

02,01,07

## Относительная фаза компонент параметра порядка в двухзонной модели $s_{\pm}$ -сверхпроводника с примесями

© В.А. Шестаков, М.М. Коршунов

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

E-mail: v\_shestakov@iph.krasn.ru

Поступила в Редакцию 18 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 18 апреля 2024 г.

Принята к публикации 8 мая 2024 г.

Получены решения уравнений Элиашберга в представлении Намбу для двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями. Рассмотрены два варианта перехода между состояниями  $s_{\pm}$  и  $s_{++}$  — когда смена знака параметра порядка в одной из зон происходит скачком, и когда смена знака происходит плавно. Для обоих вариантов исследовано влияние калибровки, определяемой соотношением коэффициентов при матрицах Паули  $\hat{\tau}_1$  и  $\hat{\tau}_2$  в разложении собственно-энергетической части, которые соответствуют компонентам параметра порядка. Показано, что для решений в чистом и в борновском пределах модуль параметра порядка сохраняется. В промежуточном случае, между борновским и унитарным пределами, результат зависит от решения для чистого предела. Установлено, что стандартная калибровка для уравнений Элиашберга, в которой одна из компонент параметра порядка тождественна равна нулю, необходима для корректного описания многозонных систем.

**Ключевые слова:** сверхпроводники на основе железа; уравнения Элиашберга.

DOI: 10.61011/FTT.2024.08.58585.51NN

### 1. Введение

Сверхпроводящее состояние, являющееся фундаментальным квантовым состоянием в конденсированных средах, на микроскопическом уровне впервые получило качественное объяснение в рамках теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [1]. Однако, успехи теории сверхпроводимости для количественного описания различных аспектов этого явления связаны с развитием методов квантовой теории поля [2] и формулировкой уравнений Элиашберга [3]. Теория Элиашберга позволяет рассматривать динамическое взаимодействие, что является шагом вперед по сравнению с теорией БКШ, где потенциал взаимодействия статичен. Долгое время для многих изучаемых систем оказывалось вполне применимым однозонное приближение. Характерным контрпримером являются соединения железа, пниктиды и халькогениды, в которых присутствует многолистная поверхность Ферми. В спин-флуктуационном механизме сверхпроводимости, обусловленном кулоновским отталкиванием, получаются решения, в которых на различных листах параметр порядка сверхпроводящего состояния принимает различные знаки. Если в пределах одного листа параметр порядка не меняет знак, то такое состояние называют  $s_{\pm}$  [4]. Если же знаки параметра порядка одинаковы на всех листах поверхности Ферми, то это — состояние  $s_{++}$ . Дополнительное усложнение возникает, если учитывать рассеяние на примесях. Из-за наличия нескольких зон это рассеяние можно разделить на внутри- и межзонное [5,6]. Описание состояний  $s_{\pm}$  и  $s_{++}$  требует наличия, как минимум, двух зон, что

и является основой минимальных моделей [7]. При этом, в рамках двухзонной модели было показано, что наличие примесей может приводить к переходу между состояниями  $s_{\pm}$  и  $s_{++}$  [8,9]. В зависимости от величины обобщенного сечения рассеяния  $\sigma$  этот переход может происходить скачком или плавно, через бесщелевое состояние, когда параметр порядка в одной из зон обращается в нуль перед тем, как сменить знак [14]. Такое бесщелевое состояние может проявляться, например, в изменении глубины проникновения магнитного поля с увеличением концентрации примесей или дефектов [10].

