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

Направление подготовки / специальность: 03.03.01 Прикладные математика и физика
Направленность (профиль) подготовки: Общая и прикладная физика

ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В БИСЛОЙНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК/АНТИФЕРРОМАГНЕТИК

(бакалаврская работа)

Студент:
Гордеева Валерия Михайловна
____
(подпись студента)

Научный руководитель:
Бобкова Ирина Вячеславовна,
канд. физ.-мат. наук
____
(подпись научного руководителя)

Консультант *(при наличии)*:
____
____
(подпись консультанта)

Москва 2022

Аннотация

Целью данной работы является теоретическое описание эффекта близости в бислойных гетероструктурах сверхпроводник/ферромагнетик и сверхпроводник/ антиферромагнетик и сравнение полученных результатов для двух типов бислоев между собой и с результатами других работ. К задачам работы относятся получение уравнений Боголюбова – де Жена в дискретной модели для чистых сверхпроводника и магнетика, их численное решение, вычисление волновой функции куперовской пары в бислое и исследование зависимости критической температуры от толщины магнитного материала для обоих типов гетероструктур.

Результаты вычисления волновой функции куперовской пары для ферромагнетика согласуются с результатами теоретической статьи, в которой аналогичная задача была решена другим методом. И в случае ферромагнетика, и в случае антиферромагнетика волновая функция куперовской пары и зависимость критической температуры от толщины магнетика испытывают осцилляции, но физическая природа данных осцилляций отличается при разных видах магнитного упорядочения. Результаты вычисления волновой функции куперовской пары в антиферромагнетике являются оригинальными и демонстрируют появление в антиферромагнетике куперовских пар нового типа, которые возникают в результате частичной конвертации обычных куперовских пар в результате процессов переброса. Этот эффект приводит к немонотонной зависимости критической температуры структуры от толщины антиферромагнетика, что может являться объяснением существующих экспериментальных данных.

Содержание

1. Введение

Известно два основных типа магнетиков – ферромагнетики и антиферромагнетики. Все они обладают спонтанным магнитным порядком при температуре ниже некоторой критической. Отличие ферромагнетика от антиферромагнетика состоит в том, что ферромагнетик проявляет ненулевую макроскопическую намагниченность, а в антиферромагнетике она равна нулю. Антиферромагнетик можно представить как комбинацию двух (или нескольких в более сложных случаях) подрешеток, вставленных друг в друга. Если мы говорим о простейшем случае антиферромагнетика с двумя подрешетками, то их намагниченности равны по модулю и противоположны по направлению. Это приводит к тому, что суммарная макроскопическая намагниченность равна нулю.

Исследование гибридных систем сверхпроводник/магнетик – очень активно развивающаяся и широкая область мезоскопической физики. Сверхпроводимость и ферромагнетизм – это два конкурирующих порядка: в то время как сверхпроводящий порядок предпочитает антипараллельную ориентацию спинов куперовской пары, ферромагнетизм заставляет их выстраиваться параллельно. Это обычно приводит к подавлению сверхпроводимости обменным полем ферромагнетика. Кроме того, ферромагнетизм не только подавляет синглетную сверхпроводимость, но и индуцирует триплетную. Если сверхпроводимость и ферромагнетизм сосуществуют в одном и том же материале, то в определенной области параметров возможно возникновение пространственно неоднородных сверхпроводящих состояний, которые называются состояниями ЛОФФ (Ларкина-Овчинникова-Фулде-Феррела) [1–3]. Такие состояния возникают из-за того, что при наличии обменного поля куперовские пары приобретают ненулевой суммарный импульс (рис. 1). Однако область параметров (величины обменного поля, температуры, концентрации примесей), при которых возможно появление такого состояния, довольно узка, и ЛОФФ-состояния до сих пор надежно не обнаружены экспериментально.

Другое и очень перспективное направление – это исследования взаимного влияния магнетизма и сверхпроводимости в гетероструктурах, т.е. структурах, приготовленных из сверхпроводников и магнетиков. В этом случае магнетизм и сверхпроводимость пространственно разделены. Их взаимное влияние друг на друга происходит через эффект близости, т.е. проникновение сверхпроводящих корреляций в магнетик и, наоборот, проникновение магнитного порядка в сверхпроводящую область. Это взаимное проникновение возможно только на границе раздела и происходит на расстояния порядка длины когерентности, которая составляет единицы-сотни нанометров, в зависимости от конкретных материалов. Поэтому области такого масштаба, содержащие границу раздела, как раз и являются наиболее интересным объектом для изучения. Если весь размер структуры не превышает длины когерентности, новая физика распространяется на всю структуру. Именно такая ситуация происходит в бислое сверхпроводник/магнетик. Целью моей дипломной работы является исследование сверхпроводящего эффекта близости, т.е. влияния магнетизма на сверхпроводящие корреляции, в бислоях сверхпроводник/ферромагнетик и сверхпроводник/антиферромагнетик, сравнение их между собой,

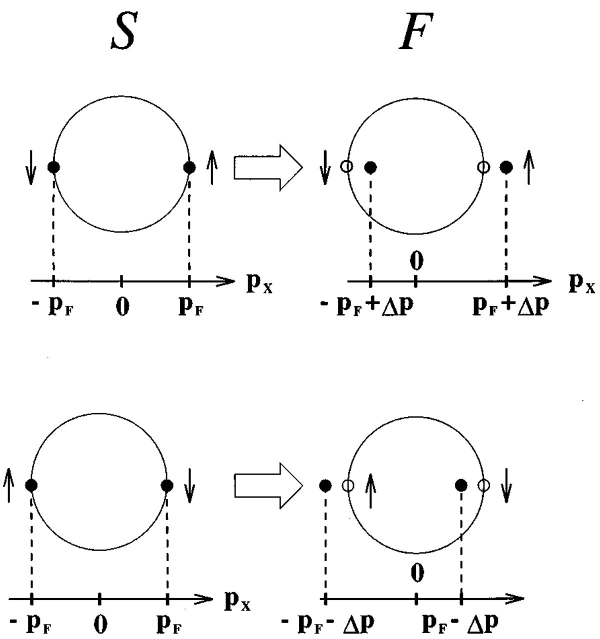

Рис. 1. Куперовская пара при перемещении через S/F границу [3]. Импульсы электронов направлены перпендикулярно границе, $\Delta p = h/v_F$, h – обменное поле, v_F и p_F – фермиевские скорость и импульс.

а также с имеющимися экспериментальными данными.

1.1. Бислои сверхпроводник/ферромагнетик

Схема тонкопленочного S/F бислоя представлена на рис. 2. Толщины слоев сверхпроводника и ферромагнетика d_s и d_f имеют порядок длины когерентности, поэтому в данной системе область эффекта близости распространяется на всю структуру. Данная система хорошо изучена как теоретически, так и экспериментально. В результате эффекта близости в ферромагнитной области наводятся синглетные и триплетные сверхпроводящие корреляции, а в сверхпроводящей области часть синглетных пар также преобразуется в триплетные. Это приводит к подавлению сверхпроводящей критической температуры бислоя по сравнению с критической температурой сверхпроводника. С точки зрения этого эффекта логично ожидать, что критическая температура бислоя будет монотонно падать при увеличении толщины ферромагнитной области, пока не достигнет насыщения. Но, как оказалось, поведение критической температуры как функции толщины ферромагнетика в некоторых областях параметров бислоя является немонотонным. Это связано с тем, что волновая функция куперовской пары, проникшей в ферромагнетик, становится смесью синглетных и триплетных корреляций и осциллирует в пространстве, что иногда называют мезоскопическим аналогом ЛОФФ-состояния. Немонотонность критической температуры является следствием квантовой интерференции этой осциллирующей волновой функции со своей же частью, отраженной от непрозрачной границы ферромагнитного слоя. Рассмотрим это явление подробнее.

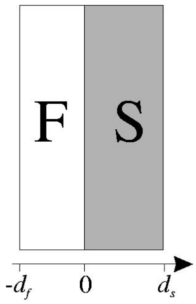

Рис. 2. Схема бислоя S/F [4].

Зависимость критической температуры T_c бислоя сверхпроводник/ферромагнетик от толщины ферромагнитного слоя d_f для случая диффузного сверхпроводника, когда длина свободного пробега электронов много меньше длины когерентности, была теоретически исследована в работе [4] методом решения уравнений Узаделя. Наблюдалось три типа поведения кривой $T_c(d_f)$ (рис. 3): (1) при достаточно высоком сопротивлении S/F границы T_c немонотонно убывает до конечного значения, испытывая минимум при некотором d_f; (2) при среднем сопротивлении границы наблюдается возвратное поведение T_c, т.е. T_c сначала подавляется до нуля, а при дальнейшем росте d_f опять становится ненулевым; (3) при низком сопротивлении границы T_c монотонно убывает, обращаясь в ноль при некотором конечном значении d_f.

Немонотонная зависимость объясняется интерференцией квазичастиц в ферромагнетике. Суммирование по всем траекториям, возвращающимся в исходную точку и изменяющим тип квазичастицы в результате андреевского отражения на S/F границе (рис. 4), приводит к волновой функции куперовской пары вида

$$F(x) \propto \cos(Qd_f)\cos\left(Q(d_f + x)\right), \tag{1}$$

где $Q = \sqrt{\dfrac{E_{\rm ex}}{D_f}}$, осциллирующей с периодом $\lambda_{\rm ex} = 2\pi/Q = 2\pi\sqrt{\dfrac{D_f}{E_{\rm ex}}}$. Уменьшение критической температуры определяется значением волновой функции на S/F границе $F(0) \propto \cos^2(Qd_f)$, и минимум T_c соответствует минимуму $F(0)$, достигающемуся при $d_f = \pi/2Q$. Поскольку волновая функция в ферромагнетике экспоненциально затухает, в зависимости $T_c(d_f)$ наблюдался одиночный минимум, а дальнейшие осцилляции не были заметны.

Эффекты близости в S/F бислое для чистого случая (длина свободного пробега электронов в сверхпроводнике много больше длины когерентности) были описаны в работе [5] при помощи самосогласованного численного решения уравнений Боголюбова – де Жена в непрерывной модели. Были получены зависимости волновой функции куперовской пары от координаты x при разных значениях безразмерного параметра обменного поля в ферромагнетике $I = h_0/E_{FM}$, где h_0 – обменное поле, $E_{FM} = k^2_{F\uparrow}/2m - h_0 = k^2_{F\downarrow}/2m + h_0$ – химпотенциал электронов в ферромагнетике, $k_{F\uparrow}$ и $k_{F\downarrow}$ – фермиевские волновые числа в ферромагнетике, отвечающие спину вверх и

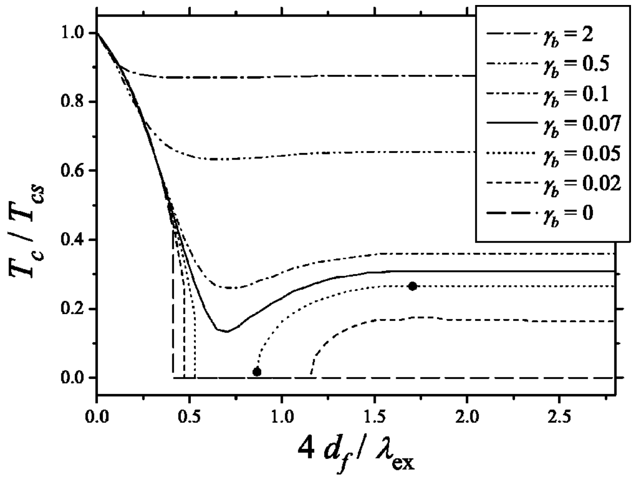

Рис. 3. Типы зависимости $T_c(d_f)$ в бислое S/F [4]. Здесь T_{cs} – критическая температура сверхпроводника в отсутствие ферромагнетика, $\lambda_{\text{ex}} = 2\pi\sqrt{\dfrac{D_f}{E_{\text{ex}}}}$, где D_f и E_{ex}– коэффициент диффузии в ферромагнитном слое и обменная энергия соответственно, γ_b – параметр, пропорциональный сопротивлению S/F границы.

