{g} \rho_x) + i v_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{f} = 0. \quad (16)$$

Вблизи правой границы S/AF (16) принимает вид

$$\left\{ \left(i\omega_m - \mathbf{h}_r \boldsymbol{\sigma} \rho_z a \delta(x - d_S/2) \right) \rho_x, \hat{f} \right\} + \mu_S [\rho_x, \hat{f}] + \Delta (\rho_x \hat{g} - \hat{g} \rho_x) + i v_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{f} = 0, \quad (17)$$

откуда по аналогии с уравнениями (13)-(15) получаем граничное условие на \hat{f} :

$$\delta \hat{f} \equiv \hat{f}_-(x = d_S/2) - \hat{f}_+(x = d_S/2) = \frac{2}{v} \left\{ a \mathbf{h}_r \boldsymbol{\sigma} \rho_y, \frac{\hat{f}_+(x = d_S/2) + \hat{f}_-(x = d_S/2)}{2} \right\}. \quad (18)$$

2.1.3. Следствия симметрии

Для дальнейших вычислений удобно ввести следующие разложения компонент функции Грина (10) по матрицам Паули в подрешеточном пространстве и по произведениям матриц Паули в спиновом и подрешеточном пространствах соответственно:

$$\hat{g} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \hat{g}_{\alpha}, \quad \hat{g} = \sum_{\alpha, \beta} \sigma_{\alpha} \rho_{\beta} g_{\alpha\beta}, \quad (19)$$

и аналогично для матриц \hat{f} , \hat{f} и \hat{g} , где $\alpha, \beta \in \{0, x, y, z\}$.

Проанализируем, к каким следствиям приводит симметрия исследуемой системы. Рассмотрим поворот на угол π вокруг оси z :

$$x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow -y, \quad z \rightarrow z. \quad (20)$$

Выясним, что происходит с различными математическими объектами, присутствующими в задаче, после поворота (20). Скалярные величины не изменяются ($A(x) \rightarrow A(-x)$), компоненты векторов изменяются следующим образом: $A_x(x) \rightarrow -A_x(-x)$, $A_y(x) \rightarrow -A_y(-x)$, $A_z(x) \rightarrow A_z(-x)$. При этом структура векторов матриц Паули в частично-дырочном и подрешеточном пространствах не меняется, а вектор матриц Паули в спиновом пространстве $\boldsymbol{\sigma}$ меняется так же, как обычный вектор. В связи с симметрией при выборе координатных осей сама система инвариантна относительно поворота (20), но падающая и отраженная функции Грина переходят друг в друга. Это приводит к следующим соотношениям между компонентами $\check{g}_+(-x)$ и $\check{g}_-(x)$:

$$\begin{aligned} \check{g}_{0\alpha,-}(x) &= \check{g}_{0\alpha,+}(-x), \\ \check{g}_{x\alpha,-}(x) &= -\check{g}_{x\alpha,+}(-x), \\ \check{g}_{y\alpha,-}(x) &= -\check{g}_{y\alpha,+}(-x), \\ \check{g}_{z\alpha,-}(x) &= \check{g}_{z\alpha,+}(-x), \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\check{g}_{\beta\alpha,+(-)} \equiv \begin{pmatrix} g_{\beta\alpha,+(-)} & f_{\beta\alpha,+(-)} \\ f_{\beta\alpha,+(-)} & \tilde{g}_{\beta\alpha,+(-)} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Поэтому далее мы приведем явное выражение только для $\check{g}_+(x) \equiv \check{g}(x)$, имея в виду, что $\check{g}_-(x)$ можно получить из соотношений (21).

Теперь заметим, что трансформация подрешетки A в подрешетку B одновременно с заменой направления обменного поля на противоположное $h \rightarrow -h$ не влияют на систему, а значит, не влияют и на функцию Грина. Запишем \check{g} в форме $\check{g} = \check{g}^0 + \check{g}^h$, где \check{g}^0 и \check{g}^h – соответственно четная и нечетная функции относительно замены $h \rightarrow -h$. Тогда трансформация $A \leftrightarrow B$ подействует как $\check{g}^0 \rightarrow \check{g}^0$, $\check{g}^h \rightarrow -\check{g}^h$. С другой стороны, трансформация $A \leftrightarrow B$ меняет знак у $\rho_{y,z}$ -компонент функции Грина в пространстве подрешеток и оставляет без изменений $\rho_{0,x}$ -компоненты. Следовательно, \check{g}^0 содержит только $\rho_{0,x}$ -компоненты, а \check{g}^h – только $\rho_{y,z}$ -компоненты.

Из двух векторов $\mathbf{h}_{l,r}$, характеризующих рассматриваемую систему, можно составить следующие простейшие комбинации, описывающие функцию Грина в спиновом пространстве: \mathbf{h}_l , \mathbf{h}_r , $\mathbf{h}_l\mathbf{h}_r$ и $\mathbf{h}_l \times \mathbf{h}_r$. Первые две комбинации – нечетные относительно $h \rightarrow -h$ функции, вторые две – четные. Поскольку замена $h \rightarrow -h$ меняет знак у $\sigma_{y,z}$ -компонент функции Грина и не меняет – у $\sigma_{0,x}$ -компонент, \mathbf{h}_l и \mathbf{h}_r входят в выражения для компонент $\sigma_{y,z}$, а $\mathbf{h}_l\mathbf{h}_r$ и $\mathbf{h}_l \times \mathbf{h}_r$ – для компонент $\sigma_{0,x}$. Отсюда получаем, что у \check{g}_0 и \check{g}_x из первого выражения (19) в разложении по матрицам Паули в спиновом пространстве не равны нулю только компоненты σ_0, σ_x , а у \check{g}_y и \check{g}_z – только компоненты σ_y, σ_z (то есть, зануляются компоненты $\check{g}_{xy}, \check{g}_{xz}, \check{g}_{0y}, \check{g}_{0z}, \check{g}_{z0}, \check{g}_{zx}, \check{g}_{y0}, \check{g}_{yx}$).

Наконец, еще одно следствие симметрии относительно поворота (20) и структуры граничных условий (15), (18) – это следующее дополнение к соотношениям (21) (его также можно считать анзацем):

$$\begin{aligned}\check{g}_{zy,+}(x) &= \check{g}_{zy,+}(-x) = \check{g}_{zy,-}(x), \\ \check{g}_{zz,+}(x) &= -\check{g}_{zz,+}(-x) = -\check{g}_{zz,-}(x), \\ \check{g}_{yy,+}(x) &= -\check{g}_{yy,+}(-x) = \check{g}_{yy,-}(x), \\ \check{g}_{yz,+}(x) &= \check{g}_{yz,+}(-x) = -\check{g}_{yz,-}(x).\end{aligned}\tag{23}$$

2.1.4. Вычисление нормальной функции Грина

Уравнение Эйленбергера (12) для компоненты \hat{g} функции Грина в нормальном состоянии, соответствующей частицам, вдали от границ S/AF принимает вид

$$[(i\omega_m + \mu_S)\rho_x, \hat{g}] + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{g} = 0.\tag{24}$$

Распишем его покомпонентно в пространстве подрешеток:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx} \hat{g}_0 &= 0, \\ \frac{d}{dx} \hat{g}_x &= 0, \\ 2(-\omega_m + i\mu_S)\hat{g}_y + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{g}_z &= 0, \\ 2(\omega_m - i\mu_S)\hat{g}_z + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{g}_y &= 0.\end{aligned}\tag{25}$$

Отсюда

$$\begin{aligned}\hat{g}_0 &= \hat{C}_1, \\ \hat{g}_x &= \hat{C}_2, \\ \hat{g}_y &= \hat{C}_3 e^{\kappa x} + \hat{C}_4 e^{-\kappa x}, \\ \hat{g}_z &= i(\hat{C}_3 e^{\kappa x} - \hat{C}_4 e^{-\kappa x}),\end{aligned}\tag{26}$$

где $\kappa = 2(i\mu_S - \omega_m)/v$, а \hat{C}_i – матрицы 2×2 неизвестных коэффициентов в спиновом пространстве. Как было показано выше, компоненты $g_{xy}, g_{xz}, g_{0y}, g_{0z}, g_{z0}, g_{zx}, g_{y0}, g_{yx}$ равны нулю вследствие ограничений на функцию Грина, накладываемых симметрией. С учетом соотношений (23) получаем следующие выражения для остальных компонент \hat{g} :

$$\begin{aligned}
g_{00} &= \text{const}, \\
g_{x0} &= \text{const}, \\
g_{0x} &= \text{const}, \\
g_{xx} &= \text{const}, \\
g_{yy} &= iB \sinh \kappa x, \\
g_{zy} &= -A \cosh \kappa x, \\
g_{yz} &= B \operatorname{sgn} v_{F,x} \cosh \kappa x, \\
g_{zz} &= iA \operatorname{sgn} v_{F,x} \sinh \kappa x,
\end{aligned} \tag{27}$$

где A и B – неизвестные коэффициенты.

Чтобы найти константы из (27), воспользуемся соответствующими компонентами граничного условия (15). Их можно записать в виде:

$$\begin{aligned}
\delta g_{00} &= 0, \\
\delta g_{x0} &= -\left(g_{yy}(x = d_S/2)\gamma_z - g_{zy}(x = d_S/2)\gamma_y\right), \\
\delta g_{0x} &= +\left(g_{zz}(x = d_S/2)\gamma_z + g_{yz}(x = d_S/2)\gamma_y\right), \\
\delta g_{xx} &= 0, \\
\delta g_{yy} &= +g_{x0}(x = d_S/2)\gamma_z, \\
\delta g_{zy} &= -g_{x0}(x = d_S/2)\gamma_y, \\
\delta g_{yz} &= -g_{0x}(x = d_S/2)\gamma_y, \\
\delta g_{zz} &= -g_{0x}(x = d_S/2)\gamma_z,
\end{aligned} \tag{28}$$

где $\gamma_{y,z} = 4iah_{y,z}/v$. Отсюда сразу получаем $g_{00} = g_{xx} = 0$. Оставшиеся неизвестные коэффициенты g_{x0}, g_{0x}, A и B найдем, подставив выражения (27) для $g_{yy}, g_{yz}, g_{zy}, g_{zz}$ в последние 4 уравнения (28) и воспользовавшись условием нормировки (9), которое переписется как

$$A^2 + B^2 + g_{0x}^2 + g_{x0}^2 = 1. \tag{29}$$

Итоговое выражение для компоненты \hat{g} функции Грина в нормальном состоянии, соответствующей частицам, принимает вид

$$\begin{aligned}
\hat{g} &= \operatorname{sgn} \omega_m [g_{0x}\sigma_0\rho_x + g_{x0}\sigma_x\rho_0 + B\sigma_y(i\rho_y \sinh \kappa x + \rho_z \operatorname{sgn} v_{F,x} \cosh \kappa x) + \\
&\quad A\sigma_z(i\rho_z \operatorname{sgn} v_{F,x} \sinh \kappa x - \rho_y \cosh \kappa x)]
\end{aligned} \tag{30}$$

с коэффициентами

$$\begin{aligned}
g_{0x} &= \frac{1}{\sqrt{(1 + \gamma_a^2)(1 + \gamma_b^2)}}, \\
g_{x0} &= \frac{\gamma_a\gamma_b}{\sqrt{(1 + \gamma_a^2)(1 + \gamma_b^2)}}, \\
A &= \frac{\gamma_a}{\sqrt{(1 + \gamma_a^2)(1 + \gamma_b^2)}}, \\
B &= \frac{\gamma_b}{\sqrt{(1 + \gamma_a^2)(1 + \gamma_b^2)}},
\end{aligned} \tag{31}$$

где $\gamma_a = 2ah_z/[v \sinh(\kappa d_S/2)]$, $\gamma_b = 2iah_y/[v \cosh(\kappa d_S/2)]$, $h_{y,z} \equiv (\mathbf{h}_l)_{y,z}$ (в первом порядке по κd_S $\gamma_a = 2ah_z/(-\omega_m + i\mu_S)d_S$, $\gamma_b = -2ah_y/v$). Выражение для компоненты \hat{g} , соответствующей дыркам, получается из выражения для частичной компоненты (30) при помощи соотношения

$$\hat{g}(\omega_m, \mathbf{h}_r, \mu_S) = \hat{g}(-\omega_m, -\mathbf{h}_r, \mu_S), \quad (32)$$

которое следует из структуры уравнения (12) в частично-дырочном пространстве.