Стандартный подход при рассмотрении теории Элиашберга заключается в следующем. В представлении Намбу [11] матрица собственно-энергетической части, задающая уравнения Элиашберга, записывается в виде разложения по матрицам Паули  $\hat{\tau}_j$ , где  $j = 0, \dots, 3$  и индекс „0“ соответствует единичной матрице

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = & i\omega_n[1 - Z(\mathbf{k}, i\omega_n)]\hat{\tau}_0 + \chi(\mathbf{k}, i\omega_n)\hat{\tau}_3 \\ & + \phi_1(\mathbf{k}, i\omega_n)\hat{\tau}_1 + \phi_2(\mathbf{k}, i\omega_n)\hat{\tau}_2, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $i\omega_n = (2n + 1)\pi T$  — мацубаровские частоты,  $n$  — целое число; функции  $Z$ ,  $\chi$ ,  $\phi_1$  и  $\phi_2$  — произвольные действительные независимые функции, относительно которых разрешается система уравнений Элиашберга. Функции  $Z$  и  $\chi$ , соответственно, связаны с перенормировкой мацубаровских частот  $i\omega_n$  и одноэлектронных возбуждений квазичастиц за счет динамического спаривающего взаимодействия и эффектов, связанных с наличием примесей в системе. Функции  $\phi_1$  и  $\phi_2$  определяют параметр порядка сверхпроводника и сверхпроводящую

щель

$$\Delta_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \phi_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n)/Z(\mathbf{k}, i\omega_n). \quad (2)$$

Если  $\phi_1 = \phi_2 = 0$ , то система находится в нормальном (несверхпроводящем состоянии). Если либо  $\phi_1 \neq 0$ , либо  $\phi_2 \neq 0$  или же обе функции отличны от нуля одновременно, то такие решения соответствуют сверхпроводящему состоянию. Ненулевые решения для  $\phi_1$  и  $\phi_2$  обладают следующим свойством: для пары функций  $\phi_1$  и  $\phi_2$  существует бесконечное множество решений, отличающихся произвольным фазовым множителем  $\exp(i2\theta)$ . Каждая такая пара решений удовлетворяет соотношению  $\phi_1^2 + \phi_2^2 = \text{const}$  [11,12]. На практике выбирают такую калибровку, чтобы коэффициент при матрице  $\hat{\tau}_1$  (т.е.,  $\phi_1$ ) либо при  $\hat{\tau}_2$  (т.е.,  $\phi_2$ ) был равен нулю. Это сокращает количество уравнений в системе и упрощает расчеты. Такая калибровка справедлива для однозонных сверхпроводников, классических и необычных, а также многозонных сверхпроводников с электрон-фононным взаимодействием [11,12]. Однако далеко не очевидно, работает ли она в случае, когда в многозонной системе меняется структура сверхпроводящего параметра порядка, и при этом в одной из зон реализуется бесщелевое состояние.

В настоящей работе для двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями мы исследуем решения системы уравнений Элиашберга, в которой учитываются оба коэффициента при матрицах Паули в разложении собственно-энергетической части (1). Показано, что в борновском пределе, где параметр порядка при переходе  $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$  меняет знак скачком, решения обладают свойством, сохраняющим модуль параметра порядка,  $\phi_{1an}^2 + \phi_{2an}^2 = \text{const}$ . В случае промежуточной силы рассеяния, когда параметр порядка меняет знак плавно, результат зависит от калибровки исходного решения, полученного для чистого предела. Стандартная калибровка для уравнений Элиашберга, в которой одна из функций,  $\phi_{1an}$  или  $\phi_{2an}$ , равна нулю, не только допустима для снижения вычислительных затрат, но и необходима для устойчивости и сходимости решений.

## 2. Модель и метод

В настоящей работе мы используем подход  $\xi$ -интегрированных функций Грина в рамках двухзонной модели сверхпроводников на основе железа [7]. Функция Грина представляет собой матрицу в зонном пространстве и пространстве Намбу:

$$\hat{\mathbf{g}}(i\omega_n) = \hat{g}_\alpha(i\omega_n) \otimes \mathbf{1}_{\alpha\beta}, \quad (3)$$

где

$$\hat{g}_\alpha(i\omega_n) = -\pi N_\alpha (i\tilde{\omega}_{an}\hat{\tau}_0 + \phi_{1an}\hat{\tau}_1 + \phi_{2an}\hat{\tau}_2)/Q_{an}, \quad (4)$$

$Q_{an} = \sqrt{\tilde{\omega}_{an}^2 + \phi_{1an}^2 + \phi_{2an}^2}$ ,  $i\tilde{\omega}_{an} \equiv i\omega_n Z_\alpha(i\omega_n)$ ,  $\phi_{1(2)an} \equiv \phi_{1(2)}^\alpha(i\omega_n)$ ,  $N_\alpha$  — плотность состояний квазичастиц

на уровне Ферми в нормальном металле в зоне с индексом  $\alpha = (a, b)$ , а  $\mathbf{1}_{\alpha\beta}$  — единичная матрица в зонном пространстве.