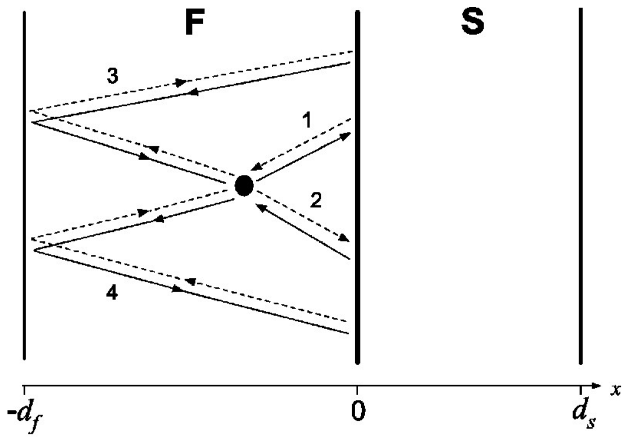

Рис. 4. Типы траекторий, дающих вклад в волновую функцию скоррелированных квазичастиц в ферромагнитной области [4]. Жирные линии отвечают электронам, пунктирные – дыркам, стрелками обозначено направление скорости.

спину вниз соответственно. Эти зависимости представлены на рис. 5 во всем бислое, рис. 6 демонстрирует более крупным планом область ферромагнетика вблизи границы со сверхпроводником, в которой наблюдаются осцилляции сверхпроводящих корреляций. Левый и правый ряды графиков соответствуют $k_{FS}\xi_0 = 50$ и $k_{FS}\xi_0 = 200$, где k_{FS} – фермиевское волновое число в сверхпроводнике, ξ_0 – длина когерентности при нулевой температуре, безразмерная координата определяется как $Z' = k_{FS}x$.

Поведение волновой функции в ферромагнетике описывается двумя характерными длинами: ξ_1, соответствующей безразмерной координате $k_{FS}\xi_1 = Z'_1$, самой близкой к S/F границе точке в ферромагнетике, где F обращается в ноль, и ξ_2, определяющей период осцилляций волновой функции. Величина ξ_2 находилась при помощи фитиро-

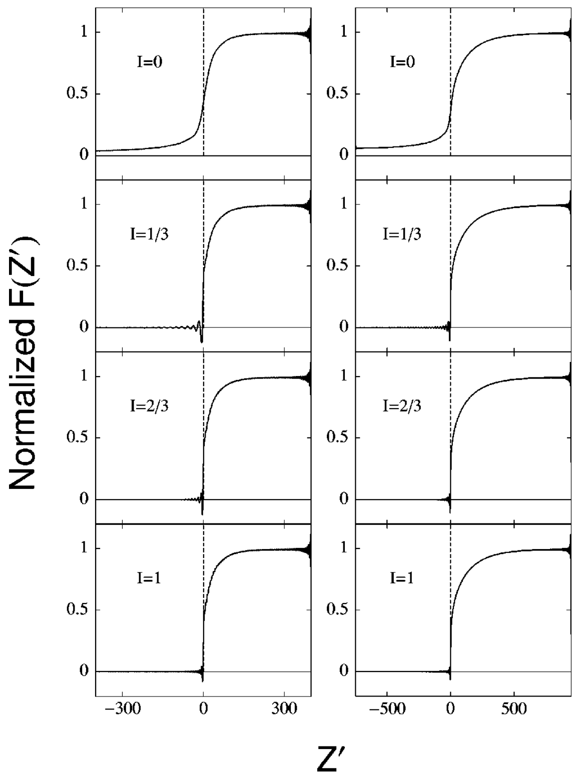

Рис. 5. Волновая функция куперовской пары F, нормированная на ее значение в глубине сверхпроводника, как функция безразмерного расстояния от S/F границы Z' ($Z' < 0$ соответствует ферромагнетику, $Z' > 0$ – сверхпроводнику) [5].

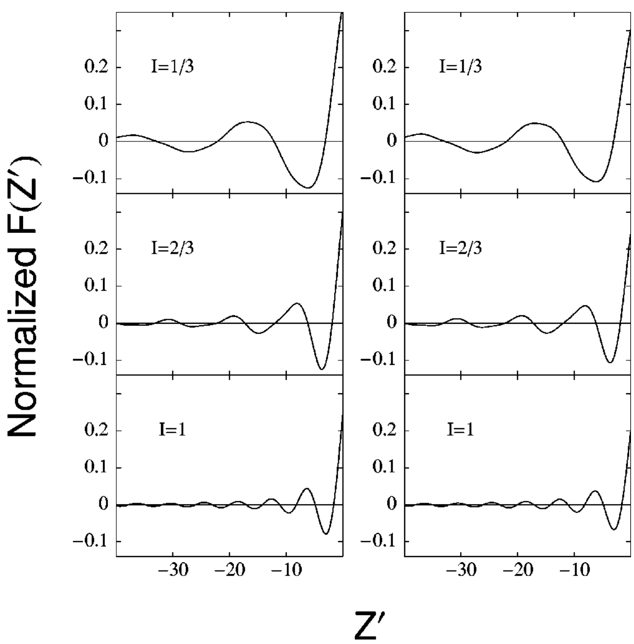

Рис. 6. Волновая функция куперовской пары вблизи от S/F границы со стороны ферромагнетика [5].

вания результатов формулой

$$F(Z') = \alpha \frac{\sin \frac{Z'}{k_{FS}\xi_2}}{\frac{Z'}{k_{FS}\xi_2}}, \tag{2}$$

где α – некоторая константа, период осцилляций при этом равен $2\pi k_{FS}\xi_2$. В чистом случае частота возникающих осцилляций волновой функции куперовской пары определяется разностью фермиевских волновых чисел в ферромагнетике, соответствующих противоположным направлениям спина, поэтому можно оценить

$$\xi_2 \approx (k_{F\uparrow} - k_{F\downarrow})^{-1} = k_{FS}^{-1} \frac{\sqrt{1+I}}{\sqrt{1+I} - \sqrt{1-I}}, \tag{3}$$

если выбрать параметры таким образом, что химический потенциал электронов в сверхпроводнике $E_{FS} = k_{FS}^2/2m$ совпадает с $E_{F\uparrow} = k_{F\uparrow}^2/2m$. Для рассматриваемых в данной работе значений I соотношение (3) можно переписать в виде $k_{FS}\xi_2 \approx 1/I$, откуда период осцилляций приближенно равен $2\pi/I$, что соответствовало результатам фитирования кривых $F(Z')$.

Таким образом, и в чистом, и в диффузном пределе расчеты показывают, что волновая функция куперовской пары осциллирует в ферромагнитной области. Это приводит к осцилляциям критической температуры как функции толщины ферромагнитного слоя, что для диффузного сверхпроводника было показано в ряде работ, например, в работе [4]. Для случая бислоя, состоящего из чистого сильного ферромагнетика и грязного сверхпроводника, осцилляции T_c были рассчитаны в работе [6]. Там были получены четкие слабозатухающие осцилляции (рис. 7). Для случая чистого сверхпроводника и

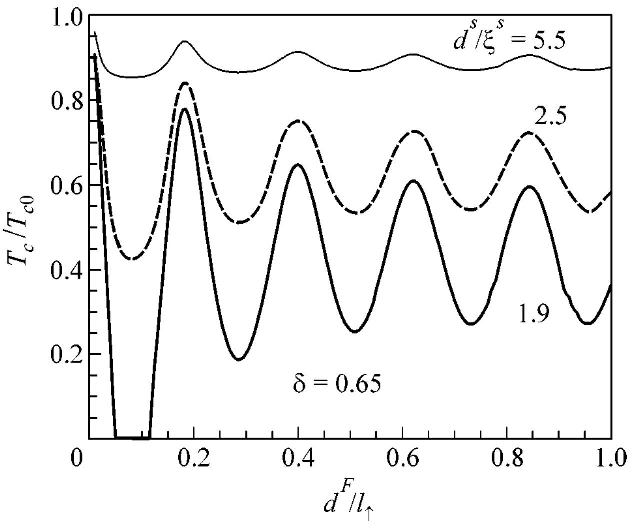

Рис. 7. Зависимость T_c S/F бислоя от толщины ферромагнитного слоя d^F для случая чистого сильного ферромагнетика и грязного сверхпроводника [6]. T_{c0} – критическая температура сверхпроводника в отсутствие ферромагнетика, d^S – толщина сверхпроводящего слоя, ξ^S – длина когерентности в сверхпроводнике, $\delta = p_\downarrow/p_\uparrow$, l и p – длина свободного пробега и фермиевский импульс электронов в ферромагнетике, индексы $\uparrow, \downarrow$ соответствуют направлениям спина.

чистого ферромагнетика осцилляции критической температуры не рассматривались, поэтому я восполняю этот пробел в своем дипломе.

Экспериментально зависимость критической температуры гетероструктур, состоящих из сверхпроводящих и ферромагнитных слоев, от размера ферромагнитной части была исследована в работах [7–11]. Для мультислоев Nb/Gd [7], Nb/CuMn [8] и трислоев Fe/Nb/Fe [9] наблюдалось осциллирующее поведение $T_c(d_f)$ при постоянной длине сверхпроводящего слоя d_{Nb}: критическая температура резко убывала, достигая минимума, затем испытывала максимум, после чего убывала до некоторого постоянного значения (рис. 8). Также при уменьшении длины сверхпроводника возрастала амплитуда

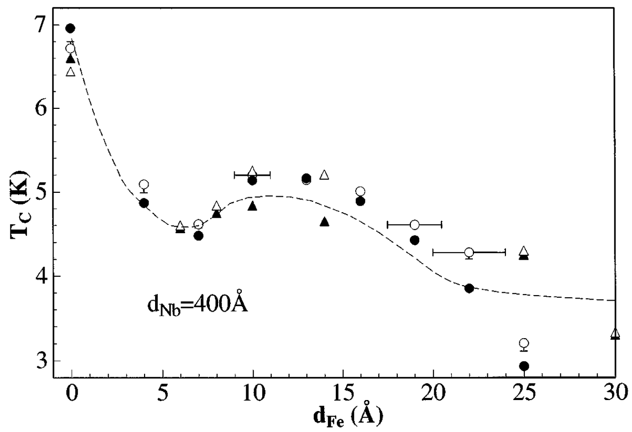

Рис. 8. Зависимость $T_c(d_{\mathrm{Fe}})$ в трислоях Fe/Nb/Fe [9] (черные и белые символы соответствуют двум способам измерения T_c, форма символов – двум сериям образцов).