2.1.5. Вычисление аномальной функции Грина

Уравнение Эйленбергера на аномальную функцию Грина \hat{f} (16) вдали от границ с антиферромагнетиками запишется в виде:

$$i\omega_m\{\rho_x, \hat{f}\} + \mu_S[\rho_x, \hat{f}] + \Delta(\rho_x \hat{g} - \hat{g} \rho_x) + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{f} = 0. \quad (33)$$

Удобно ввести следующие матрицы 2×2 в пространстве подрешеток:

$$\begin{aligned} \hat{G}_0 &= \Delta(\hat{g}_0 - \hat{g}_0), \\ \hat{G}_x &= \Delta(\hat{g}_x - \hat{g}_x), \\ \hat{G}_y &= -i\Delta(\hat{g}_y + \hat{g}_y), \\ \hat{G}_z &= i\Delta(\hat{g}_z + \hat{g}_z). \end{aligned} \quad (34)$$

Тогда покомпонентная запись уравнения (33) в этом пространстве примет вид:

$$\begin{aligned} 2i\omega_m \hat{f}_x + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{f}_0 &= \hat{G}_x, \\ 2i\omega_m \hat{f}_0 + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{f}_x &= \hat{G}_0, \\ -2i\mu_S \hat{f}_z + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{f}_y &= \hat{G}_z, \\ 2i\mu_S \hat{f}_y + iv_{F,x} \frac{d}{dx} \hat{f}_z &= \hat{G}_y. \end{aligned} \quad (35)$$

Для упрощения дальнейших расчетов разложим матрицы (34) до линейного порядка по x : $\hat{G}_{y,z} = \hat{G}_{y,z}^0 + \hat{G}'_{y,z}x$ (матрицы $\hat{G}_{0,x}$, как видно из решения для нормальной функции Грина (30), от x не зависят). Тогда общее решение системы (35) запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{f}_0 &= \hat{A} \sinh\left(\frac{2\omega_m}{v}x\right) + \hat{B} \cosh\left(\frac{2\omega_m}{v}x\right) + \frac{\hat{G}_0}{2i\omega_m}, \\ \hat{f}_x &= -\hat{A} \cosh\left(\frac{2\omega_m}{v}x\right) - \hat{B} \sinh\left(\frac{2\omega_m}{v}x\right) + \frac{\hat{G}_x}{2i\omega_m}, \\ \hat{f}_y &= \hat{C} \sin\left(\frac{2\mu_S}{v}x\right) + \hat{D} \cos\left(\frac{2\mu_S}{v}x\right) + \frac{\hat{G}_y^0 + \hat{G}'_y x}{2i\mu_S} + \frac{v}{4i\mu_S^2} \hat{G}'_z, \\ \hat{f}_z &= \hat{C} \cos\left(\frac{2\mu_S}{v}x\right) - \hat{D} \sin\left(\frac{2\mu_S}{v}x\right) - \frac{\hat{G}_z^0 + \hat{G}'_z x}{2i\mu_S} + \frac{v}{4i\mu_S^2} \hat{G}'_y, \end{aligned} \quad (36)$$

где $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}$ – матрицы 2×2 неизвестных коэффициентов в спиновом пространстве.

Компоненты $f_{0y}, f_{0z}, f_{xy}, f_{xz}, f_{y0}, f_{yx}, f_{z0}, f_{zx}$, как и соответствующие компоненты нормальной функции Грина, равны нулю вследствие симметрии. Выражения для остальных компонент в линейном приближении по x запишутся в виде:

$$\begin{aligned}
f_{00} &= A_0 \frac{2\omega_m}{v} x \operatorname{sgn} v_{F,x} + B_0 + \frac{G_{00}}{2i\omega_m}, \\
f_{0x} &= -A_0 - B_0 \frac{2\omega_m}{v} x \operatorname{sgn} v_{F,x} + \frac{G_{0x}}{2i\omega_m}, \\
f_{x0} &= A_x \frac{2\omega_m}{v} x + \left(B_x + \frac{G_{x0}}{2i\omega_m} \right) \operatorname{sgn} v_{F,x}, \\
f_{xx} &= \left(-A_x + \frac{G_{xx}}{2i\omega_m} \right) \operatorname{sgn} v_{F,x} - B_x \frac{2\omega_m}{v} x, \\
f_{yy} &= \left(C_y \frac{2\mu_S}{v} + \frac{G'_{yy}}{2i\mu_S} \right) x + D_y \operatorname{sgn} v_{F,x} + \left(G_{yy}^0 + \frac{v}{2\mu_S} G'_{yz} \right) \frac{\operatorname{sgn} v_{F,x}}{2i\mu_S}, \\
f_{yz} &= C_y \operatorname{sgn} v_{F,x} - \left(D_y \frac{2\mu_S}{v} + \frac{G'_{yz}}{2i\mu_S} \right) x + \left(-G_{yz}^0 + \frac{v}{2\mu_S} G'_{yy} \right) \frac{\operatorname{sgn} v_{F,x}}{2i\mu_S}, \\
f_{zy} &= \left(C_z \frac{2\mu_S}{v} + \frac{G'_{zy}}{2i\mu_S} \right) x \operatorname{sgn} v_{F,x} + D_z + \left(G_{zy}^0 + \frac{v}{2\mu_S} G'_{zz} \right) \frac{1}{2i\mu_S}, \\
f_{zz} &= C_z - \left(D_z \frac{2\mu_S}{v} + \frac{G'_{zz}}{2i\mu_S} \right) x \operatorname{sgn} v_{F,x} + \left(-G_{zz}^0 + \frac{v}{2\mu_S} G'_{zy} \right) \frac{1}{2i\mu_S}, \tag{37}
\end{aligned}$$

где мы использовали разложения $\hat{A} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} A_{\alpha}$, $\hat{B} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} B_{\alpha}$, $\hat{C} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} C_{\alpha}$, $\hat{D} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} D_{\alpha}$, $\hat{G}_{\beta} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} G_{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta \in \{0, x, y, z\}$. Коэффициенты $G_{\alpha\beta}$ и $G'_{\alpha\beta}$ известны из решения для нормальной функции Грина (30), при этом $G'_{yz} = G'_{zy} = G_{yy}^0 = G_{zz}^0 = G_{00} = G_{xx} = 0$. Из симметричных соотношений (23) получаем $B_0 = A_x = D_y = C_z = 0$.

Интересующие нас компоненты граничного условия (18) принимают вид:

$$\begin{aligned}
\delta f_{00} &= \frac{4a}{v} \left(h_z f_{zy}(x = d_S/2) + h_y f_{yy}(x = d_S/2) \right), \\
\delta f_{0x} &= 0, \\
\delta f_{x0} &= 0, \\
\delta f_{xx} &= \frac{4a}{v} \left(h_z f_{yz}(x = d_S/2) - h_y f_{zz}(x = d_S/2) \right), \\
\delta f_{yy} &= \frac{4a}{v} h_y f_{00}(x = d_S/2), \\
\delta f_{yz} &= \frac{4a}{v} h_z f_{xx}(x = d_S/2), \\
\delta f_{zy} &= \frac{4a}{v} h_z f_{00}(x = d_S/2), \\
\delta f_{zz} &= -\frac{4a}{v} h_y f_{xx}(x = d_S/2). \tag{38}
\end{aligned}$$

Подставляя сюда выражения (37), находим оставшиеся неизвестные коэффициенты A_0, B_x, C_y и D_z .

В итоге в первом порядке по x/ξ_S (напомним, что мы рассматриваем задачу при $d_S \ll \xi_S$) аномальная функция Грина принимает вид $\hat{f} = \sum_{\alpha, \beta} \sigma_{\alpha} \rho_{\beta} f_{\alpha\beta}$ со следующими ненулевыми компонентами (компонента f_{x0} зануляется при подстановке в (37) выраже-

ния для B_x):

$$\begin{aligned}
f_{00} &= A_0 \frac{2\omega_m}{v} x \operatorname{sgn} v_{F,x}, \\
f_{0x} &= -A_0 + \frac{G_{0x}}{2i\omega_m}, \\
f_{xx} &= -B_x \frac{2\omega_m}{v} x, \\
f_{yy} &= \left(C_y \frac{2\mu_S}{v} + \frac{G'_{yy}}{2i\mu_S} \right) x, \\
f_{yz} &= \operatorname{sgn} v_{F,x} \left(C_y + \frac{1}{2i\mu_S} \left(-G_{yz}^0 + \frac{v}{2\mu_S} G'_{yy} \right) \right), \\
f_{zy} &= D_z + \frac{1}{2i\mu_S} \left(G_{zy}^0 + \frac{v}{2\mu_S} G'_{zz} \right), \\
f_{zz} &= -x \operatorname{sgn} v_{F,x} \left(D_z \frac{2i\mu_S}{v} - \frac{G'_{zz}}{2i\mu_S} \right), \tag{39}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
A_0 &= \frac{ia(G'_{zz}h_zv^4 + 4\mu_S(v^2(G_{zy}^0h_zv + d_S G_{yz}^0h_y\mu_S) - 2G_{x0}h_yh_z a(v^2 + d_S^2\mu_S^2)))}{4d_Sv^3\mu_S^2\omega_m}, \\
B_x &= \frac{iG_{x0}}{2\omega_m}, \\
C_y &= \frac{i(G'_{yy}v^3 + 2\mu_S(-G_{yz}^0v^2 + 2d_S G_{x0}h_z a\mu_S))}{4v^2\mu_S^2}, \\
D_z &= \frac{i(G'_{zz}v^2 + 8G_{x0}h_y a\mu_S)}{8v\mu_S^2}. \tag{40}
\end{aligned}$$