Собственно-энергетическая часть в таком подходе также является матрицей той же размерности, что и функция Грина. Она также диагональна по зонным индексам (в общем случае это не так, однако в рамках рассматриваемой работы недиагональными вкладками можно пренебречь) и содержит два вклада — от сверхпроводящего взаимодействия и от рассеяния на немагнитных примесях

$$\hat{\Sigma}(i\omega_n) = \hat{\Sigma}^{\text{SC}}(i\omega_n) + \hat{\Sigma}^{\text{imp}}(i\omega_n). \quad (5)$$

Удобно разложение собственно-энергетической части по матрицам Паули, наравне с выражением (1), представить в следующем виде:

$$\hat{\Sigma}_\alpha^{\text{SC(imp)}}(i\omega_n) = \sum_{j=0}^2 \Sigma_{j\alpha}^{\text{SC(imp)}}(i\omega_n) \hat{\tau}_j. \quad (6)$$

Мы предполагаем, что вклад от сверхпроводящего взаимодействия обусловлен, в первую очередь, обменом спиновыми флуктуациями и имеет отталкивательный характер, но также может дополнительно содержать электрон-фононную часть, соответствующую притяжению. В собственно-энергетическую часть все эти вклады входят посредством функции взаимодействия  $\lambda_{\alpha\beta}^\phi(n - n')$  и  $\lambda_{\alpha\beta}^Z(n - n')$ :

$$\Sigma_{0\alpha}^{\text{SC}}(i\omega_n) = -i\pi T \sum_{\omega'_n, \beta} \lambda_{\alpha\beta}^Z(n - n') \tilde{\omega}_{\beta n'} / Q_{\beta n'}, \quad (7)$$

$$\Sigma_{1(2)\alpha}^{\text{SC}}(i\omega_n) = -\pi T \sum_{\omega'_n, \beta} \lambda_{\alpha\beta}^\phi(n - n') \phi_{1(2)\beta n'} / Q_{\beta n'}, \quad (8)$$

где

$$\lambda_{\alpha\beta}^{\phi,Z}(n - n') = 2\lambda_{\alpha\beta}^{\phi,Z} \int_0^\infty d\Omega \frac{\Omega B(\Omega)}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega^2}, \quad (9)$$

определяется через константы связи  $\lambda_{\alpha\beta}^{\phi,Z}$  и нормированную бозонную спектральную функцию  $B(\Omega)$ , описывающую спектр спиновых возбуждений в системе [7]. Величины  $\lambda_{\alpha\beta}^\phi$  могут быть как положительными (притяжение), так и отрицательными (отталкивание) из-за вкладов кулоновского отталкивания, спиновых флуктуаций и электрон-фононного взаимодействия, в то время как величины  $\lambda_{\alpha\beta}^Z$  всегда положительны. Для простоты обычно полагают  $\lambda_{\alpha\beta}^Z = |\lambda_{\alpha\beta}^\phi| \equiv |\lambda_{\alpha\beta}|$ .