осцилляций [7], а при увеличении концентрации марганца в CuMn (т.е при большем значении обменной энергии в ферромагнетике) уменьшалось значение d_f, при котором наблюдался минимум критической температуры [8].

В экспериментах с бислоями $\mathrm{Nb/Cu_{41}Ni_{59}}$ [10, 11] были получены следующие виды зависимости $T_c(d_f)$ (рис. 9): немонотонная с неглубоким минимумом (для образцов с $d_{\mathrm{Nb}} \approx 14,1$ нм); немонотонная с ярко выраженным минимумом (при $d_{\mathrm{Nb}} \approx 8,3$ нм и $d_{\mathrm{Nb}} \approx 7,8$ нм); резко убывающая до нуля с последующим исчезновением перехода в сверхпроводящее состояние на определенном интервале значений длины ферромагнетика и его возвращением при дальнейшем увеличении d_{CuNi} ($d_{\mathrm{Nb}} \approx 7,3$ нм); испытывающая повторное обращение в ноль ($d_{\mathrm{Nb}} \approx 6,2$ нм). Экспериментальные данные фитировались при помощи модифицированной авторами теории Узаделя (сплошные линии на рис. 9). Видно, что результаты фитирования находятся в достаточно хорошем согласии с экспериментом.

1.2. Бислои сверхпроводник/антиферромагнетик

Теперь перейдем к обсуждению эффекта близости в бислоях сверхпроводник / антиферромагнетик. Интуитивно кажется, что с точки зрения сверхпроводящего эффекта близости антиферромагнетик должен вести себя примерно как нормальный металл, т.е. куперовские пары не должны чувствовать обменное поле антиферромагнетика. Дело

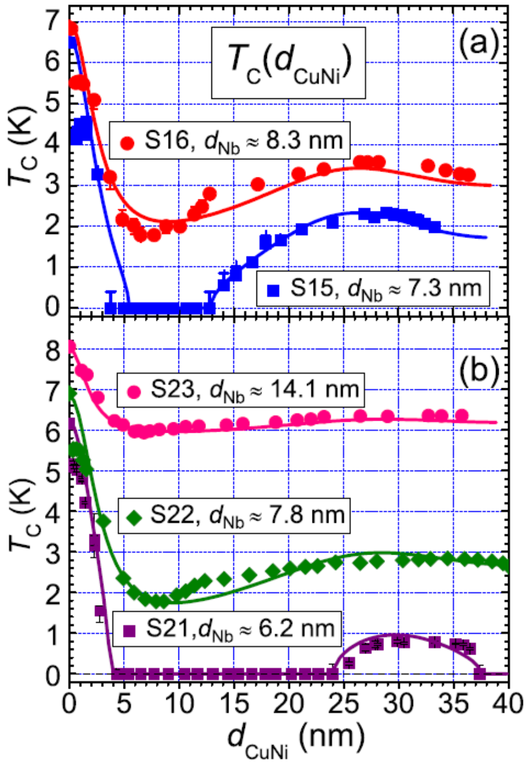

Рис. 9. Зависимость $T_c(d_{\mathrm{CuNi}})$ в бислоях $\mathrm{Nb/Cu_{41}Ni_{59}}$ [11].

в том, что куперовская пара имеет размер порядка сверхпроводящей длины когерентности, т.е. десятки-сотни нанометров. Поэтому она «чувствует» эффективное обменное поле, усредненное по области такого размера. Обменное поле антиферромагнетика резко меняется на атомных масштабах, поэтому, казалось бы, на размере куперовской пары оно должно полностью усредняться.

С точки зрения теории зависимость критической температуры S/AF бислоя от толщины слоя антиферромагнитного металла не обсуждалась. Теоретические зависимости критической температуры от толщины слоя сверхпроводника и зависимости верхнего критического магнитного поля от параметров бислоя проводились в работе [12]. Сделан вывод, что граница с антиферромагнетиком подавляет сверхпроводимость слабее, чем граница с ферромагнетиком. Кроме того, было предсказано, что на S/AF границе волновая функция куперовских пар затухает в антиферромагнетик значительно быстрее, чем в нормальный металл на S/N границе. Причина быстрого затухания – наличие щели в спектре квазичастиц антиферромагнетика. Длина затухания имеет тот же порядок величины, что и длина затухания в ферромагнетик на S/F границе. В работе [12] подчеркивалось, что важное различие между ферромагнетиком и антиферромагнетиком состоит в том, что затухание волновой функции куперовских пар в антиферромагнетик не сопровождается осцилляциями, в отличие от случая ферромагнетика. В данной дипломной работе показано, что это не так.

Эффект близости в S/AF бислоях был изучен в эксперименте с использованием неупорядоченного сплава $\gamma - \mathrm{Fe_{50}Mn_{50}}$ с гранецентрированной кубической структурой в качестве антиферромагнетика и Nb в качестве сверхпроводника [13]. Наблюдалось резкое падение критической температуры при добавлении к сверхпроводнику антиферромагнитного слоя минимальной толщины с последующей немонотонной зависимостью $T_c(d_{\mathrm{FeMn}})$ (рис. 10).

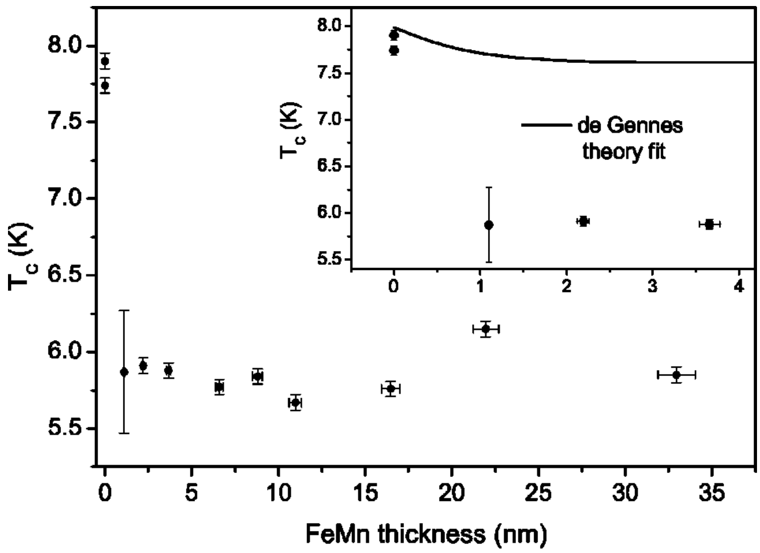

Рис. 10. Зависимость $T_c(d_{\mathrm{FeMn}})$ при $d_{\mathrm{Nb}} = 25$ нм [13].

Полученные результаты фитировались при помощи теории де Жена [14]: критическая температура бислоя определялась как максимальный корень T_c уравнения

$$\frac{1}{\sqrt{2}\xi_s}\sqrt{\frac{T_{cs}}{T_c}-1}\tan\left(\frac{d_s}{\sqrt{2}\xi_s}\sqrt{\frac{T_{cs}}{T_c}-1}\right) = \frac{2}{\xi_{AF}}\frac{D_{AF}N_{AF}(\epsilon_F)}{D_sN_s(\epsilon_F)}\tanh\frac{2d_{AF}}{\xi_{AF}}, \tag{4}$$

где $N_{s,AF}(\epsilon_F)$ – плотность числа состояний на уровне Ферми, $\xi_{s,AF}$ – длины когерентности в сверхпроводнике и антиферромагнетике соответственно. Величина ξ_{AF} была найдена из измерений джозефсоновского тока через FeMn в трислое Ni/FeMn/Ni с использованием теории образования сверхпроводящего состояния в антиферромагнетике в бислоях S/AF, представленной в [12]. Из зависимости плотности критического тока J от d_{FeMn}, имеющей вид $J \propto e^{-k_{AF}d_{AF}}$, определялся модуль волнового вектора в антиферромагнетике k_{AF}, далее использовалось соотношение $k_{AF} = 2/\xi_{AF}$. Коэффициент диффузии в FeMn D_{AF} был найден из формулы $\xi_{AF} = (2\hbar D_{AF}/H_{\mathrm{ex}})^{1/2}$, где H_{ex} – обменная энергия в антиферромагнетике.

Полученная таким образом теоретическая зависимость $T_c(d_{\mathrm{FeMn}})$ не согласуется с экспериментальными результатами: она демонстрирует выход на постоянное значение T_c, значительно превышающее критическую температуру бислоя, наблюдаемую в эксперименте. Предположительно, это связано с тем, что теория де Жена описывает нормальный металл и не является корректной для случая антиферромагнетика. Также фитирование на основании данной теории не отражает наблюдавшегося немонотонного поведения T_c, которое, однако, может объясняться возникновением новой фазы в антиферромагнетике при толщине слоя, превышающей 20 нм.

Отсутствие согласия между экспериментальными данными по зависимости критической температуры S/AF бислоя от толщины антиферромагнетика и теоретическим описанием в рамках модели нормального слоя с короткой длиной затухания пар ξ_{AF} свидетельствует о том, что физическая картина эффекта близости между сверхпроводником и антиферромагнетиком более богата и не сводится только к более быстрому распариванию куперовских пар, чем в нормальном металле. Это обстоятельство послужило мотивацией исследований, проведенных в данной дипломной работе.

2. Система и модель

2.1. Схема системы

Будем рассматривать бислой AF/S, состоящий из чистых сверхпроводника и антиферромагнетика с полностью прозрачной границей между ними. Считаем, что оба материала имеют одинаковую прямоугольную кристаллическую решетку. Выделим в ней две подрешетки A и B так, как показано на рис. 11. Стрелками обозначено направление

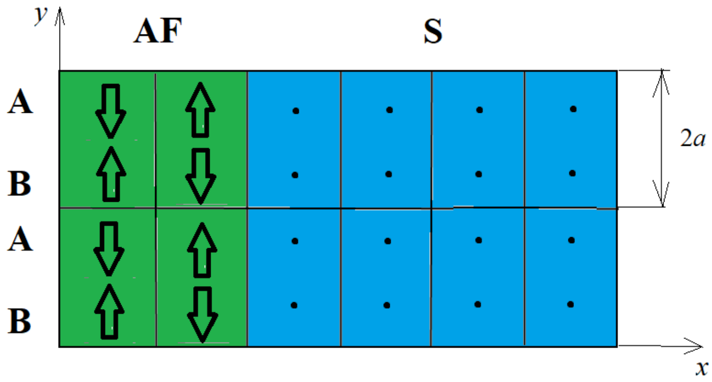

Рис. 11. Схема бислоя AF/S.

намагниченности в данном узле, границы прямоугольников соответствуют границам выбранных элементарных ячеек. Направим оси x и y перпендикулярно AF/S границе и вдоль этой границы соответственно. Тогда размер ячейки вдоль оси y составляет $2a$, где a – расстояние между соседними узлами решетки вдоль данного направления. F/S бислой рассматривается в рамках той же модели, но намагниченности на всех узлах считаются одинаковыми.