2.1.6. Вычисление критической температуры

Критическая температура сверхпроводника для заданного значения угла разориентации ϕ определяется при помощи уравнения самосогласования

$$\Delta(x) = \int \frac{d\Omega}{4\pi} i\pi\lambda T_c \sum_{\omega_m} f_{0x}(x), \tag{41}$$

где λ – безразмерная константа сверхпроводящего спаривания, а $\int \frac{d\Omega}{4\pi}$ соответствует усреднению подынтегрального выражения по поверхности Ферми. Как видно из (39), в линейном приближении по x компонента f_{0x} , соответствующая амплитуде синглетных корреляций на узле, является константой, сверхпроводящий параметр порядка Δ в нашей задаче также не зависит от координаты. Поэтому уравнение (41) можно переписать как

$$1 = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{i\pi\lambda T_c}{\Delta} \sum_{\omega_m} f_{0x}. \tag{42}$$

Далее алгоритм вычисления критической температуры для каждого значения ϕ следующий. Подставляем в правую часть (42) выражение для f_{0x} из (39). Суммирование по мацубаровским частотам мы ограничиваем частотой Дебая Ω_D . При этом, чтобы

уменьшить влияние данного ограничения на гладкость суммы $\sum_{\omega_m} f_{0x}$ как функции температуры, введем «сглаживающую» функцию

$$Q(t) = \begin{cases} 1, & t \leq 0.5 \\ \frac{1 - (t - 0.5)^2}{0.5}, & 0.5 < t \leq 1 \\ \frac{(t - 1.5)^2}{0.5}, & 1 < t \leq 1.5 \end{cases} \quad (43)$$

и будем вместо $\sum_{\omega_m} f_{0x}$ рассматривать сумму

$$\sum_{|\omega_m| \leq 1.5\Omega_D} f_{0x} Q\left(\frac{|\omega_m|}{\Omega_D}\right). \quad (44)$$

В итоге мы вычисляем значение выражения

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{i\pi\lambda T}{\Delta} \sum_{|\omega_m| \leq 1.5\Omega_D} f_{0x} Q\left(\frac{|\omega_m|}{\Omega_D}\right) \quad (45)$$

на интервале температур, в пределах которого ищем критическую температуру, и методом двоичного поиска определяем точку $T = T_c$, в которой действительная часть этого значения равна левой части (42), т. е. 1.

2.2. Метод Боголюбова – де Жена

2.2.1. Уравнения Боголюбова – де Жена

Для расчетов в формализме Боголюбова – де Жена [35] мы будем описывать систему тем же гамильтонианом (3) в приближении сильной связи, что и ранее. Однако для этих расчетов оказывается удобнее отказаться от представления двух подрешеток, поэтому гамильтониан переписывается так:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{\psi}_{i\sigma}^\dagger \hat{\psi}_{j\sigma} + \sum_{\mathbf{i}} (\Delta_{\mathbf{i}} \hat{\psi}_{i\uparrow}^\dagger \hat{\psi}_{i\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}) - \mu \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \hat{n}_{i\sigma} + \sum_{\mathbf{i}, \alpha\beta} \hat{\psi}_{i\alpha}^\dagger (\mathbf{h}_i \boldsymbol{\sigma})_{\alpha\beta} \hat{\psi}_{i\beta}. \quad (46)$$

Теперь \mathbf{i}, \mathbf{j} – это радиус-векторы отдельных узлов решетки, а не элементарных ячеек. Соответственно, $\hat{\psi}_{i\sigma}^\dagger$ ($\hat{\psi}_{i\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) электрона со спином σ на узле $\mathbf{i} = (i_x, i_y)^T$, $\hat{n}_{i\sigma}^\nu = \hat{\psi}_{i\sigma}^\nu \hat{\psi}_{i\sigma}^\nu$ – оператор числа частиц на узле \mathbf{i} , $\Delta_{\mathbf{i}} (\mathbf{h}_i)$ – сверхпроводящий параметр порядка (обменное поле) на узле \mathbf{i} , $\langle ij \rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям. Обменное поле в левом и правом антиферромагнетике можно описать формулами $\mathbf{h}_{i,l} = (-1)^{i_x+i_y} \mathbf{h}_l$ и $\mathbf{h}_{i,r} = (-1)^{i_x+i_y} \mathbf{h}_r$ соответственно.

Отметим, что при расчетах данным методом антиферромагнетики описываются тем же прыжковым гамильтонианом (46), что и сверхпроводник (поэтому в этом разделе в гамильтониане стоит не μ_S , а μ – химический потенциал того материала, который мы в данный момент описываем). Это приводит к тому, что волновые функции электронов проникают в антиферромагнетики на 2-3 узла от S/AF границ. Таким образом, в данном случае антиферромагнетики не являются идеальными изоляторами, как это было в разделе о квазиклассической теории.

Чтобы диагонализировать гамильтониан (46), применим преобразование Боголюбова:

$$\hat{\psi}_{i\sigma} = \sum_n \left(u_{n,\sigma}^i \hat{b}_n + v_{n,\sigma}^{i*} \hat{b}_n^\dagger \right), \quad (47)$$

где \hat{b}_n^\dagger (\hat{b}_n) – операторы рождения (уничтожения) боголюбовских квазичастиц. Диагонализированный гамильтониан можно записать в виде

$$\hat{H}' = E_0 + \sum_n \varepsilon_n \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n, \quad (48)$$

где коэффициенты ε_n соответствуют собственным энергиям боголюбовских квазичастиц. Вычислим коммутаторы $[\hat{\psi}_{i\sigma}, \hat{H}]$ и $[\hat{\psi}_{i\sigma}, \hat{H}']$, подставляя вместо оператора $\hat{\psi}_{i\sigma}$ разложение (47). С учетом антикоммутиционных соотношений $\{\hat{b}_n, \hat{b}_m^\dagger\} = \delta_{nm}$ и $\{\hat{\psi}_{i\sigma}, \hat{\psi}_{i'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$ получаем:

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_{i\sigma}, \hat{H}] = & \sum_n \left(-t \sum_{j \in \langle i \rangle} u_{n,\sigma}^j + \sigma \Delta_i v_{n,-\sigma}^i - \mu u_{n,\sigma}^i + (\mathbf{h}_i \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\alpha} u_{n,\alpha}^i \right) \hat{b}_n + \\ & \sum_n \left(-t \sum_{j \in \langle i \rangle} v_{n,\sigma}^{j*} + \sigma \Delta_i u_{n,-\sigma}^{i*} - \mu v_{n,\sigma}^{i*} + (\mathbf{h}_i \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\alpha} v_{n,\alpha}^{i*} \right) \hat{b}_n^\dagger, \end{aligned} \quad (49)$$

$$[\hat{\psi}_{i\sigma}, \hat{H}'] = \sum_n \varepsilon_n \left(u_{n,\sigma}^i \hat{b}_n - v_{n,\sigma}^{i*} \hat{b}_n^\dagger \right), \quad (50)$$

где $\mathbf{j} \in \langle \mathbf{i} \rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям \mathbf{j} узла \mathbf{i} , $\sigma = +1$ соответствует спину вверх, а $\sigma = -1$ – спину вниз. Приравняем соответствующие коэффициенты при \hat{b}_n и \hat{b}_n^\dagger в (49) и (50). После эрмитова сопряжения соотношения, следующего из равенства коэффициентов при \hat{b}_n^\dagger , получаем уравнения Боголюбова – де Жена:

$$\begin{aligned} -\mu u_{n,\sigma}^i - t \sum_{j \in \langle i \rangle} u_{n,\sigma}^j + \sigma \Delta_i v_{n,-\sigma}^i + (\mathbf{h}_i \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\alpha} u_{n,\alpha}^i &= \varepsilon_n u_{n,\sigma}^i, \\ -\mu v_{n,\sigma}^{i*} - t \sum_{j \in \langle i \rangle} v_{n,\sigma}^{j*} + \sigma \Delta_i^* u_{n,-\sigma}^{i*} + (\mathbf{h}_i \boldsymbol{\sigma}^*)_{\sigma\alpha} v_{n,\alpha}^{i*} &= -\varepsilon_n v_{n,\sigma}^{i*}. \end{aligned} \quad (51)$$

Дальнейшая работа с уравнениями (51) отличается для случаев чистой системы и системы с примесями, поэтому эти случаи будут описаны отдельно в соответствующих разделах.

2.2.2. Вычисление критической температуры

Общая схема вычисления критической температуры, не зависящая от наличия или отсутствия примесей, следующая. Сверхпроводящий параметр порядка на узле \mathbf{i} Δ_i выражается через решения уравнений Боголюбова – де Жена (51) $u_{n,\sigma}^i, v_{n,\sigma}^{i*}$ по формуле:

$$\Delta_i = \frac{\lambda_i}{N_F} \langle \hat{\psi}_{i\downarrow} \hat{\psi}_{i\uparrow} \rangle = \frac{\lambda_i}{N_F} \sum_n \left(u_{n,\downarrow}^i v_{n,\uparrow}^{i*} (1 - f_n) + u_{n,\uparrow}^i v_{n,\downarrow}^{i*} f_n \right). \quad (52)$$

Здесь λ_i – константа спаривания на узле \mathbf{i} , равная некоторому постоянному значению λ в сверхпроводнике и нулю в антиферромагнетиках, N_F – плотность состояний на уровне Ферми, $f_n = \langle \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n \rangle$ – функция распределения квазичастиц, которое мы полагаем равновесным распределением Ферми: $f_n = 1/(1 + e^{\varepsilon_n/T})$.

Уравнение (52) позволяет вычислить сверхпроводящий параметр порядка самоогласованно. Определим интервал температур, на котором будем искать критическую температуру методом двоичного поиска. На начальном шаге мы выбираем некоторое

(одинаковое для всех узлов системы) значение для Δ_i , много меньше ожидаемого для данной системы значения параметра порядка в сверхпроводнике. Численно диагонализуя матрицу, соответствующую левой части системы (51), находим набор ее собственных функций $u_{n,\sigma}^i, v_{n,\sigma}^i$ и отвечающих им собственных значений ε_n , которые затем подставляем в (52) и вычисляем параметр порядка. После этого мы заново находим собственные функции и собственные значения матрицы, подставляя в (51) уже новые, вычисленные на предыдущем шаге значения Δ_i , далее снова вычисляем параметр порядка из (52). Всего выполняем три итерации описанного процесса по самосогласованному вычислению Δ_i при температуре, соответствующей середине выбранного интервала.