Вклад от примесей учитываем в приближении  $T$ -матрицы [7,13,14], что приводит к следующим выражениям:

$$\Sigma_{0a}^{\text{imp}} = -i\Gamma_a [\sigma(1 - \eta^2)^2 \tilde{\omega}_{an} / Q_{an} + (1 - \sigma)(\eta^2 N_a \tilde{\omega}_{an} / (N_b Q_{an}) + \tilde{\omega}_{bn} / Q_{bn})] / (2D_{\text{imp}}), \quad (10)$$

$$\Sigma_{1(2)a}^{\text{imp}} = \Gamma_a [\sigma(1 - \eta^2)^2 \phi_{1(2)an} / Q_{an} + (1 - \sigma)(\eta^2 N_a \phi_{1(2)an} / (N_b Q_{an}) + \phi_{1(2)bn} / Q_{bn})] / (2D_{\text{imp}}), \quad (11)$$

где  $\Gamma_a$  — интенсивность рассеяния на примесях, пропорциональная концентрации примесей  $n_{\text{imp}}$  и эффективно-му сечению рассеяния  $\sigma$ :

$$\Gamma_a = 2n_{\text{imp}}\sigma / (\pi N_a), \quad (12)$$

$$\sigma = \pi^2 u^2 N_a N_b / (1 + \pi^2 u^2 N_a N_b), \quad (13)$$

величина  $\eta = v/u$  задает соотношение между внутризонной ( $v$ ) и межзонной ( $u$ ) компонентами рассеивающего потенциала примеси,

$$D_{\text{imp}} = (1 - \sigma)^2 + \sigma^2(1 - \eta^2)^2 + \sigma(1 - \sigma)\kappa_{\text{imp}}, \quad (14)$$

$$\kappa_{\text{imp}} = \eta^2(N_a^2 + N_b^2) / (N_a N_b) + 2(\tilde{\omega}_{an}\tilde{\omega}_{bn} + \phi_{1an}\phi_{1bn} + \phi_{2an}\phi_{2bn}) / (Q_{an}Q_{bn}). \quad (15)$$

Подставив выражения (7), (8), (10) и (11) в формулы (6) и (5) и приравняв получившуюся правую часть выражения (5) правой части разложения вида (1), мы получаем систему уравнений Элиашберга:

$$\tilde{\omega}_{an} = \omega_n + \pi T \sum_{\omega'_n, \beta} \lambda_{a\beta}^Z (n - n') \tilde{\omega}_{\beta n'} / Q_{\beta n'} + \Gamma_a [\sigma(1 - \eta^2)^2 \tilde{\omega}_{an} / Q_{an} + (1 - \sigma)(\eta^2 N_a \tilde{\omega}_{an} / (N_b Q_{an}) + \tilde{\omega}_{bn} / Q_{bn})] / (2D_{\text{imp}}), \quad (16)$$

$$\phi_{1a} = \pi T \sum_{\omega'_n, \beta} \lambda_{a\beta}^\phi (n - n') \phi_{1\beta n'} / Q_{\beta n'} + \Gamma_a [\sigma(1 - \eta^2)^2 \phi_{1an} / Q_{an} + (1 - \sigma)(\eta^2 N_a \phi_{1an} / (N_b Q_{an}) + \phi_{1bn} / Q_{bn})] / (2D_{\text{imp}}), \quad (17)$$

$$\phi_{2a} = \pi T \sum_{\omega'_n, \beta} \lambda_{a\beta}^\phi (n - n') \phi_{2\beta n'} / Q_{\beta n'} + \Gamma_a [\sigma(1 - \eta^2)^2 \phi_{2an} / Q_{an} + (1 - \sigma)(\eta^2 N_a \phi_{2an} / (N_b Q_{an}) + \phi_{2bn} / Q_{bn})] / (2D_{\text{imp}}). \quad (18)$$

Здесь мы привели половину набора уравнений Элиашберга для одной зоны  $a$ ; для зоны  $b$  уравнения получаются парной заменой зонных индексов в этих уравнениях.