2.2. Вывод уравнений Боголюбова – де Жена

В приближении сильной связи рассматриваемая система описывается следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \boldsymbol{i},\boldsymbol{j} \rangle, \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{i}\sigma} \hat{c}_{\boldsymbol{j}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{i}} \left(\Delta_{\boldsymbol{i}} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{i}\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{i}\downarrow} + \Delta^*_{\boldsymbol{i}} \hat{c}_{\boldsymbol{i}\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{i}\uparrow} \right) - \mu \sum_{\boldsymbol{i},\sigma} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{i}\sigma} \hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{i},\alpha\beta} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{i}\alpha} \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}} \vec{\sigma} \right)_{\alpha\beta} \hat{c}_{\boldsymbol{i}\beta}, \quad (5)$$

где $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$ – радиус-векторы элементарных ячеек, к которым относятся узлы, t – энергия прыжка между связанными состояниями, соответствующими соседним узлам, μ – химический потенциал, $\Delta_{\boldsymbol{i}}$ и $\vec{m}_{\boldsymbol{i}}$ – сверхпроводящий параметр порядка и намагниченность соответственно в узле из ячейки с радиус-вектором $\boldsymbol{i}$, σ, α, β – спиновые индексы, суммирование по $\langle \boldsymbol{i}, \boldsymbol{j} \rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям. Применим преобразование Боголюбова:

$$\hat{c}^{A(B)}_{\boldsymbol{i}\sigma} = \sum_{n} \left(u^{\boldsymbol{i},A(B)}_{n\sigma} \hat{b}_n + \left(v^{\boldsymbol{i},A(B)}_{n\sigma} \right)^* \hat{b}^{\dagger}_n \right), \quad (6)$$

где $\hat{b}_n^\dagger$ и $\hat{b}_n$ – операторы рождения и уничтожения боголюбовских квазичастиц соответственно, $A(B)$ обозначает подрешетку, к которой относится узел. Диагонализованный гамильтониан запишется в виде:

$$\hat{H}' = E_0 + \sum_n \varepsilon_n \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n. \tag{7}$$

Вычислим $[\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}^{A(B)}, \hat{H}]$ и $[\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}^{A(B)}, \hat{H}']$. Из антикоммутационных соотношений $\{\hat{b}_n, \hat{b}_m^\dagger\} = \delta_{nm}$ и $\{\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}, \hat{c}_{\boldsymbol{j}\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\boldsymbol{ij}}\delta_{\sigma\sigma'}$ получаем

$$\begin{aligned}
&[\hat{b}_m, \hat{H}'] = \varepsilon_m \hat{b}_m, [\hat{b}_m^\dagger, \hat{H}'] = -\varepsilon_m \hat{b}_m^\dagger, [\hat{c}_{\boldsymbol{i}'\sigma'}, \hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\boldsymbol{j}\sigma}] = \delta_{\boldsymbol{ii}'}\delta_{\sigma\sigma'}\hat{c}_{\boldsymbol{j}\sigma}, [\hat{c}_{\boldsymbol{i}'\sigma'}, \hat{c}_{\boldsymbol{i}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\boldsymbol{i}\downarrow}^\dagger] = \\
&= \delta_{\sigma\uparrow}\hat{c}_{\boldsymbol{i}',\downarrow}^\dagger - \delta_{\sigma\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{i}',\uparrow}^\dagger = \sigma\hat{c}_{\boldsymbol{i}',-\sigma}^\dagger, [\hat{c}_{\boldsymbol{i}'\sigma'}, \hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}] = \hat{c}_{\boldsymbol{i}'\sigma'}, [\hat{c}_{\boldsymbol{i}'\sigma'}, \hat{c}_{\boldsymbol{i}\alpha}^\dagger \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}\vec{\sigma}\right)_{\alpha\beta} \hat{c}_{\boldsymbol{i}\beta}] = \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}'}\vec{\sigma}\right)_{\sigma'\beta} \hat{c}_{\boldsymbol{i}'\beta},
\end{aligned} \tag{8}$$

откуда

$$[\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}^{A(B)}, \hat{H}'] = \sum_n \left(\varepsilon_n u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)} \hat{b}_n - \varepsilon_n \left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* \hat{b}_n^\dagger\right), \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
&[\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma}^{A(B)}, \hat{H}] = -t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle} \hat{c}_{\boldsymbol{j}\sigma} + \sigma\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} \hat{c}_{\boldsymbol{i},-\sigma}^\dagger - \mu\hat{c}_{\boldsymbol{i}\sigma} + \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha} \hat{c}_{\boldsymbol{i}\alpha} = \\
&= -t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle, n} \left(u_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)}\hat{b}_n + \left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)}\right)^* \hat{b}_n^\dagger\right) + \sigma\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} \sum_n \left(\left(u_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* \hat{b}_n^\dagger + v_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\hat{b}_n\right) - \\
&- \mu\sum_n \left(u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\hat{b}_n + \left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* \hat{b}_n^\dagger\right) + \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha} \sum_n \left(u_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)}\hat{b}_n + \left(v_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* \hat{b}_n^\dagger\right) = \\
&= \sum_n \left(-t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle} u_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)} + \sigma\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} v_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)} - \mu u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)} + \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha} u_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)\hat{b}_n + \\
&+ \sum_n \left(-t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle} \left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)}\right)^* + \sigma\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} \left(u_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* - \mu\left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* + \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha} \left(v_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^*\right)\hat{b}_n^\dagger,
\end{aligned} \tag{10}$$

где $\langle \boldsymbol{i}\rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям узла из ячейки $\boldsymbol{i}$, которым соответствуют ячейки с радиус-векторами $\boldsymbol{j}$, $\sigma = 1$ соответствует спину вверх, а $\sigma = -1$ – спину вниз. Приравнивая коэффициенты при $\hat{b}_n$ и $\hat{b}_n^\dagger$ соответственно в (9) и (10), получаем:

$$\begin{aligned}
&-t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle} u_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)} + \sigma\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} v_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)} - \mu u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)} + \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha} u_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)} = \varepsilon_n u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}, \\
&-t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle} \left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)}\right)^* + \sigma\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} \left(u_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* - \mu\left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* + \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha} \left(v_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^* = -\varepsilon_n \left(v_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^*,
\end{aligned} \tag{11}$$

или

$$
\begin{aligned}
&-t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle} u_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)}+\sigma\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}v_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}-\mu u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}+\left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha}u_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)}=\varepsilon_n u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)},\\
&-t\sum_{\langle \boldsymbol{i}\rangle} v_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},A(B)}+\sigma\left(\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\right)^{*}u_{n,-\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}-\mu v_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}+\left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}\vec{\sigma}^{*}\right)_{\sigma\alpha}v_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)}=-\varepsilon_n v_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}.
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Применим ко всем функциям в (12), зависящим от радиус-вектора ячейки, разложение в ряд Фурье вдоль оси y, которое запишется следующим образом:

$$
f(\boldsymbol{i})=\sum_{k_y} f(i_x,k_y)e^{2iak_y i_y},
\tag{13}
$$

где i_x, i_y – безразмерные (т.е. измеряемые в терминах количества ячеек) компоненты $\boldsymbol{i}$ вдоль соответствующих осей, k_y – y-компонента волнового вектора $\vec{k}$. При фиксированном k_y окончательно получаем следующие уравнения Боголюбова – де Жена:

$$
\begin{aligned}
-t\left(u_{n\sigma}^{i-1,A(B)}+u_{n\sigma}^{i+1,A(B)}+u_{n\sigma}^{i,B(A)}\left(1+e^{\pm 2ika}\right)\right)+\sigma\Delta_i^{A(B)}v_{n,-\sigma}^{i,A(B)}-\mu u_{n\sigma}^{i,A(B)}+&\\
+\left(\vec{m}_i^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha}u_{n\alpha}^{i,A(B)}=\varepsilon_n u_{n\sigma}^{i,A(B)},&\\
-t\left(v_{n\sigma}^{i-1,A(B)}+v_{n\sigma}^{i+1,A(B)}+v_{n\sigma}^{i,B(A)}\left(1+e^{\pm 2ika}\right)\right)+\sigma\left(\Delta_i^{A(B)}\right)^{*}u_{n,-\sigma}^{i,A(B)}-\mu v_{n\sigma}^{i,A(B)}+&\\
+\left(\vec{m}_i^{A(B)}\vec{\sigma}^{*}\right)_{\sigma\alpha}v_{n\alpha}^{i,A(B)}=-\varepsilon_n v_{n\sigma}^{i,A(B)},&
\end{aligned}
\tag{14}
$$

где введены обозначения $i=i_x, k=k_y$.

2.3. Волновая функция куперовской пары

Волновую функцию куперовской пары в узлах ячейки $\boldsymbol{i}$ $F_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}$ можно выразить через волновые функции электронов и дырок, являющиеся решениями уравнений Боголюбова – де Жена:

$$
F_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}=\left\langle \hat{c}_{\boldsymbol{i}\downarrow}^{A(B)}\hat{c}_{\boldsymbol{i}\uparrow}^{A(B)}\right\rangle=\left\langle\sum_n\left(u_{n\downarrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\hat{b}_n+\left(v_{n\downarrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^{*}\hat{b}_n^{\dagger}\right)\sum_k\left(u_{k\uparrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\hat{b}_k+\left(v_{k\uparrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^{*}\hat{b}_k^{\dagger}\right)\right\rangle.
\tag{15}
$$

Учитывая $\left\langle b_n^{\dagger}b_k\right\rangle=f_n\delta_{nk}, \left\langle b_n b_k^{\dagger}\right\rangle=\left(1-\left\langle b_k^{\dagger}b_n\right\rangle\right)\delta_{nk}=\left(1-f_n\right)\delta_{nk}$, где $f_n=\dfrac{1}{1+e^{\frac{\varepsilon_n}{T}}}$ – функция распределения квазичастиц, и $\left\langle b_n^{\dagger}b_k^{\dagger}\right\rangle=\langle b_n b_k\rangle=0$, получаем:

$$
F_{\boldsymbol{i}}^{A(B)}=\sum_n\left(u_{n\downarrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\left(v_{n\uparrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^{*}(1-f_n)+u_{n\uparrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\left(v_{n\downarrow}^{\boldsymbol{i},A(B)}\right)^{*}f_n\right).
\tag{16}
$$

После разложения в ряд Фурье по формуле (13) и интегрирования по y-компоненте импульса (16) перепишется как

$$F_i^{A(B)} = \int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{d(2ka)}{2\pi} \sum_n \left(u_{n\downarrow}^{i,A(B)} \left(v_{n\uparrow}^{i,A(B)} \right)^* (1 - f_n) + u_{n\uparrow}^{i,A(B)} \left(v_{n\downarrow}^{i,A(B)} \right)^* f_n \right) =$$

$$= \int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{d(ka)}{\pi} \sum_n \left(u_{n\downarrow}^{i,A(B)} \left(v_{n\uparrow}^{i,A(B)} \right)^* (1 - f_n) + u_{n\uparrow}^{i,A(B)} \left(v_{n\downarrow}^{i,A(B)} \right)^* f_n \right). \quad (17)$$