Далее мы воспользуемся тем фактом, что зависимость $\Delta(T)$ является монотонно убывающей функцией температуры, обращающейся в ноль при $T = T_c$. Если средний параметр порядка в сверхпроводнике, вычисленный самосогласованно, оказался больше значения Δ_i , взятого на начальном шаге, то в качестве нового интервала температур выбираем правую половину текущего интервала, в противном случае – левую. Продолжаем процесс до тех пор, пока длина интервала не станет меньше некоторого заданного малого значения, в качестве искомой критической температуры берем середину интервала на последнем шаге.

2.2.3. Особенности вычислений в чистом случае

В случае, когда примеси отсутствуют, трансляционная инвариантность позволяет нам считать систему бесконечной в направлении S/AF границ (вдоль оси y) и решать эффективно одномерную задачу о структуре, расположенной вдоль оси x , с шириной $W = d_S + 2d_{AF}$. Применим ко всем величинам в (51), зависящим от радиус-вектора узла \mathbf{i} , разложение в ряд Фурье вдоль оси y , которое запишется следующим образом:

$$f(\mathbf{i}) = \sum_{k_y} f(i_x, k_y) e^{2ia_y k_y i_y}, \quad (53)$$

где k_y – y -компонента волнового вектора \mathbf{k} . При фиксированном k_y получаем следующие итоговые уравнения Боголюбова – де Жена, которые мы будем решать при описании системы в чистом случае:

$$\begin{aligned} -\mu u_{n,\sigma}^{i, \text{I(II)}} - t (u_{n,\sigma}^{i-1, \text{I(II)}} + u_{n,\sigma}^{i+1, \text{I(II)}} + u_{n,\sigma}^{i, \text{II(I)}} (1 + e^{\pm 2ika_y})) + \sigma \Delta_i^{\text{I(II)}} v_{n,-\sigma}^{i, \text{I(II)}} + \\ \left(\mathbf{h}_i^{\text{I(II)}} \boldsymbol{\sigma} \right)_{\sigma\alpha} u_{n,\alpha}^{i, \text{I(II)}} = \varepsilon_n u_{n,\sigma}^{i, \text{I(II)}}, \\ -\mu v_{n,\sigma}^{i, \text{I(II)}} - t (v_{n,\sigma}^{i-1, \text{I(II)}} + v_{n,\sigma}^{i+1, \text{I(II)}} + v_{n,\sigma}^{i, \text{II(I)}} (1 + e^{\pm 2ika_y})) + \sigma \left(\Delta_i^{\text{I(II)}} \right)^* u_{n,-\sigma}^{i, \text{I(II)}} + \\ \left(\mathbf{h}_i^{\text{I(II)}} \boldsymbol{\sigma}^* \right)_{\sigma\alpha} v_{n,\alpha}^{i, \text{I(II)}} = -\varepsilon_n v_{n,\sigma}^{i, \text{I(II)}}, \end{aligned} \quad (54)$$

где для краткости введены обозначения $i \equiv i_x, k \equiv k_y$, а индексы I(II) соответствуют двум типам слоев вдоль оси y (см. рис. 12). Система (54) – это система из $8W$ уравнений относительно неизвестных $u_{n,\uparrow}^{i, \text{I}}, u_{n,\uparrow}^{i, \text{II}}, u_{n,\downarrow}^{i, \text{I}}, u_{n,\downarrow}^{i, \text{II}}, v_{n,\uparrow}^{i, \text{I}}, v_{n,\uparrow}^{i, \text{II}}, v_{n,\downarrow}^{i, \text{I}}, v_{n,\downarrow}^{i, \text{II}}, i \in \{1, W\}$. Уравнение для самосогласованного вычисления параметра порядка (52) после разложения в ряд Фурье по формуле (53) и интегрирования по k запишется в виде:

$$\Delta_i^{\text{I(II)}} = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{a_y dk}{\pi} \frac{\lambda_i}{N_F} \sum_n \left(u_{n,\downarrow}^{i, \text{I(II)}} \left(v_{n,\uparrow}^{i, \text{I(II)}} \right)^* (1 - f_n) + u_{n,\uparrow}^{i, \text{I(II)}} \left(v_{n,\downarrow}^{i, \text{I(II)}} \right)^* f_n \right). \quad (55)$$

2.2.4. Особенности вычислений для системы с примесями

Помимо эффекта спинового вентиля в чистом случае в данной работе также исследуется влияние примесей в сверхпроводнике на этот эффект. Примеси моделируются изменениями химического потенциала μ_S на узлах сверхпроводника на случайные величины $\delta\mu_i$, не превышающие по модулю некоторого заданного значения $\delta\mu$:

$$\mu_i = \mu_S + \delta\mu_i, \quad \delta\mu_i \in [-\delta\mu, \delta\mu]. \quad (56)$$

Величину $\delta\mu$ мы будем называть силой примесей. Такие изменения химического потенциала нарушают трансляционную инвариантность уравнений Боголюбова – де Жена (51) вдоль оси y , поэтому теперь мы решаем их для двумерной системы с шириной W и конечной длиной L и задаем периодические граничные условия вдоль направления y . Поскольку расчеты для структуры с числом узлов, соответствующим размерам реальных систем, времязатратны, мы моделировали структуру с много меньшим числом узлов и усредняли результаты вычисления критической температуры по 5-10 различным реализациям распределения примесей.

Глава 3

Результаты

При помощи квазиклассической теории исследовалась структура триплетных корреляций, наводимых в сверхпроводнике, и зависимость критической температуры от угла разориентации неелевских векторов антиферромагнетиков в чистом случае. Метод Боголюбова – де Жена использовался для изучения спин-вентильного эффекта в чистом случае при разных значениях химического потенциала сверхпроводника и в случае наличия примесей в сверхпроводнике.

3.1. Квазиклассическая теория

3.1.1. Структура триплетных корреляций

Проанализируем выражение для аномальной функции Грина \hat{f} , чтобы определить, какие типы триплетных корреляций генерируются в сверхпроводнике и как эти корреляции должны отразиться на зависимости $T_c(\phi)$. Решение уравнения Эйленберга для \hat{f} , описываемое формулами (39)-(40), может быть переписано в следующем виде:

$$\hat{f} = \hat{f}_0 \sigma_0 + \hat{f}_l \mathbf{h}_{\text{eff},l} \boldsymbol{\sigma} + \hat{f}_r \mathbf{h}_{\text{eff},r} \boldsymbol{\sigma} + \hat{f}_{\text{cross}} (\mathbf{h}_{\text{eff},l} \times \mathbf{h}_{\text{eff},r}) \boldsymbol{\sigma}. \quad (57)$$

Здесь амплитуды \hat{f}_i – матрицы в пространстве подрешеток, а $\mathbf{h}_{\text{eff},l(r)} = \mathbf{h}_{l(r)} a/d_S$ – введенные нами эффективные обменные поля, которые физически соответствуют усреднению обменных полей на левой и правой S/AF границах по всей толщине сверхпроводника d_S . Далее мы также будем использовать обозначение $h_{\text{eff}} \equiv ha/d_S$.

Амплитуда \hat{f}_0 соответствует синглетным корреляциям. Как видно из выражений для \hat{f} и \hat{g} (39)-(40) и (30)-(31), компонента f_{xx} пропорциональна $h_y h_z \propto h^2 \sin \phi \propto |\mathbf{h}_{\text{eff},l} \times \mathbf{h}_{\text{eff},r}|$, в то время как компоненты f_{yy} , f_{yz} пропорциональны h_y , а f_{zy} , $f_{zz} - h_z$. Следовательно, в пространстве подрешеток выражения для амплитуд \hat{f}_l и \hat{f}_r содержат только вклады $\rho_{y,z}$. Значит, эти амплитуды меняют знак при переходе между двумя подрешетками (и, соответственно, между двумя соседними узлами) и отвечают триплетным корреляциям неелевского типа, обеспечивающим разность критических температур в параллельной и антипараллельной конфигурациях $T_c(\phi = 0) - T_c(\phi = \pi)$.

Теперь рассмотрим амплитуду корреляций, связанных с векторным произведением эффективных обменных полей от двух границ, \hat{f}_{cross} . Она содержит только вклад ρ_x , то есть не меняет знак при переходе между подрешетками и, следовательно, отвечает обычным, не неелевским триплетным корреляциям. Анализ выражения для \hat{f}_{cross} (слишком громоздкого, чтобы в явном виде привести его в тексте работы) показывает, что вклад этих корреляций максимален при угле разориентации $\phi \approx \pi/2$. Поэтому можно ожидать, что на кривых $T_c(\phi)$ будет наблюдаться минимум вблизи ортогональной конфигурации намагниченностей, аналогичный триплетному спин-вентильному эффекту в структурах с ферромагнетиками [10, 17, 22]. Будем называть возникновение такого минимума перпендикулярным спин-вентильным эффектом.

Однако в лидирующем порядке по d_S/ξ_S ($\xi_S \propto v$) выражение для амплитуды \hat{f}_{cross} примет вид:

$$\hat{f}_{\text{cross}} = -\frac{2\Delta x d_S \rho_x}{v^2} \left(\frac{\text{sgn } \omega_m}{\sqrt{(\omega_m - i\mu_S)^2 + 4h_{\text{eff},z}^2}} - \frac{\text{sgn } \omega_m}{\sqrt{(\omega_m + i\mu_S)^2 + 4h_{\text{eff},z}^2}} \right), \quad (58)$$

где $h_{\text{eff},z} = h_{\text{eff}} \cos(\phi/2)$. Выражение (58) линейно по d_S/ξ_S , поэтому при малых толщинах сверхпроводника вклад от корреляций \hat{f}_{cross} не должен оказывать заметное влияние на зависимости $T_c(\phi)$. Что касается амплитуд неелевских триплетных корреляций $\hat{f}_{l,r}$, то они в пределе $d_S/\xi_S \rightarrow 0$ остаются конечными, при этом $\hat{f}_l = \hat{f}_r$. Отсюда следует, что при малых толщинах сверхпроводника подавление критической температуры определяется векторной суммой эффективных обменных полей от двух S/AF границ $\mathbf{h}_{\text{eff},l} + \mathbf{h}_{\text{eff},r}$. Это соответствует результирующему эффективному обменному полю, пропорциональному $\cos(\phi/2)$, то есть зависящему от угла разориентации точно так же, как эффективное обменное поле в теории для систем F/S/F с ферромагнитными изоляторами [5].

3.1.2. Зависимость критической температуры от угла разориентации неелевских векторов

В этом разделе представлены результаты исследования зависимости $T_c(\phi)$ при помощи метода, описанного в разделе 2.1. Критическая температура измерялась в единицах критической температуры однородного сверхпроводника T_{c0} и вычислялась при $\mu_S = T_{c0}$ и разных значениях d_S и h_{eff} . Как обсуждалось в предыдущем разделе, в пределе малых d_S влияние обменных полей антиферромагнетиков на сверхпроводник описывается результирующим эффективным обменным полем величиной $2h_{\text{eff}} \cos(\phi/2)$, поэтому в качестве параметра, характеризующего обменные поля, мы выбираем $h_{\text{eff}} = ha/d_S$, а не h .