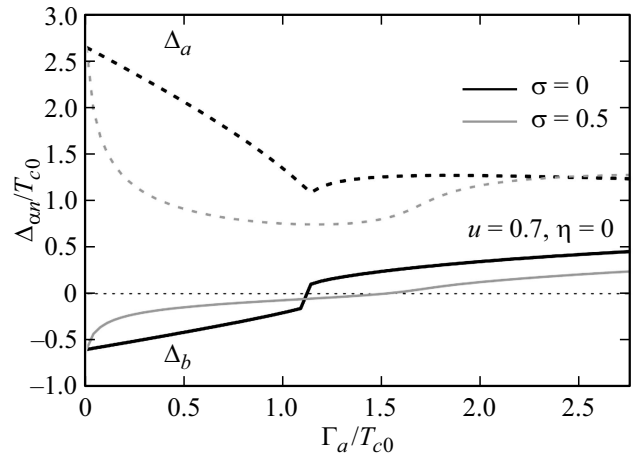
На первый взгляд, уравнения (17) и (18) идентичны и должны давать один и тот же набор решений. Однако оба уравнения содержат не только компоненты „1“ и „2“ параметра порядка для одной зоны, но величину параметра порядка для второй зоны через знаменатели  $Q_{an}$ . Учитывая, что при вызванном немагнитными примесями переходе между  $s_{\pm}$ - и  $s_{++}$ -состояниями параметр порядка в одной из зон меняя знак проходит через нуль, важно определить, какого вида калибровка применима для семейства решений такой системы уравнений Элиашберга.

### 3. Результаты и обсуждения

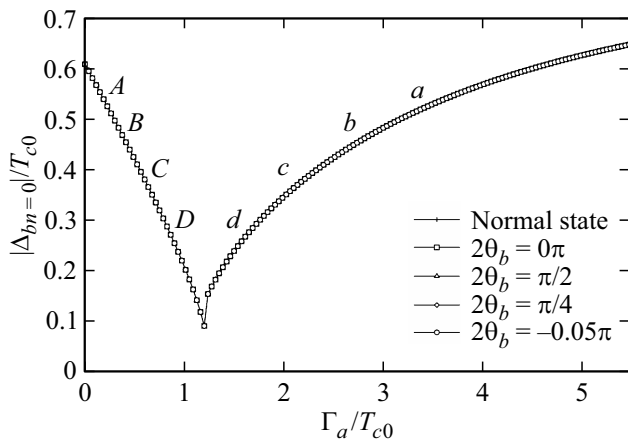
Для расчетов были приняты следующие значения констант связи  $(\lambda_{aa}, \lambda_{ab}, \lambda_{ba}, \lambda_{bb}) = (3.0, -0.2, -0.1, 0.5)$ , дающие в чистом пределе сверхпроводящее состояние с  $s_{\pm}$ -структурой параметра порядка и положительной усредненной по зонам константой связи

$$\langle \lambda \rangle = [N_a(\lambda_{aa} + \lambda_{ab}) + N_b(\lambda_{ba} + \lambda_{bb})] / (N_a + N_b).$$