2.4. Описание численных методов

Параметр порядка $\Delta_i^{A(B)}$ выражается через волновую функцию куперовской пары следующим образом:

$$\Delta_i^{A(B)} = g_i^{A(B)} F_i^{A(B)}, \quad (18)$$

где $g_i^{A(B)}$ – константа спаривания, которую мы полагаем равной некоторому постоянному значению g в сверхпроводнике и равной нулю в магнетике. Тогда из формулы (17) получаем

$$\Delta_i^{A(B)} = \int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{d(ka) g_i^{A(B)}}{\pi} \sum_n \left(u_{n\downarrow}^{i,A(B)} \left(v_{n\uparrow}^{i,A(B)} \right)^* (1 - f_n) + u_{n\uparrow}^{i,A(B)} \left(v_{n\downarrow}^{i,A(B)} \right)^* f_n \right). \quad (19)$$

Будем решать систему (14) самосогласованно. Выбирая некоторое начальное значение для $\Delta_i^{A(B)}$ и численно диагонализуя матрицу, соответствующую левой части системы, найдем набор ее собственных функций $u_{n\sigma}^{i,A(B)}$, $v_{n\sigma}^{i,A(B)}$ и отвечающих им собственных значений ε_n, которые затем используем для вычисления параметра порядка по формуле (19). После этого подставляем новые значения $\Delta_i^{A(B)}$ в (14) и заново находим собственные функции и собственные значения матрицы, далее снова вычисляем параметр порядка. Процесс повторяем до тех пор, пока максимальный модуль разности между значениями параметра порядка для одной ячейки, полученными в результате двух последовательных итераций, не окажется меньше некоторого заданного малого числа. Далее используем собственные функции и значения, найденные на финальном шаге, для вычисления волновой функции куперовской пары по формуле (17).

Для определения критической температуры бислоя воспользуемся тем, что зависимость $\Delta(T)$ является монотонно убывающей функцией T, обращающейся в ноль при $T = T_c$. Будем находить T_c методом двоичного поиска. На начальном шаге определим интервал температур, в пределах которого мы будем искать критическую температуру, и выполним три итерации описанного выше процесса по самосогласованному вычислению параметра порядка при температуре, равной середине выбранного интервала. При этом в качестве начальных $\Delta_i^{A(B)}$ выбираем значения, много меньшие ожидаемых в результате вычислений. Если средний параметр порядка в сверхпроводнике оказался больше заданного изначально, далее в качестве интервала температур выбираем правую половину интервала, рассматриваемого на данном шаге, в противном случае – левую. Продолжаем процесс до тех пор, пока длина интервала не станет меньше некоторого заданного малого значения, в качестве критической температуры выбираем середину интервала на последнем шаге.

3. Результаты

Метод, описанный в предыдущем разделе, был использован для численного вычисления волновой функции куперовской пары и критической температуры в бислоях S/F и S/AF при различных значениях обменного поля в магнитных материалах.

Все величины, имеющие размерность энергии, были нормированы на величину энергии прыжка t. В выбранных единицах измерения для расчетов использовались следующие значения параметров: константа спаривания в сверхпроводнике $g = -0.8$, химический потенциал сверхпроводника $\mu_S = 0.9$, химический потенциал ферромагнетика $\mu_F = 0$, температура системы (при вычислении волновой функции куперовской пары) $T = 0.001$, дебаевская энергия, по которой производилась обрезка при нахождении ε_n, $\varepsilon_D = 6$. Интегрирование по ka при расчетах по формулам (17) и (19) велось с шагом 0.01. При нахождении волновой функции куперовской пары начальное значение $\Delta_i^{A(B)}$ выбиралось равным 0.1, а самосогласованное вычисление параметра порядка продолжалось до тех пор, пока максимальный модуль разности результатов двух последовательных итераций для одной ячейки не оказывался меньше 10^{-4}. При расчетах T_c в качестве начальных значений использовались интервал температур $[10^{-5}, 0.07]$ и $\Delta_i^{A(B)} = 10^{-4}$, процесс прекращался при длине интервала, не превышающей 10^{-5}.

Намагниченность в узле номер i (отсчитывая от левого края бислоя) $\vec{m}_i^{A(B)}$ задавалась следующим образом. Считаем, что вектор намагниченности направлен по оси z, тогда во всем бислое $(m_i)_x^{A(B)} = (m_i)_y^{A(B)} = 0$. Для z-компоненты имеем $(m_i)_z^{A(B)} = 0$ в случае сверхпроводника, $(m_i)_z^{A(B)} = h$ для ферромагнетика и $(m_i)_z^A = (-1)^i h$, $(m_i)_z^B = (-1)^{i-1} h$ для антиферромагнетика, где h – обменное поле. Расчеты производились для нескольких значений h из интервала [0, 1].

3.1. Волновая функция куперовской пары в бислое S/F

На рис. 12 представлена зависимость волновой функции куперовской пары F_i, нормированной на ее значение в объеме сверхпроводника F_S, от номера узла i для бислоя, где область $i \in [1, 30]$ соответствует ферромагнетику (или нормальному металлу в случае $h = 0$), $i \in [31, 100]$ – сверхпроводнику. В качестве F_S использовалось значение волновой функции в узле 85.

Полученные графики качественно совпадают с аналогичными результатами, представленными в [5] (рис. 5, 6). В глубине сверхпроводящей области F_i принимает постоянное значение, резко уменьшается вблизи S/F границы, а вблизи границы с вакуумом испытывает быстрые осцилляции. Это фриделевские осцилляции, обусловленные интерференцией волны падающего на границу электрона с волной отраженного электрона, затухающие на нескольких атомных масштабах. В ферромагнитной области наблюдались затухающие осцилляции волновой функции, период которых уменьшался при увеличении обменного поля.

Для количественного сравнения полученных результатов с работой [5] было вы-

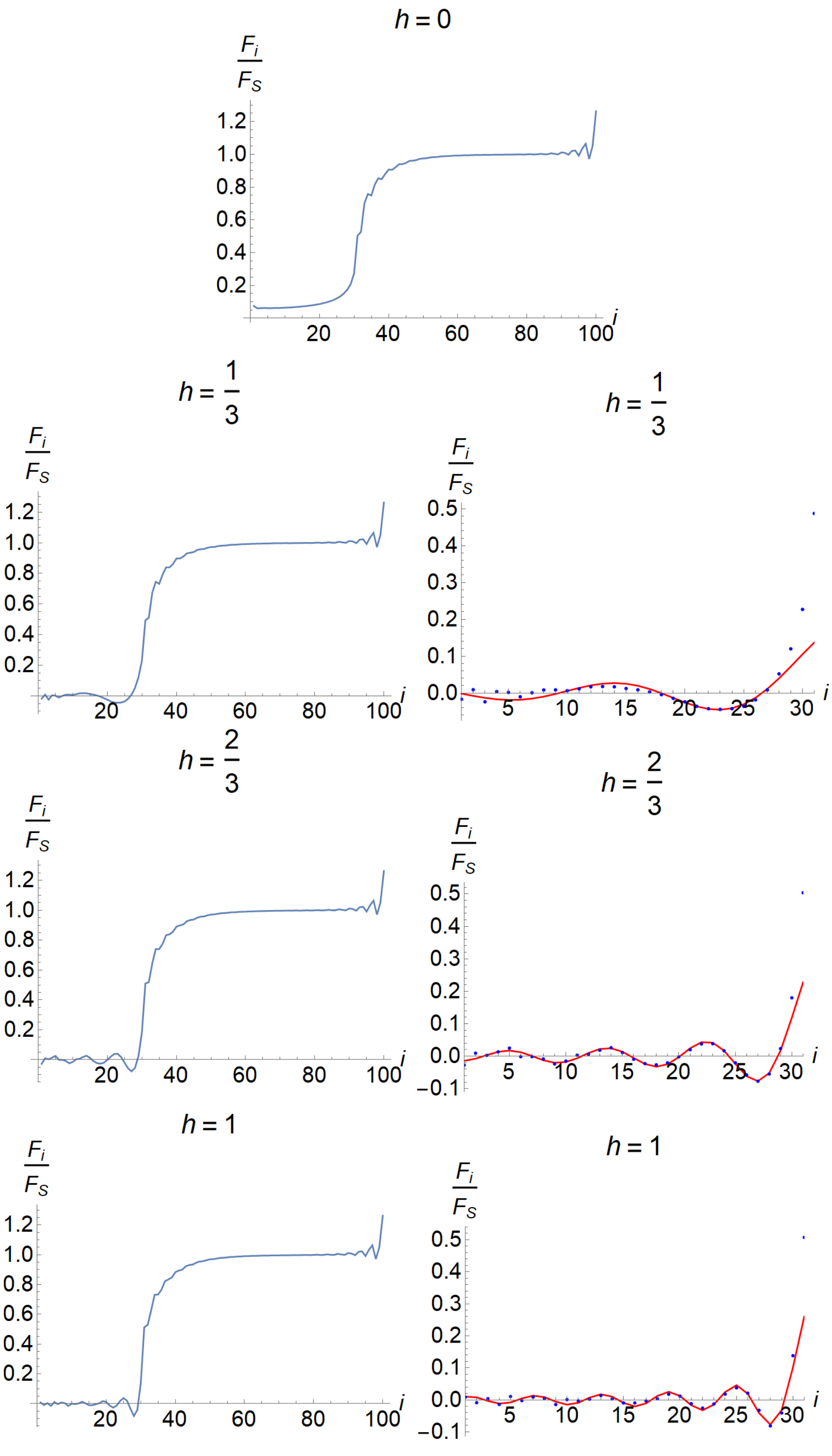

Рис. 12. Волновая функция куперовской пары F_i в бислое S/F, нормированная на ее значение в объеме сверхпроводника F_S, при разных значениях обменного поля ферромагнетика h. Ферромагнетику соответствует область $i \in [1, 30]$, сверхпроводнику – $i \in [31, 100]$. Справа отдельно показаны ферромагнитная часть структуры и результаты фитирования осцилляций F_i в ней (синие точки) при помощи формулы (20) (красная кривая).

полнено фитирование величины F_i/F_S формулой

$$f(i) = a\frac{\sin\frac{i-b}{c}}{\frac{i-b}{c}}, \tag{20}$$

аналогичной формуле (2), где значения параметров a, b, c подбирались вручную. Результаты фитирования показаны в правой части рис. 12 красной кривой. Поскольку формула (20) является удачным приближением поведения волновой функции куперовской пары в глубине ферромагнитного слоя, результатами фитирования можно воспользоваться для анализа зависимости периода осцилляций F_i от величины обменного поля h. Для этой цели помимо графиков F_i/F_S, представленных на рис. 12, были получены соответствующие зависимости для структур, содержащих по 30 узлов в ферромагнитной и сверхпроводящей областях, при значениях обменного поля $h = 0.2, h = 0.5$ и $h = 0.8$. Далее также производилось фитирование при помощи формулы (20) с подбором параметров и определялся коэффициент c, а затем период осцилляций $L = 2\pi c$. На рис. 13 изображена полученная зависимость $L(h)$, фитированная формулой

$$L = \alpha\frac{\sqrt{1+h}}{\sqrt{1+h}-\sqrt{1-h}} \tag{21}$$

(см. формулу (3)), где коэффициент α был найден методом наименьших квадратов.