Полученные зависимости $T_c(\phi)$ приведены на рис. 14, 15. Все представленные на этих рисунках кривые демонстрируют ярко выраженный эффект спинового вентиля, при этом критическая температура наиболее подавлена в параллельной конфигурации $\phi = 0$ в соответствии с угловой зависимостью результирующего эффективного обменного поля, пропорционального $\cos(\phi/2)$. Таким образом, для этих результатов выполняется ожидаемое нами соотношение $T_c(\phi = 0) < T_c(\phi = \pi)$, феноменологически предсказанное во введении.

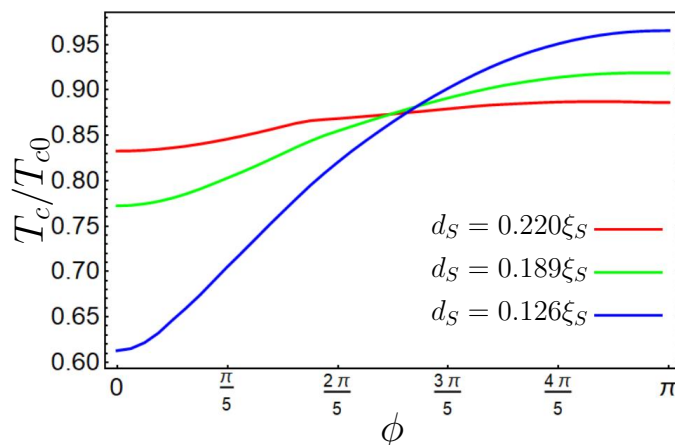


Рис. 14. $T_c(\phi)$ для структуры AF/S/AF в рамках квазиклассической теории при фиксированном $h_{\text{eff}} = T_{c0}$ и различных d_S . $\mu_S = T_{c0}$. Критическая температура измеряется в единицах критической температуры однородного сверхпроводника T_{c0} .

Результаты, представленные на рис. 14, демонстрируют, что спин-вентильный эффект становится менее выраженным при увеличении толщины сверхпроводника d_S : критическая температура начинает сильнее подавляться при $\phi = \pi$ и слабее – при $\phi = 0$.

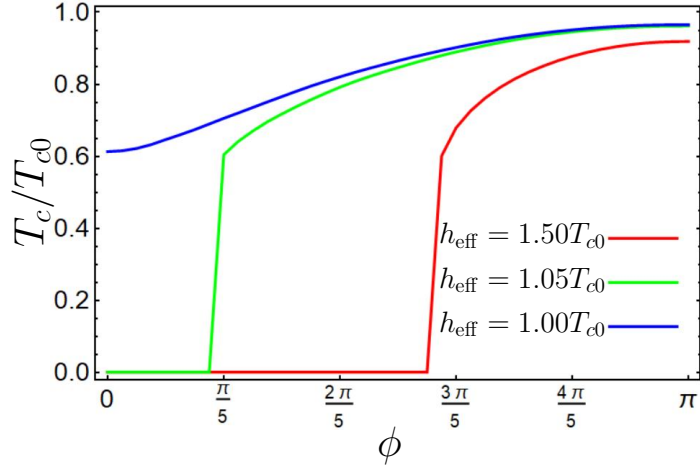


Рис. 15. $T_c(\phi)$ при фиксированном значении $d_S = 0.126\xi_S$ и различных h_{eff} . $\mu_S = T_{c0}$. При достаточно больших h_{eff} в системе наблюдается абсолютный спин-вентильный эффект.

Такое поведение кривых $T_c(\phi)$ объясняется следующим образом. Из физических соображений следует, что в пределе $d_S \gg \xi_S$ две границы S/AF не «чувствуют» друг друга. Подавление сверхпроводимости на каждой из них происходит независимо от направлений неелевских векторов, что приводит к исчезновению спин-вентильного эффекта. В предельном случае $d_S \ll \xi_S$ ситуация противоположная. В конфигурации $\phi = \pi$ критическая температура не подавляется по сравнению с T_{c0} в силу того, что амплитуды неелевских триплетов, генерируемых на двух границах с антиферромагнетиками, полностью компенсируют друг друга, а при $\phi = 0$ такой компенсации не происходит и возникает подавление T_c . Таким образом, при $\phi = \pi$ критическая температура максимальна для самых тонких сверхпроводников с $d_S \ll \xi_S$, а при увеличении d_S она понижается за счет некоррелированного подавления сверхпроводимости неелевскими триплетами от обеих границ по отдельности. Аналогично, при $\phi = 0$ критическая температура максимально подавлена при меньших d_S и растет с увеличением толщины сверхпроводника, что и наблюдается на рис. 14.

Теперь обсудим влияние триплетных корреляций, определяемых векторным произведением обменных полей $\mathbf{h}_l \times \mathbf{h}_r$, на кривые на рис. 14. В предыдущем разделе было показано, что в пределе $d_S/\xi_S \rightarrow 0$ амплитуда этих корреляций обращается в ноль, поэтому при малых толщинах сверхпроводника подавление критической температуры полностью определяется результирующим эффективным обменным полем $2h_{\text{eff}} \cos \phi/2$, без дополнительного минимума на кривой $T_c(\phi)$ при $\phi \approx \pi/2$. Действительно, на кривых на рис. 14 отсутствуют минимумы вблизи ортогональной конфигурации. Однако, в то время как при самых малых толщинах сверхпроводника (синяя и зеленая кривые) зависимость $T_c(\phi)$ гладкая, при большей d_S (красная кривая) в окрестности $\phi = \pi/2$ гладкость нарушается – это влияние корреляций \hat{f}_{cross} , которое можно увидеть в линейном приближении по d_S/ξ_S . Чтобы получить более ярко выраженные проявления этих корреляций в виде минимумов на кривых $T_c(\phi)$, необходимо учитывать более высокие степени d_S/ξ_S , что значительно усложняет аналитические вычисления. Поэтому в рамках квазиклассической теории наблюдать перпендикулярный спин-вентильный эффект не удалось, но его можно увидеть на зависимостях $T_c(\phi)$, полученных с помощью метода Боголюбова – де Жена и представленных ниже.

Результаты на рис. 15 показывают, что при достаточно больших значениях эффективного обменного поля h_{eff} в рассматриваемой системе также возможен абсолютный эффект спинового вентиля, т. е. полное подавление сверхпроводимости в некотором

диапазоне значений угла разориентации ϕ .

3.2. Метод Боголюбова – де Жена

Прежде чем перейти к представлению и обсуждению результатов, полученных методом Боголюбова – де Жена, прокомментируем выбор значений параметров, использованных ниже. Поскольку времязатратность вычислений позволяет рассматривать лишь системы с нереалистично малым числом узлов, обычно при работе с этим методом используются такие значения параметров, которые сохраняют иерархию фигурирующих в задаче энергий, но не полностью воспроизводят реальный материал [35].

Для реальных материалов справедлива оценка $t \sim 1000T_{c0}$, но такой выбор параметров потребовал бы вычисления собственных энергий с недостижимо высокой точностью, поэтому расчеты выполнялись при $T_{c0} \sim (0.01 - 0.1)t$ и $h_{\text{eff}} = ha/d_S \sim T_{c0}$. Это позволило реалистично промоделировать исследуемую систему, поскольку в квазиклассическом пределе $t \gg T_{c0}$ ее фундаментальные физические свойства определяются соотношением между параметрами h и T_{c0} , но не величиной параметра t .

Все результаты, представленные далее, получены для систем с толщиной антиферромагнетиков $d_{AF} = 4$ монослоя и различными толщинами сверхпроводника d_S , также выраженными в количестве монослоев. Сверхпроводящая длина когерентности $\xi_S = v_F/2\pi T_{c0}$ для рассматриваемых систем составляет около 6 монослоев. $\mu_{AF} = 0$ в соответствии с условием, что антиферромагнетики – изоляторы.

3.2.1. Зависимость спин-вентильного эффекта от химического потенциала

В этом разделе мы исследуем влияние величины химического потенциала сверхпроводника μ_S на поведение кривых $T_c(\phi)$ для системы в чистом случае. На рис. 16 и 17 представлены результаты для случаев $\mu_S = 0$ и $\mu_S = 0.2t$ соответственно. Как и ранее, критическая температура измеряется в единицах критической температуры однородного сверхпроводника T_{c0} .

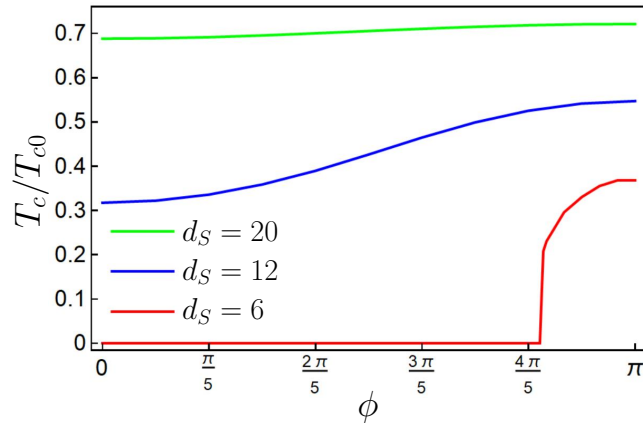


Рис. 16. $T_c(\phi)$ для структуры AF/S/AF в рамках метода Боголюбова – де Жена при половинном заполнении $\mu_S = 0$. Разные кривые соответствуют разным значениям d_S , $d_{AF} = 4$ (все толщины измеряются в количестве монослоев), $\mu_{AF} = 0$, $h = 0.5t$, $T_{c0} = 0.07t$.

Как видно из рис. 16, при половинном заполнении $\mu_S = 0$ результаты, полученные методом Боголюбова – де Жена, воспроизводят ключевые особенности результатов, полученных в рамках квазиклассической теории. При всех рассмотренных значениях

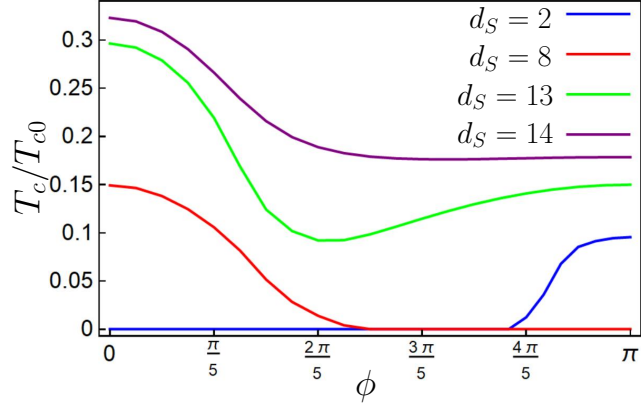


Рис. 17. $T_c(\phi)$ для структуры AF/S/AF в рамках метода Боголюбова – де Жена при $\mu_S = 0.2t$, значения всех остальных параметров такие же, как на рис. 16. Разные кривые соответствуют разным значениям d_S .