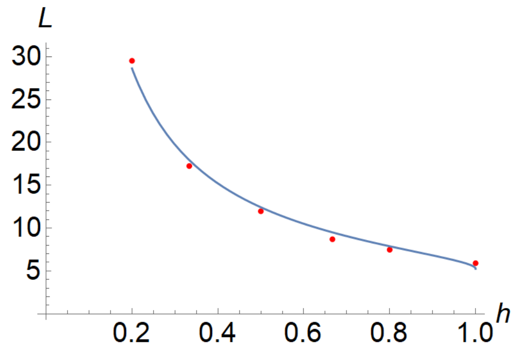

Рис. 13. Зависимость периода осцилляций L (в узлах), полученного при фитировании волновой функции куперовской пары по формуле (20), от обменного поля ферромагнетика h (красные точки) и ее приближение формулой (21) (синяя кривая).

Таким образом, результаты, описанные в данном разделе, согласуются с результатами из статьи [5] и качественно, и количественно. Найденная зависимость периода осцилляций от обменного поля ферромагнетика согласуется с физической природой этих осцилляций, которая связана с различием между квазиимпульсами электронов из двух спиновых подзон.

3.2. Критическая температура бислоя S/F

Результаты, представленые на рис. 14, были получены для бислоя с фиксированным размером сверхпроводящей области, равным 10 узлам. Для каждого из использован-

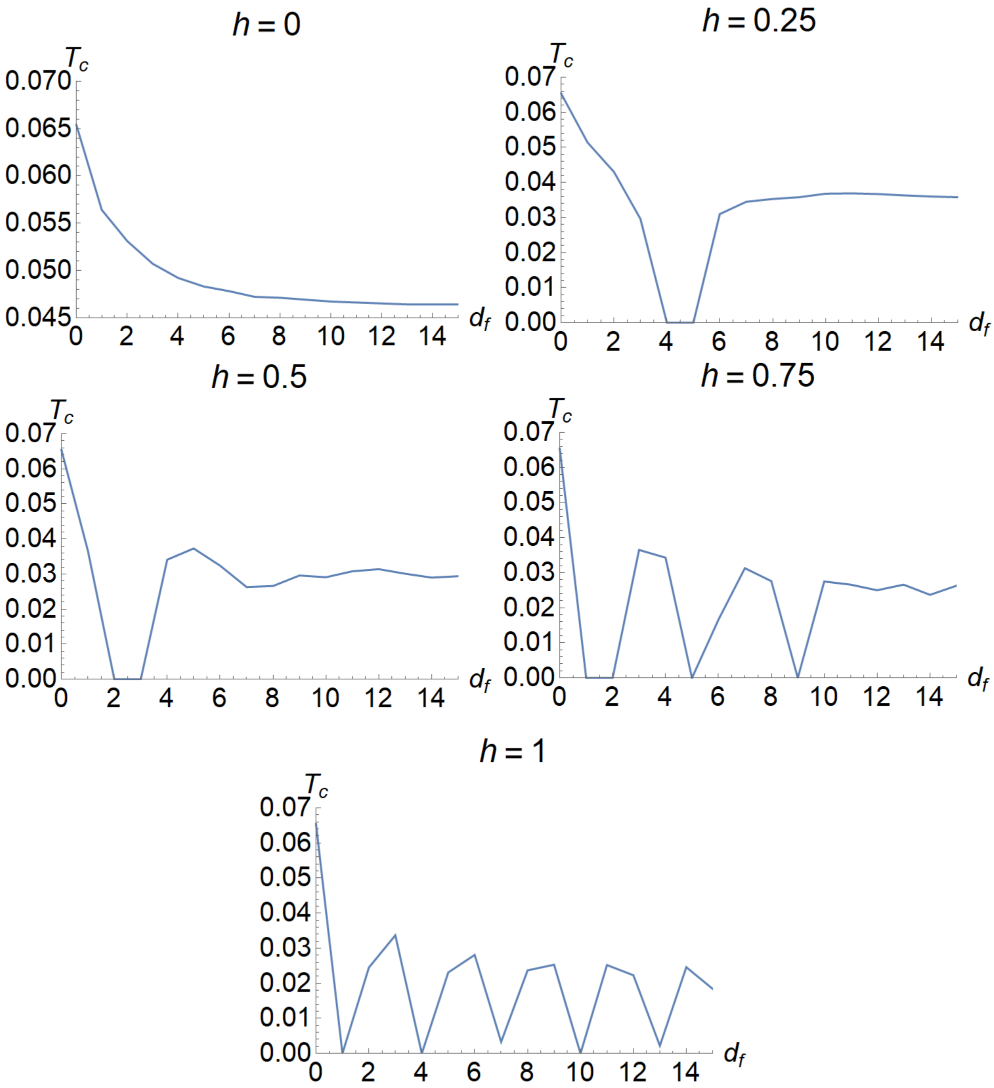

Рис. 14. Зависимость критической температуры бислоя S/F (в единицах t) с $d_s = 10$ узлов от количества узлов в ферромагнитном слое d_f при разных значениях обменного поля ферромагнетика h.

ных значений обменного поля критическая температура вычислялась при всех целочисленных значениях количества узлов в ферромагнитном слое d_f на отрезке [0, 15]. Для удобства восприятия графиков соседние полученные точки соединены между собой.

В случае нормального металла на месте ферромагнетика ($h = 0$) T_c экспоненциально убывает с увеличением толщины несверхпроводящей области, достигая некоторого постоянного значения. При положительном обменном поле наблюдалось однократное ($h = 0.25$, $h = 0.5$) или многократное ($h = 0.75$, $h = 1$) исчезновение сверхпроводящего перехода на некоторых интервалах значений d_f с последующим выходом критической температуры на константу ($h = 0.25$) либо ее немонотонным поведением ($h = 0.5$, $h = 0.75$). Данные типы зависимости $T_c(d_f)$ частично совпадают с экспериментальными и теоретическими результатами, представленными в работах [10,11] (рис. 9), [4] (рис. 3) и [6] (рис. 7). Уменьшение толщины ферромагнетика, соответствующей первому обращению критической температуры в ноль, с увеличением обменного поля согласуется с аналогичным эффектом, наблюдавшимся экспериментально [8].

3.3. Волновая функция куперовской пары в бислое S/AF

Волновая функция куперовской пары F_i вычислялась для системы, где антиферромагнетик занимает область $i \in [1, 50]$, а сверхпроводник – $i \in [51, 120]$, и нормировалась на значение F_S, соответствующее узлу 105. Для каждого значения обменного поля h химический потенциал антиферромагнетика μ_{AF} выбирался равным $h+0.8$, чтобы выйти за пределы не представляющей интерес с точки зрения изучения эффекта близости области энергий, где плотность состояний равна нулю.

В левой части рис. 15 представлены результаты расчетов для всего бислоя, в правой – отдельно для антиферромагнитной области. Правая часть рисунка позволяет заметить, что за пределами сверхпроводника волновая функция куперовских пар не просто затухает аналогично случаю S/N бислоя, но и испытывает осцилляции. Период данных осцилляций L был найден путем фурье-анализа функции F_i/F_S в антиферромагнетике. На рис. 16 изображена зависимость L от величины $\sqrt{\mu_{AF}^2 - h^2}$, фитированная формулой

$$L = \frac{\alpha}{\arcsin \dfrac{\sqrt{\mu_{AF}^2 - h^2}}{\beta}}, \tag{22}$$

где коэффициенты α и β находились методом наименьших квадратов. Мотивация рассмотрения связи периода осцилляций именно с такой функцией μ_{AF} и h будет пояснена в разделе 3.5.

3.4. Критическая температура бислоя S/AF

На рис. 17 представлены результаты расчетов критической температуры бислоя, аналогичных описанным в разделе 3.2, при замене типа магнитного упорядочения на антиферромагнитный. Как и при вычислении волновой функции куперовской пары для данного бислоя, химический потенциал антиферромагнетика при всех значениях h удовлетворял условию $\mu_{AF} = h + 0.8$. Самой существенной особенностью представленных графиков является наличие осцилляций критической температуры как функции толщины антиферромагнитного слоя. Такое поведение качественно согласуется с экспериментальными данными, полученными в работе [13]. Эти осцилляции являются результатом интерференции осциллирующей волновой функции куперовской пары, прошедшей из сверхпроводника и отраженной от непрозрачного края антиферромагнетика.

Рис. 18 позволяет сравнить поведение критической температуры в бислое S/AF при $h = 0.6$ и в бислое S/N ($h = 0$). Данные расчеты проводились при одинаковом значении химического потенциала антиферромагнетика и нормального металла, равном 1.4. Видно, что критическая температура S/N бислоя не проявляет выраженных осцилляций, в отличие от случая S/AF бислоя. Кроме того, антиферромагнетик подавляет сверхпроводимость сильнее, чем нормальный металл. Стоит отметить, что в

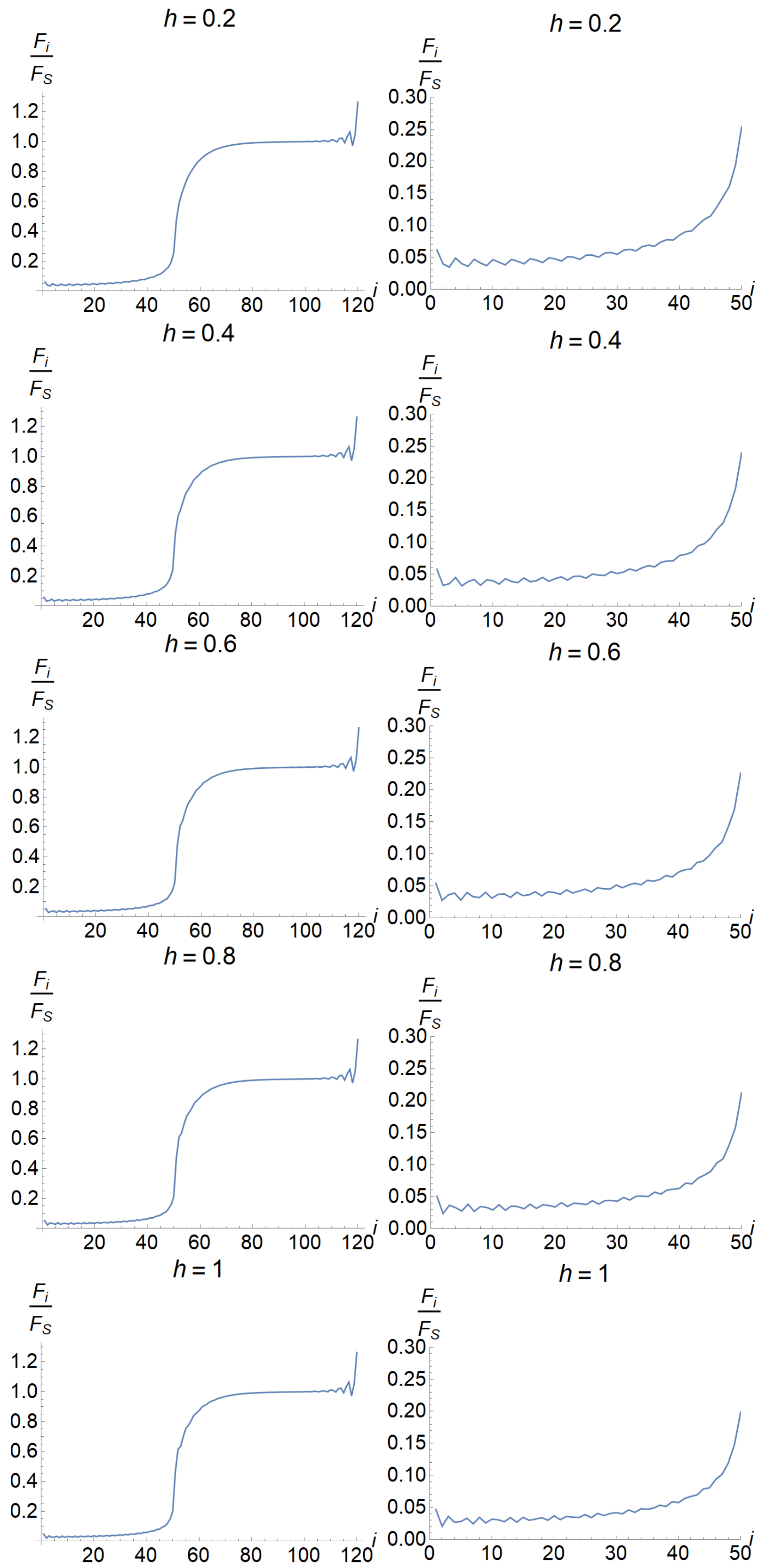

Рис. 15. Волновая функция куперовской пары F_i в бислое S/AF, нормированная на ее значение в объеме сверхпроводника F_S, при разных значениях обменного поля антиферромагнетика h. Антиферромагнетику соответствует область $i \in [1, 50]$, сверхпроводнику – $i \in [51, 120]$. Справа отдельно показано поведение F_i в антиферромагнитной части структуры.

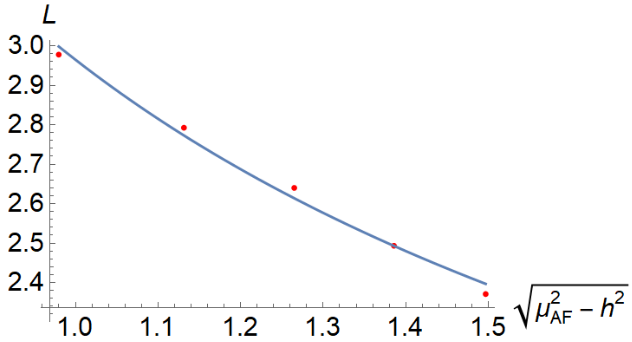

Рис. 16. Зависимость периода осцилляций волновой функции L (в узлах) от $\sqrt{\mu_{AF}^2 - h^2}$ (красные точки) и ее приближение по формуле (22) (синяя кривая).

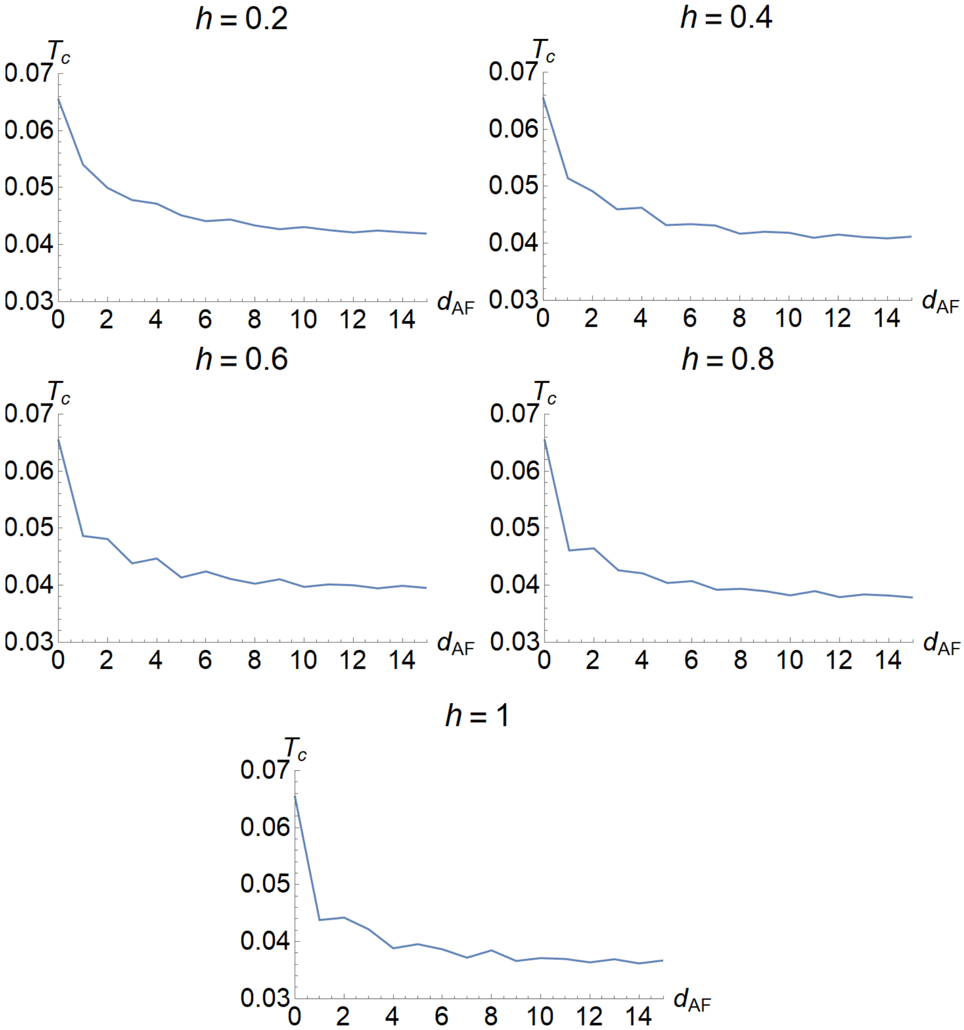

Рис. 17. Зависимость критической температуры бислоя S/AF (в единицах t) с d_s = 10 узлов от количества узлов в антиферромагнитном слое d_{AF} при разных значениях обменного поля антиферромагнетика h.

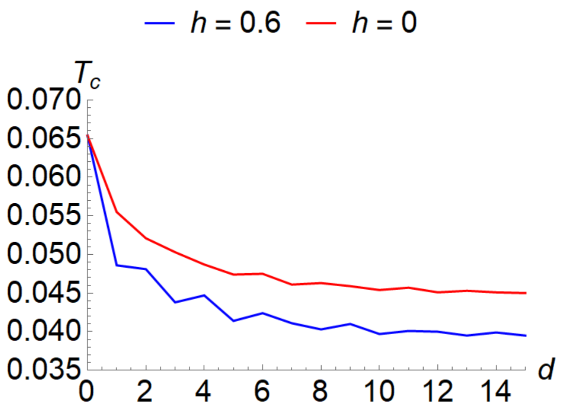

Рис. 18. Сравнение зависимости критической температуры бислоя S/AF при $h = 0.6$ и бислоя S/N от количества узлов в несверхпроводящем слое d при $d_s = 10$ узлов.

случае $h = 0$ критическая температура бислоя также испытывает небольшие осцилляции. При уменьшении длины интервала температур, при которой завершался процесс вычисления T_c, с 10^{-5} до 10^{-6}, данные осцилляции по-прежнему наблюдались. Поэтому можно сделать вывод, что они связаны с интерференцией волновых функций электронов, падающих на границы нормального металла и отраженных от них, а не являются ошибкой численных вычислений.

3.5. Физическое обоснование осцилляций критической температуры в бислое S/AF

Найдем закон дисперсии возбуждений в антиферромагнетике в отсутствие сверхпроводящего спаривания. Для этого удобнее изменить выбор подрешеток в рассматриваемой модели: теперь к подрешетке A или B будем относить узлы, намагниченность в которых обозначена стрелкой вверх или вниз соответственно на схеме слоя (рис. 19). Элементарные ячейки из двух узлов при этом по-прежнему выбираем так, что сверху находится узел типа A, а снизу – типа B. Перепишем первое из уравнений (12) для нового выбора

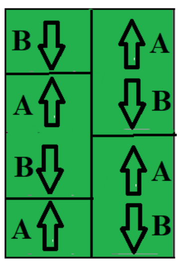

Рис. 19. Схема антиферромагнитного слоя с новым выбором подрешеток.

подрешеток в случае, когда $\Delta_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} = 0$ во всех ячейках:

$$-t \sum_{\langle \boldsymbol{i} \rangle} u_{n\sigma}^{\boldsymbol{j},B(A)} - \mu u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)} + \left(\vec{m}_{\boldsymbol{i}}^{A(B)} \vec{\sigma} \right)_{\sigma\alpha} u_{n\alpha}^{\boldsymbol{i},A(B)} = \varepsilon_n u_{n\sigma}^{\boldsymbol{i},A(B)}. \tag{23}$$

Посмотрим, как будет выглядеть это уравнение после применения к нему разложения в ряд Фурье по формуле (13). Слагаемое, содержащее сумму по ближайшим соседям, примет вид

$$-t\left(\left(u_{n\sigma}^{i-1,B(A)}+u_{n\sigma}^{i+1,B(A)}\right)e^{\pm ik_ya}+u_{n\sigma}^{i,B(A)}\left(1+e^{\pm 2ik_ya}\right)\right), \tag{24}$$

остальные слагаемые останутся такими же, как в первом из уравнений (14). Заметим, что теперь $(m_i)_z^{A(B)}=\pm h$. Тогда слагаемое, определяемое намагниченностью, можно переписать в виде $\left(\vec{m}_i^{A(B)}\vec{\sigma}\right)_{\sigma\alpha}u_{n\alpha}^{i,A(B)}=(m_i)_z^{A(B)}(\sigma_z)_{\sigma\alpha}u_{n\alpha}^{i,A(B)}=(m_i)_z^{A(B)}\sigma u_{n\sigma}^{i,A(B)}=\pm h\sigma u_{n\sigma}^{i,A(B)}$. Окончательно получаем следующее уравнение:

$$-t\left(\left(u_{n\sigma}^{i-1,B(A)}+u_{n\sigma}^{i+1,B(A)}\right)e^{\pm ik_ya}+u_{n\sigma}^{i,B(A)}\left(1+e^{\pm 2ik_ya}\right)\right)-\mu u_{n\sigma}^{i,A(B)}\pm h\sigma u_{n\sigma}^{i,A(B)}=\varepsilon_n u_{n\sigma}^{i,A(B)}, \tag{25}$$

или

$$-te^{\pm ik_ya}\left(u_{n\sigma}^{i-1,B(A)}+u_{n\sigma}^{i+1,B(A)}+2u_{n\sigma}^{i,B(A)}\cos k_ya\right)-\mu u_{n\sigma}^{i,A(B)}\pm h\sigma u_{n\sigma}^{i,A(B)}=\varepsilon_n u_{n\sigma}^{i,A(B)}. \tag{26}$$