толщины сверхпроводника выполняется соотношение $T_c(0) < T_c(\pi)$, также заметно подавление спин-вентильного эффекта (т. е. уменьшение $|T_c(0) - T_c(\pi)|$) с увеличением d_S . Красная кривая, соответствующая $d_S = 6$ монослоев, демонстрирует возможность реализации абсолютного спин-вентильного эффекта. Отсутствие перпендикулярного спин-вентильного эффекта в виде минимумов вблизи $\phi = \pi/2$ находится в согласии с тем, что в квазиклассической теории амплитуда корреляций \hat{f}_{cross} , обеспечивающих этот эффект, обращается в ноль при $\mu_S = 0$.

Рис. 17 иллюстрирует, что при конечном μ_S соотношение между $T_c(0)$ и $T_c(\pi)$ начинает зависеть от толщины сверхпроводника: становятся возможны оба случая $T_c(0) < T_c(\pi)$ и $T_c(0) > T_c(\pi)$. Чтобы подробнее исследовать этот эффект, были построены зависимости $T_c(d_S)$ для случаев $\phi = 0$ и $\phi = \pi$, представленные на рис. 18. Обе величины

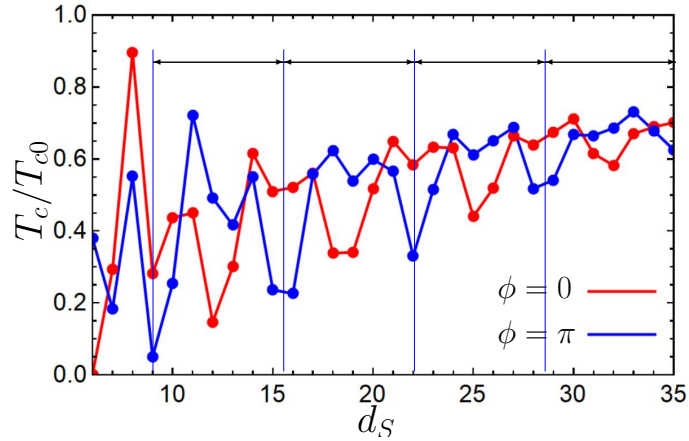


Рис. 18. $T_c(0)$ и $T_c(\pi)$ как функции толщины сверхпроводника d_S при $\mu_S = 0.9t$. $d_{AF} = 4$, $\mu_{AF} = 0$, $h = t$, $T_{c0} = 0.03t$. Период осцилляций $L_{\text{osc}} = \pi v_F / \mu_S \approx 7$, синие вертикальные линии обозначают границы периодов (минимумы $T_c(d_S)$ при $\phi = \pi$).

$T_c(0)$ и $T_c(\pi)$ являются осциллирующими функциями d_S . Это следствие конечного импульса, приобретаемого неелевскими триплетными куперовскими парами в системах с нарушенной трансляционной инвариантностью в результате процессов переброса при рассеянии на границах S/AF [36]. Наличие конечного суммарного импульса у куперовской пары приводит к осцилляциям ее волновой функции внутри сверхпроводящего

слоя с периодом $L_{\text{osc}} = \pi v_F / |\mu_S|$ (подробнее это явление будет описано в разделе 3.2.3). В зависимости от величины d_S осциллирующие волновые функции неелевских триплетов, генерируемых на двух границах S/AF, могут конструктивно или деструктивно интерферировать внутри сверхпроводника. В итоге результирующая амплитуда неелевских триплетных корреляций при фиксированном угле разориентации ϕ (а вместе с ней и критическая температура) осциллирует как функция толщины сверхпроводника с периодом L_{osc} .

Для параметров, которым соответствуют результаты на рис. 18, $L_{\text{osc}} = \pi v_F / \mu_S \approx 7$. Это согласуется с полученными кривыми для $T_c(0)$ и $T_c(\pi)$: синими вертикальными линиями обозначены точки минимума функции $T_c(d_S)$ при $\phi = \pi$, при этом расстояние между линиями соответствует периоду осцилляций $L_{\text{osc}} = (35 - 9)/4 = 6.5$. Локальные минимумы внутри некоторых периодов связаны с фриделевскими осцилляциями – артефактом вычислений при малом по сравнению с реальными системами количестве узлов. Осцилляции разности $T_c(\pi) - T_c(0)$ с периодом L_{osc} сопровождаются сменой знака этой разности, что и приводит к возникновению противоположных соотношений между $T_c(0)$ и $T_c(\pi)$ на кривых на рис. 17 при разных d_S .

Еще одна важная особенность результатов, представленных на рис. 17, – немонотонность некоторых кривых. Это проявление триплетных корреляций неелевского типа \hat{f}_{cross} , определяемых векторным произведением $\mathbf{h}_l \times \mathbf{h}_r$. При $d_S = 13$ монослоев на кривой $T_c(\phi)$ явно заметен минимум вблизи ортогональной конфигурации $\phi = \pi/2$. При меньших значениях d_S перпендикулярный спин-вентильный эффект не наблюдается, поскольку амплитуда корреляций \hat{f}_{cross} слишком мала – в соответствии с уравнением (58) она обращается в ноль в пределе $d_S \ll \xi_S$. При $d_S = 14$ монослоев на кривой $T_c(\phi)$ также отсутствует глубокий минимум. Это объясняется интерференционными эффектами, связанными с неелевским триплетным спариванием с конечным импульсом, которые могут влиять на вид зависимости $T_c(\phi)$, перекрывая вклад от корреляций \hat{f}_{cross} .

3.2.2. Влияние примесей на спин-вентильный эффект

Данный раздел посвящен исследованию спин-вентильного эффекта в системе с примесями в сверхпроводящей области, моделируемыми в соответствии с формулой (56). Для этого мы изучали влияние силы примесей $\delta\mu$ на три характеристики системы: критическую температуру при фиксированном угле разориентации $\phi = 0$, амплитуду «0– π » спин-вентильного эффекта $\Delta T_{c,\parallel}$ и амплитуду перпендикулярного спин-вентильного эффекта $\Delta T_{c,\perp}$. Здесь $\Delta T_{c,\parallel}$ и $\Delta T_{c,\perp}$ – коэффициенты, возникающие из записи выражения для $T_c(\phi)$ в форме $T_c = T_{c,\parallel} + \Delta T_{c,\parallel} \cos \phi + \Delta T_{c,\perp} \sin^2 \phi$, следующей из квазиклассической теории при $h_{\text{eff}} \ll T_c$, при этом $T_{c,\parallel} = [T_c(0) + T_c(\pi)]/2$, $\Delta T_{c,\parallel} = [T_c(0) - T_c(\pi)]/2$, $\Delta T_{c,\perp} = T_c(\pi/2) - T_{c,\parallel}$.

Результаты, представленные в этом разделе, были получены для систем с $L = 100$ монослоев, $d_S = 20$ монослоев, $\mu_S = 0.9t$, $h = t$, $T_{c0} = 0.03t$. Все величины, для которых исследуется зависимость от $\delta\mu$, нормированы на значения этих величин в отсутствие примесей, т. е. при $\delta\mu = 0$. Пунктирные линии на графиках проведены для удобства восприятия результатов и не связаны с фитированием какими-либо заданными формулами.

На рис. 19 демонстрируется эффект общего подавления критической температуры с увеличением силы примесей, описанный в работах [37–39]. Приведены результаты для T_c в параллельной конфигурации $\phi = 0$, или T_c^P , но при других значениях угла разориентации зависимость критической температуры от $\delta\mu$ принимала аналогичный вид. Наблюдаемое подавление критической температуры объясняется тем, что в рассматриваемом режиме $\mu_S \gg T_{c0}$ немагнитные примеси являются эффективно магнитными

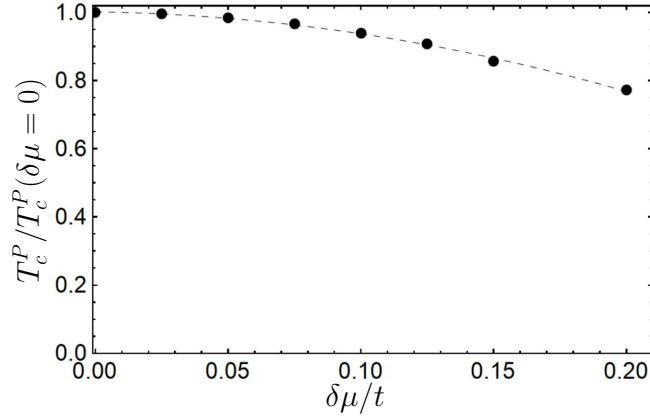


Рис. 19. Общее подавление сверхпроводимости примесями: $T_c(\phi = 0)$ как функция силы примесей $\delta\mu$. T_c нормирована на свое значение при $\delta\mu = 0$. Каждая точка на графике получена в результате усреднения по 5-10 реализациям случайного беспорядка, ограниченного заданным $\delta\mu$. Пунктирная линия проведена для удобства восприятия. $\mu_S = 0.9t$, $\mu_{AF} = 0$, $h = t$, $d_{AF} = 4$, $d_S = 20$, $T_{c0} = 0.03t$.

[39]. Обсудим этот эффект подробнее, обратившись к работе [38].

На рис. 20 приведено схематичное распределение амплитуды волновой функции электрона со спином вниз $|\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|$. Эта амплитуда отличается на узлах, относящихся к разным подрешеткам, поскольку электрону с заданным направлением спина более энергетически выгодно локализоваться на узле с противоположным направлением намагниченности (в данном случае – на узле подрешетки B). В итоге немагнитные примеси влияют на электрон по-разному в зависимости от того, на узле какой подрешетки они расположены, что и делает их эффективно магнитными.

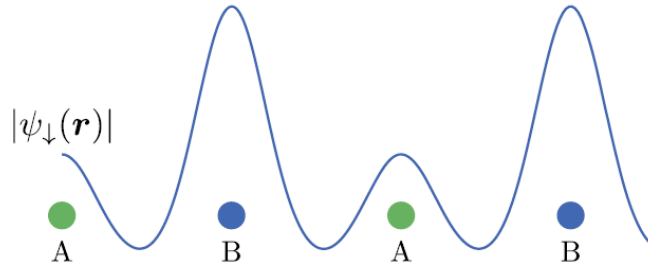


Рис. 20. Пространственное распределение амплитуды волновой функции электрона со спином вниз $|\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|$ [38]. Немагнитные примеси на подрешетке B оказывают на электрон со спином вниз большее влияние, чем немагнитные примеси на подрешетке A .