Для простоты будем считать решетку квадратной. При разложении в ряд Фурье вдоль оси x решение (26) запишется в виде

$$\begin{pmatrix}u_{n\sigma}^{j,A}\\ u_{n\sigma}^{j,B}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A_1\\ A_2\end{pmatrix}e^{ik_xaj}, \tag{27}$$

где $A_{1,2}$ – не зависящие от координат амплитуды волновых функций квазичастиц. Тогда (26) перепишется в виде следующей системы:

$$\begin{pmatrix}-\mu+h\sigma & -2te^{ik_ya}\left(\cos k_xa+\cos k_ya\right)\\ -2te^{-ik_ya}\left(\cos k_xa+\cos k_ya\right) & -\mu-h\sigma\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_1\\ A_2\end{pmatrix}=\varepsilon_n\begin{pmatrix}A_1\\ A_2\end{pmatrix}. \tag{28}$$

Получаем следующее уравнение на спектр квазичастиц $\varepsilon(\vec{k})$:

$$\left(-\mu-\varepsilon(\vec{k})\right)^2-h^2-4t^2\left(\cos k_xa+\cos k_ya\right)^2=0, \tag{29}$$

откуда

$$\varepsilon(\vec{k})=-\mu\pm\sqrt{h^2+4t^2\left(\cos k_xa+\cos k_ya\right)^2}. \tag{30}$$

Тогда уравнение на поверхность Ферми $\varepsilon(\vec{k})=0$ принимает вид

$$-\mu\pm\sqrt{h^2+4t^2\left(\cos k_xa+\cos k_ya\right)^2}=0. \tag{31}$$

Теперь перейдем к объяснению качественной природы осцилляций критической температуры. Построим поверхность Ферми (31) в первой зоне Бриллюэна, которая имеет вид $k_x\in\left[-\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right], k_y\in\left[-\frac{\pi}{2a},\frac{\pi}{2a}\right]$, для $h=0.2,\mu=t=1$ (синяя сплошная кривая на рис. 20). Рассмотрим точку 3 на ферми-поверхности. Пусть она имеет ко-

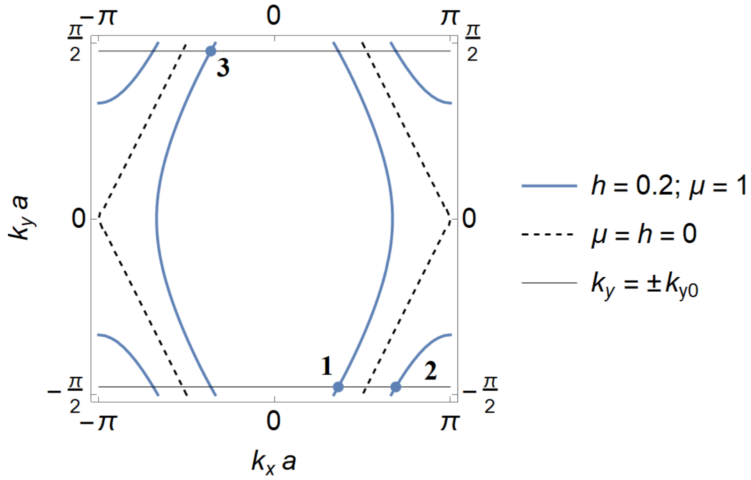

Рис. 20. Поверхности Ферми (31) в первой зоне Бриллюэна при $h = 0.2, \mu = t = 1$ (синяя сплошная кривая) и при $\mu = h = 0$ (черная пунктирная). Точками 1, 2, 3 обозначены некоторые решения (31) для $k_y = \pm k_{y0}$ при заданном k_{y0}.

ординаты $(k_{x0}a, k_{y0}a)$. Электрон, квазиимпульс которого соответствует данной точке, может образовать куперовскую пару с электроном, которому соответствует точка 1 с координатами $(-k_{x0}a, -k_{y0}a)$. Суммарный импульс электронов данной пары равен нулю. Но в результате процессов переброса возможны переходы между ветвями ферми-поверхности, т.е., в частности, электрон из точки 1 может перейти в точку 2 с координатами $(k_{x2}a, -k_{y0}a)$. Поэтому электрон в точке 3 может также образовать пару с электроном из точки 2, импульс которого отличается от импульса электрона в точке 1. Суммарный импульс электронов данной пары уже не равен нулю. Отсюда и возникают осцилляции волновой функции куперовских пар в антиферромагнетике.

Выполним качественную оценку периода этих осцилляций. Для удобства переобозначим $-k_{x0} \equiv k_{x1}$. Будем считать, что изменение x-компоненты квазиимпульса электрона является практически одинаковым для всех процессов переброса и приближенно равняется значению выражения $\Delta k = k_{x2} - k_{x1}$ для случая $k_{y0} = \dfrac{\pi}{2a}$. Координатная зависимость волновой функции куперовской пары двух электронов для случая совпадающих координат этих электронов грубо может быть представлена в виде $\Psi(x,x) \sim e^{i(k_{x2}-k_{x1})x}$. Тогда искомый период можно оценить как $L \approx 2\pi/\Delta k$. Если $k_{y0} = \dfrac{\pi}{2a}$, k_{x1} определяется как решение уравнения $\mu^2 = h^2 + 4t^2\cos^2 k_x a$, принадлежащее интервалу $\left[0, \dfrac{\pi}{2a}\right]$, откуда $k_{x1}a = \arccos\dfrac{\sqrt{\mu^2 - h^2}}{2t}$. По построению поверхности Ферми в первой зоне Бриллюэна $k_{x2}a = k_{x0}a + \pi = \pi - \arccos\dfrac{\sqrt{\mu^2 - h^2}}{2t}$, откуда

$$\Delta k a = 2\left(\frac{\pi}{2} - \arccos\frac{\sqrt{\mu^2 - h^2}}{2t}\right) = 2\arcsin\frac{\sqrt{\mu^2 - h^2}}{2t}. \qquad (32)$$

Тогда оценка периода осцилляций волновой функции куперовской пары принимает вид

$$L \approx \frac{\pi a}{\arcsin \dfrac{\sqrt{\mu^2 - h^2}}{2t}}, \tag{33}$$

что находится в согласии с результатами, представленными в разделе 3.3.

4. Заключение

Целью данной дипломной работы являлось построение теоретического описания эффекта близости в бислое S/AF, которое бы качественно воспроизводило экспериментально наблюдавшуюся в работе [13] зависимость критической температуры бислоя от толщины антиферромагнетика. Поставленная задача решалась численными методами при помощи уравнений Боголюбова – де Жена, полученных в дискретной модели для случая чистого сверхпроводника и чистого антиферромагнетика.

В первой части работы данный метод был использован для решения задачи об эффекте близости в более подробно изученных гетероструктурах S/F. Полученное описание поведения волновой функции куперовских пар в бислое качественно и количественно согласуется с результатами работы [5], в которой аналогичная задача была решена при помощи уравнений Боголюбова – де Жена в непрерывной модели. Результаты вычисления критической температуры воспроизводят наблюдавшуюся в эксперименте [7–11] осциллирующую зависимость от толщины ферромагнетика.

Далее была решена основная задача для бислоя S/AF. Расчеты для волновой функции куперовских пар предсказывают ее осциллирующее поведение в антиферромагнетике, что согласуется с физическими соображениями и качественно объясняет осцилляции критической температуры в эксперименте [13]. Количественное сравнение полученных результатов для критической температуры с экспериментальными данными не проводилось, поскольку использованная в данной работе модель предполагается слишком упрощенной и в силу этого непригодной для подобного анализа.

Список литературы

[1] Peter Fulde and Richard A. Ferrell. Superconductivity in a strong spin-exchange field. Phys. Rev. **135**, A550 (1964).

[2] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov. Nonuniform state of superconductors. Zh. Éksp. Teor. Fiz. **47**, 1136 (1964) [Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1964)].

[3] E. A. Demler, G. B. Arnold, and M. R. Beasley. Superconducting proximity effects in magnetic metals. Phys. Rev. B **55**, 15174 (1997).

[4] Ya. V. Fominov, N. M. Chtchelkatchev, and A. A. Golubov. Nonmonotonic critical temperature in superconductor/ferromagnet bilayers. Phys. Rev. B **66**, 014507 (2002).

[5] Klaus Halterman and Oriol T. Valls. Proximity effects at ferromagnet-superconductor interfaces. Phys. Rev. B **65**, 014509 (2001).

[6] B. P. Vodopyanov and L. R. Tagirov. Oscillations of superconducting transition temperature in strong ferromagnet–superconductor bilayers. Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. **78**, 1043 (2003) [JETP Lett. **78**, 555 (2003)].

[7] J. S. Jiang, D. Davidovic, Daniel H. Reich, and C. L. Chien. Oscillatory superconducting transition temperature in Nb/Gd multilayers. Phys. Rev. Lett. **74**, 314 (1995).

[8] L. V. Mercaldo, C. Attanasio, C. Coccorese, L. Maritato, S. L. Prischepa, and M. Salvato. Superconducting-critical-temperature oscillations in Nb/CuMn multilayers. Phys. Rev. B **53**, 14040 (1996).

[9] Th. Mühge, N. N. Garif'yanov, Yu. V. Goryunov, G. G. Khaliullin, L. R. Tagirov, K. Westerholt, I. A. Garifullin, and H. Zabel. Possible origin for oscillatory superconducting transition temperature in superconductor/ferromagnet multilayers. Phys. Rev. Lett. **77**, 1857 (1996).

[10] V. Zdravkov, A. Sidorenko, G. Obermeier, S. Gsell, M. Schreck, C. Müller, S. Horn, R. Tidecks, and L. R. Tagirov. Reentrant superconductivity in Nb/$Cu_{1-x}Ni_x$ bilayers. Phys. Rev. Lett. **97**, 057004 (2006).

[11] V. I. Zdravkov, J. Kehrle, G. Obermeier, S. Gsell, M. Schreck, C. Müller, H.-A. Krug von Nidda, J. Lindner, J. Moosburger-Will, E. Nold, R. Morari, V. V. Ryazanov, A. S. Sidorenko, S. Horn, R. Tidecks, and L. R. Tagirov. Reentrant superconductivity in superconductor/ferromagnetic-alloy bilayers. Phys. Rev. B **82**, 054517 (2010).

[12] V.N. Krivoruchko. Upper critical fields of the superconducting state of a superconductor-antiferromagnetic metal superlattice. Zh. Éksp. Teor. Fiz. **109**, 649 (1996) [JETP **82**, 347 (1996)].

[13] C. Bell, E. J. Tarte, G. Burnell, C. W. Leung, D.-J. Kang, and M. G. Blamire. Proximity and Josephson effects in superconductor/antiferromagnetic Nb/$\gamma - Fe_{50}Mn_{50}$ heterostructures. Phys. Rev. B **68**, 144517 (2003).

[14] P.G. de Gennes. Boundary effects in superconductors. Rev. Mod. Phys. **36**, 225 (1964).