Рис. 21 иллюстрирует постепенное исчезновение « $0 - \pi$ » спин-вентильного эффекта при добавлении примесей в сверхпроводник. Оно связано с тем, что неелевские триплетные корреляции, обеспечивающие разность $T_c(0) - T_c(\pi)$, являются результатом межзонного спаривания (подробнее – в разделе 3.2.3), эффективность которого подавляется примесями.

Наконец, на рис. 22 приведена зависимость амплитуды перпендикулярного спин-вентильного эффекта $\Delta T_{c,\perp}$ от $\delta\mu$. Мы видим, что данная величина нечувствительна к наличию примесей, что согласуется с физической причиной возникновения минимумов на кривых $T_c(\phi)$ вблизи $\phi = \pi/2$. Действительно, корреляции \hat{f}_{cross} , связанные с векторным произведением обменных полей и определяющие глубину минимумов, соответству-

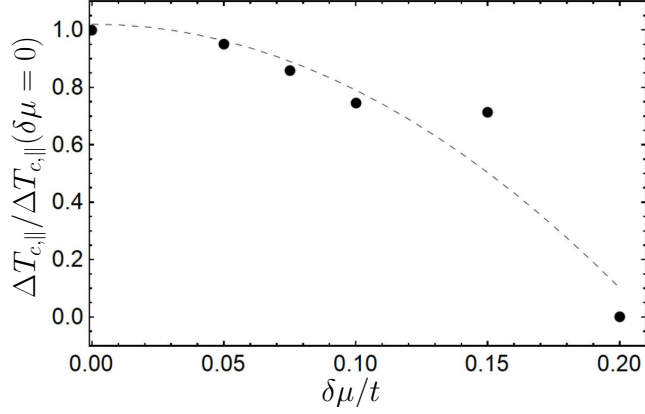


Рис. 21. Подавление « $0-\pi$ » спин-вентильного эффекта примесями: амплитуда $\Delta T_{c,\parallel}$, нормированная на свое значение при $\delta\mu = 0$, как функция силы примесей $\delta\mu$. Значения всех параметров такие же, как на рис. 19.

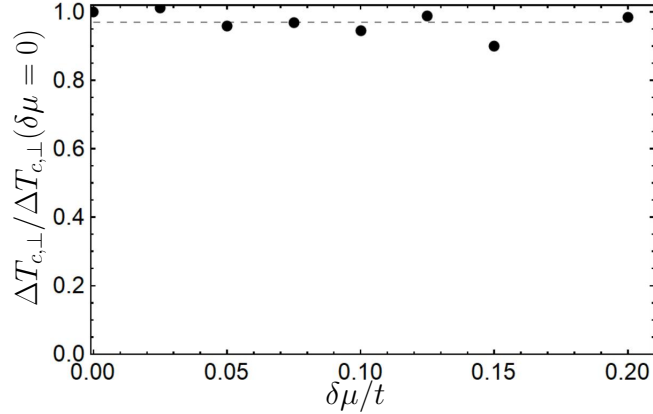


Рис. 22. Амплитуда перпендикулярного спин-вентильного эффекта $\Delta T_{c,\perp}$, нормированная на свое значение при $\delta\mu = 0$, как функция силы примесей $\delta\mu$. Значения всех параметров такие же, как на рис. 19.

ют внутризонному s -волновому триплетному спариванию обычного (не неелевского) типа, а такое спаривание не подвержено влиянию немагнитных примесей.

3.2.3. Неелевское триплетное спаривание с конечным импульсом

Этот раздел посвящен описанию физического механизма неелевского триплетного спаривания с конечным импульсом, приводящего к осцилляциям волновой функции куперовской пары внутри сверхпроводника. Эти осцилляции, в свою очередь, становятся причиной осцилляций критической температуры при фиксированном угле разориентации как функции толщины сверхпроводника, представленных на рис. 18.

Найдем закон дисперсии электронов в нормальном состоянии. Рассмотрим первое из уравнений Боголюбова – де Жена (51) в случае $\Delta_i = 0$, при этом для дальнейшего удобства перепишем его в представлении двух подрешеток:

$$-\mu u_{n,\sigma}^{i,A(B)} - t \sum_{j \in \langle i \rangle} u_{n,\sigma}^{j,B(A)} + (\mathbf{h}_i^{A(B)} \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\alpha} u_{n,\alpha}^{i,A(B)} = \varepsilon_n u_{n,\sigma}^{i,A(B)}. \quad (59)$$

Здесь мы вернулись к обозначениям из раздела 2.1: \mathbf{i} , \mathbf{j} – это радиус-векторы центров элементарных ячеек (в соответствии с разбиением на рис. 12), два узла внутри одной

элементарной ячейки обозначены индексами подрешеток $A(B)$. Для простоты рассмотрим случай, когда обменное поле \mathbf{h}_i направлено вдоль оси z , тогда $(\mathbf{h}_i^{A(B)} \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\alpha} u_{n,\alpha}^{i,A(B)} = +(-)h\sigma u_{n,\sigma}^{i,A(B)}$. После разложения в ряд Фурье вдоль оси y по формуле (53) уравнение (59) запишется в виде:

$$-\mu u_{n,\sigma}^{i,A(B)} - t \left((u_{n,\sigma}^{i-1,B(A)} + u_{n,\sigma}^{i+1,B(A)}) e^{\pm i k_y a_y} + u_{n,\sigma}^{i,B(A)} (1 + e^{\pm 2i k_y a_y}) \right) \pm h\sigma u_{n,\sigma}^{i,A(B)} = \varepsilon_n u_{n,\sigma}^{i,A(B)}, \quad (60)$$

или

$$-\mu u_{n,\sigma}^{i,A(B)} - t e^{\pm i k_y a_y} (u_{n,\sigma}^{i-1,B(A)} + u_{n,\sigma}^{i+1,B(A)} + 2u_{n,\sigma}^{i,B(A)} \cos k_y a_y) \pm h\sigma u_{n,\sigma}^{i,A(B)} = \varepsilon_n u_{n,\sigma}^{i,A(B)}, \quad (61)$$

где $i \equiv i_x$. Далее для простоты будем считать решетку квадратной: $a_x = a_y = a$.

Решение уравнения (61) после разложения в ряд Фурье вдоль оси x примет вид

$$\begin{pmatrix} u_{n,\sigma}^{j,A} \\ u_{n,\sigma}^{j,B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} e^{i k_x a j}, \quad (62)$$

где $A_{1,2}$ – не зависящие от координат амплитуды волновых функций квазичастиц. Тогда (61) можно переписать как систему

$$\begin{pmatrix} -\mu + h\sigma & -2te^{i k_y a} (\cos k_x a + \cos k_y a) \\ -2te^{-i k_y a} (\cos k_x a + \cos k_y a) & -\mu - h\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \varepsilon_n \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}, \quad (63)$$

которая дает следующий закон дисперсии квазичастиц:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -\mu \pm \sqrt{h^2 + 4t^2 (\cos k_x a + \cos k_y a)^2}. \quad (64)$$

Теперь посмотрим на поверхность Ферми в первой зоне Бриллюэна для антиферромагнитного слоя. Поскольку в направлении y (вдоль S/AF границ) элементарная ячейка включает в себя два атома, зона Бриллюэна оказывается сжатой в два раза в этом направлении. Тогда ее удобно выбрать в виде $k_x \in [-\pi/a, \pi/a]$, $k_y \in [-\pi/2a, \pi/2a]$, как на рис. 23. Сжатие зоны Бриллюэна вдоль оси y приводит к тому, что у поверхности

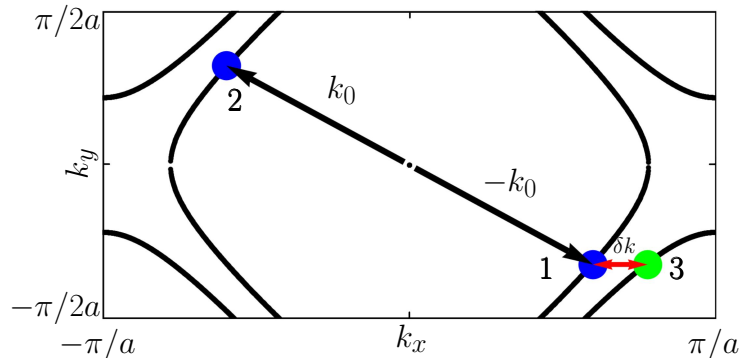


Рис. 23. Зона Бриллюэна и поверхность Ферми (65) (черные кривые) в антиферромагнетике [36]. Черными стрелками схематически изображено куперовское спаривание между электронами 1 и 2 с нулевым суммарным импульсом. Также возможно неелевское триплетное спаривание между электронами 2 и 3 с конечным суммарным квазиимпульсом δk , показанным красной стрелкой.

Ферми

$$-\mu + \sqrt{h^2 + 4t^2 (\cos k_x a + \cos k_y a)^2} = 0 \quad (65)$$

появляются дополнительные ветви.

Рассмотрим электрон, движущийся к границе S/AF со стороны антиферромагнетика, которому соответствует точка (k_{x1}, k_y) на поверхности Ферми (точка 1 на рис. 23). В результате процессов переброса этот электрон может отразиться от границы со сверхпроводником как электрон в точке 3 с другой ветви поверхности Ферми. Точке 3 соответствует волновой вектор (k_{x3}, k_y) , т. к. при рассеянии на плоской границе компонента импульса вдоль границы сохраняется. Тогда электрон в точке 2 $(-k_{x1}, -k_y)$ может образовать куперовскую пару не только с электроном 1 (т. е. синглетную куперовскую пару с нулевым суммарным импульсом), но и с электроном 3 – в таком случае это будет триплетная пара неелевского типа с конечным суммарным квазиимпульсом $\delta k = |k_{x3} - k_{x1}|$. Волновая функция куперовской пары пропорциональна $e^{i\delta k x}$, поэтому при ненулевом δk она осциллирует в пространстве, что и наблюдалось на рис. 18.

Теперь выполним оценку для периода этих осцилляций. Будем считать, что изменение квазиимпульса электрона δk для всех процессов переброса является одинаковым и равным расстоянию $|k_{x3} - k_{x1}|$ между ветвями поверхности Ферми на границе зоны Бриллюэна при $|k_y| = \pi/2a$. Значения k_x в точках 1 и 3 можно записать в виде $k_{x1,3} = k_{x0} \pm \sqrt{\mu^2 - h^2}/v_F$, где k_{x0} – лежащее на отрезке $[0, \pi/a]$ решение уравнения (65) при $\mu = h = 0$, а $v_F \equiv v_{F,x} = \partial\varepsilon/\partial k_x|_{k_x=k_{x0}} = 2ta \sin k_x a$. Тогда $\delta k = 2\sqrt{\mu^2 - h^2}/v_F$, откуда для периода осцилляций $L_{osc} = 2\pi/\delta k$ получаем:

$$L_{osc} = \frac{\pi v_F}{\sqrt{\mu^2 - h^2}}. \quad (66)$$

В случае, когда для эффективного обменного поля в сверхпроводнике выполняется соотношение $h_{\text{eff}} = ha/d_S \ll \mu_S$, формулу (66) можно переписать в виде $L_{osc} \approx \pi v_F/|\mu_S|$. Как было показано в разделе 3.2.1, эта формула хорошо описывает полученные осцилляции критической температуры как функции толщины сверхпроводника.

Заключение

В данной работе рассматривалась гетероструктура AF/S/AF с антиферромагнитными изоляторами и полностью компенсированными границами S/AF. Система описывалась аналитически в рамках квазиклассической теории для функции Грина (уравнение Эйленбергера) и численно при помощи уравнений Боголюбова – де Жена.

Уравнение Эйленбергера использовалось для нахождения функции Грина системы в чистом случае. Далее были исследованы структура триплетных корреляций, наводимых в сверхпроводнике вследствие эффекта близости с антиферромагнетиками, и зависимость критической температуры сверхпроводника от взаимной ориентации неелевских векторов двух антиферромагнетиков, т. е. спин-вентильный эффект. В рамках метода Боголюбова – де Жена был реализован алгоритм, позволяющий вычислять зависимость критической температуры от угла разориентации неелевских векторов как в чистом случае, так и при наличии примесей. С помощью этого алгоритма изучались зависимость спин-вентильного эффекта в чистом случае от величины химического потенциала сверхпроводника и влияние примесей на спин-вентильный эффект.

Было получено, что в исследуемой структуре возникают триплетные корреляции неелевского типа, которые приводят к спин-вентильному эффекту (и, в частности, к абсолютному спин-вентильному эффекту, т. е. полному подавлению сверхпроводимости при некоторых значениях угла разориентации неелевских векторов) вопреки отсутствию макроскопической намагниченности. Этот результат интересен тем, что демонстрирует возможность реализации сверхпроводящих спиновых вентилях на основе систем S/AF наряду с системами S/F.

Также в работе было показано, что в то время как вблизи половинного заполнения $\mu_S = 0$ критическая температура системы сильнее подавлена в параллельной конфигурации неелевских векторов ($T_c^P < T_c^{AP}$), при удалении от половинного заполнения для некоторых толщин сверхпроводника может наблюдаться противоположное соотношение $T_c^P > T_c^{AP}$. Этот эффект связан с образованием неелевских триплетных куперовских пар с конечным суммарным импульсом и интерференцией их волновых функций. Наконец, было получено, что примеси уменьшают амплитуду спин-вентильного эффекта $|T_c^P - T_c^{AP}|$, что согласуется с фактом подавления примесями триплетных корреляций неелевского типа.

Список публикаций по теме магистерской диссертации

1. Lina Johnsen Kamra, Simran Chourasia, G. A. Bobkov, V. M. Gordeeva, I. V. Bobkova, and Akashdeep Kamra, Complete T_c suppression and Néel triplets mediated exchange in antiferromagnet-superconductor-antiferromagnet trilayers, *Phys. Rev. B* **108**, 144506 (2023).
2. G. A. Bobkov, V. M. Gordeeva, Lina Johnsen Kamra, Simran Chourasia, A. M. Bobkov, Akashdeep Kamra, and I. V. Bobkova, Superconducting spin valves based on antiferromagnet /superconductor/antiferromagnet heterostructures, *Phys. Rev. B* **109**, 184504 (2024).

Список литературы

- ¹A. I. Buzdin, “Proximity effects in superconductor-ferromagnet heterostructures”, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 935 (2005).
- ²F. S. Bergeret, A. F. Volkov, and K. B. Efetov, “Odd triplet superconductivity and related phenomena in superconductor-ferromagnet structures”, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1321 (2005).
- ³M. Eschrig, “Spin-polarized supercurrents for spintronics: a review of current progress”, *Reports on Progress in Physics* **78**, 104501 (2015).
- ⁴J. Linder and J. W. A. Robinson, “Superconducting spintronics”, *Nature Physics* **11**, 307 (2015).
- ⁵P. De Gennes, “Coupling between ferromagnets through a superconducting layer”, *Physics Letters* **23**, 10 (1966).
- ⁶B. Li et al., “Superconducting spin switch with infinite magnetoresistance induced by an internal exchange field”, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 097001 (2013).
- ⁷S. Oh, D. Youm, and M. R. Beasley, “A superconductive magnetoresistive memory element using controlled exchange interaction”, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2376 (1997).
- ⁸L. R. Tagirov, “Low-field superconducting spin switch based on a superconductor / ferromagnet multilayer”, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2058 (1999).
- ⁹Y. V. Fominov, A. A. Golubov, and M. Y. Kupriyanov, “Triplet proximity effect in FSF trilayers”, *JETP Letters* **77**, 510 (2003).
- ¹⁰Y. V. Fominov, A. A. Golubov, T. Y. Karminskaya, M. Y. Kupriyanov, R. G. Deminov, and L. R. Tagirov, “Superconducting triplet spin valve”, *JETP Letters* **91**, 308 (2010).
- ¹¹C.-T. Wu and O. T. Valls, “Superconducting proximity effects in ferromagnet/ superconductor heterostructures”, *J. Supercond. Nov. Magn.* **25**, 2173 (2012).
- ¹²T. Y. Karminskaya, A. A. Golubov, and M. Y. Kupriyanov, “Anomalous proximity effect in spin-valve superconductor/ferromagnetic metal/ferromagnetic metal structures”, *Phys. Rev. B* **84**, 064531 (2011).
- ¹³I. C. Moraru, W. P. Pratt, and N. O. Birge, “Magnetization-dependent T_c shift in ferromagnet/superconductor/ferromagnet trilayers with a strong ferromagnet”, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 037004 (2006).
- ¹⁴A. Singh, C. Sürgers, and H. v. Löhneysen, “Superconducting spin switch with perpendicular magnetic anisotropy”, *Phys. Rev. B* **75**, 024513 (2007).
- ¹⁵J. Zhu, I. N. Krivorotov, K. Halterman, and O. T. Valls, “Angular dependence of the superconducting transition temperature in ferromagnet-superconductor-ferromagnet trilayers”, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 207002 (2010).
- ¹⁶P. V. Leksin et al., “Manifestation of new interference effects in a superconductor - ferromagnet spin valve”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 067005 (2011).
- ¹⁷P. V. Leksin et al., “Evidence for triplet superconductivity in a superconductor-ferromagnet spin valve”, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 057005 (2012).
- ¹⁸P. V. Leksin et al., “Isolation of proximity-induced triplet pairing channel in a superconductor/ferromagnet spin valve”, *Phys. Rev. B* **93**, 100502 (2016).
- ¹⁹N. Banerjee et al., “Evidence for spin selectivity of triplet pairs in superconducting spin valves”, *Nat. Commun.* **5**, 3048 (2014).

- ²⁰A. A. Jara et al., “Angular dependence of superconductivity in superconductor/spin-valve heterostructures”, *Phys. Rev. B* **89**, 184502 (2014).
- ²¹A. Singh, S. Voltan, K. Lahabi, and J. Aarts, “Colossal proximity effect in a superconducting triplet spin valve based on the half-metallic ferromagnet CrO_2 ”, *Phys. Rev. X* **5**, 021019 (2015).
- ²²A. A. Kamashev et al., “Superconducting spin-valve effect in heterostructures with ferromagnetic Heusler alloy layers”, *Phys. Rev. B* **100**, 134511 (2019).
- ²³K. Westerholt et al., “Superconducting spin valve effect of a V layer coupled to an antiferromagnetic [Fe/V] superlattice”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 097003 (2005).
- ²⁴G. Deutscher and F. Meunier, “Coupling between ferromagnetic layers through a superconductor”, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 395 (1969).
- ²⁵J. Y. Gu, C.-Y. You, J. S. Jiang, J. Pearson, Y. B. Bazaliy, and S. D. Bader, “Magnetization-orientation dependence of the superconducting transition temperature in the ferromagnet-superconductor-ferromagnet system: CuNi/Nb/CuNi ”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 267001 (2002).
- ²⁶Y. Gu, G. B. Halász, J. W. A. Robinson, and M. G. Blamire, “Large superconducting spin valve effect and ultras-small exchange splitting in epitaxial rare-earth-niobium trilayers”, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 067201 (2015).
- ²⁷E. V. Gomonay and V. M. Loktev, “Spintronics of antiferromagnetic systems (review article)”, *Low Temp. Phys.* **40**, 17 (2014).
- ²⁸V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, “Antiferromagnetic spintronics”, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
- ²⁹T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich, “Antiferromagnetic spintronics”, *Nature Nanotechnology* **11**, 231 (2016).
- ³⁰A. Kamra, A. Rezaei, and W. Belzig, “Spin splitting induced in a superconductor by an antiferromagnetic insulator”, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 247702 (2018).
- ³¹A. Brataas, B. van Wees, O. Klein, G. de Loubens, and M. Viret, “Spin insulatronics”, *Physics Reports* **885**, 1 (2020).
- ³²G. A. Bobkov, I. V. Bobkova, A. M. Bobkov, and A. Kamra, “Néel proximity effect at antiferromagnet/superconductor interfaces”, *Phys. Rev. B* **106**, 144512 (2022).
- ³³L. J. Kamra, S. Chourasia, G. A. Bobkov, V. M. Gordeeva, I. V. Bobkova, and A. Kamra, “Complete T_c suppression and Néel triplets mediated exchange in antiferromagnet-superconductor-antiferromagnet trilayers”, *Phys. Rev. B* **108**, 144506 (2023).
- ³⁴G. A. Bobkov et al., “Superconducting spin valves based on antiferromagnet / superconductor/antiferromagnet heterostructures”, *Phys. Rev. B* **109**, 184504 (2024).
- ³⁵J. Zhu, Bogoliubov-de Gennes method and its applications, *Lecture Notes in Physics* (Springer International, Berlin, 2016).
- ³⁶G. A. Bobkov, V. M. Gordeeva, A. M. Bobkov, and I. V. Bobkova, “Oscillatory superconducting transition temperature in superconductor/antiferromagnet heterostructures”, *Phys. Rev. B* **108**, 184509 (2023).
- ³⁷A. I. Buzdin and L. N. Bulaevskii, “Antiferromagnetic superconductors”, *Soviet Physics Uspekhi* **29**, 412 (1986).
- ³⁸E. H. Fyhn, A. Brataas, A. Qaiumzadeh, and J. Linder, “Superconducting proximity effect and long-ranged triplets in dirty metallic antiferromagnets”, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 076001 (2023).

³⁹G. A. Bobkov, I. V. Bobkova, and A. M. Bobkov, “Proximity effect in superconductor/antiferromagnet hybrids: Néel triplets and impurity suppression of superconductivity”, *Phys. Rev. B* **108**, 054510 (2023).