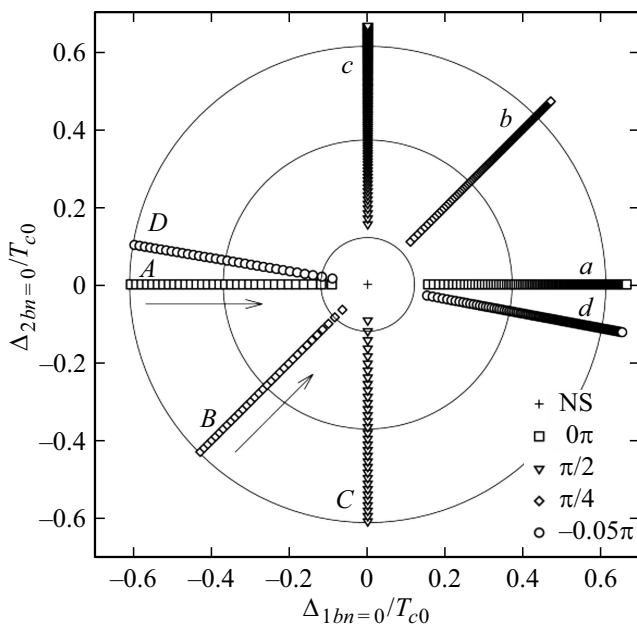
Критическая температура в чистом пределе составляет  $T_{c0} = 41.4$  К. Поскольку ранее было показано [14], что наличие внутризонной составляющей в рассеивающем потенциале примеси качественно не оказывает влияния на рассматриваемые эффекты, для упрощения расчетов мы положили, что рассеяние на примесях во внутризонном канале отсутствует,  $\eta = 0$ . Параметр  $\sigma$  может принимать значения от нуля в борновском пределе для слабо рассеивающей примеси ( $\pi u N_{a(b)} \ll 1$ ) до единицы в унитарном пределе сильного рассеивающего примесного потенциала ( $\pi u N_{a(b)} \gg 1$ ). Унитарный предел мы не рассматриваем, поскольку, как это можно показать из уравнений (16)–(18) [7], в унитарном пределе наличие немагнитных примесей не влияет на сверхпроводящее состояние. Для исследования были выбраны два случая: борновский предел  $\sigma = 0$  и промежуточный случай  $\sigma = 0.5$ , отличающиеся характером поведения перехода между  $s_{\pm}$ - и  $s_{++}$ -состояниями. В первом случае смена знака параметра порядка в одной из зон (в зоне  $b$ ) происходит скачком, во втором случае смена знака происходит плавно с прохождением через нуль. Поведение параметра порядка в обеих зонах в зависимости от интенсивности рассеяния на примесях  $\Gamma_a$  для случаев  $\sigma = 0.0$  и  $\sigma = 0.5$  приведено на рис. 1. Более детально влияние силы рассеивающего потенциала примеси, характеризуемой сечением  $\sigma$ , а также соотношения между внутри- и межзонными компонентами потенциала примеси  $\eta$  было исследовано в работе [14]. Там было показано, что сверхпроводящие щели меняются плавно



**Рис. 1.** График функции щели  $\Delta_{an}$  для первой мацубаровской частоты ( $n = 0$ ) в зависимости от интенсивности рассеяния на примесях  $\Gamma_a$  для  $\sigma = 0$  и  $\sigma = 0.5$  при  $\eta = 0$  и  $T = 0.03T_{c0}$ .



**Рис. 2.** Графики модуля функции щели  $\Delta_{bn}$  для первой мацубаровской частоты ( $n = 0$ ) в зависимости от интенсивности рассеяния на примесях  $\Gamma_a$ . Борновский предел,  $\sigma = 0$ . В подписи значение фазы для каждого графика соответствует фазе решения в чистом пределе ( $\Gamma_a = 0$ ). Прописными буквами обозначаются ветви графиков до перехода ( $s_{\pm}$ -состояние), а строчными — после перехода ( $s_{++}$ -состояние). Исключая случай нормального состояния, все линии графиков идеально накладываются друг на друга.



**Рис. 3.** Значения функции щели  $\Delta_{bn}$  для первой мацубаровской частоты ( $n = 0$ ), построенные на комплексной плоскости  $\Delta_{1b0}$ ,  $\Delta_{2b0}$ . Борновский предел. Концентрические окружности показывают, что для каждого фиксированного значения семейство решений для сверхпроводящей щели лежит на окружности  $\Delta_{1b0}^2 + \Delta_{2b0}^2 = \text{const}$ . Внешняя окружность соответствует решениям для чистого сверхпроводника. В подписи значение фазы для каждого графика соответствует фазе решения в чистом пределе ( $\Gamma_a = 0$ ). Прописными буквами обозначаются ветви графиков до перехода ( $s_{\pm}$ -состояние), а строчными — после перехода ( $s_{++}$ -состояние). Стрелки указывают направление увеличения  $\Gamma_a$ .

вблизи перехода  $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$  для всех величин  $\sigma$  и  $\eta$ , за исключением случая слабого рассеяния с малой величиной  $\sigma$ , когда меньшая щель меняется скачком в точке перехода, и далее, с ростом  $\Gamma$ , меняется плавно. Скачок сглаживается вблизи значений  $\sigma = 0.11$  и переход становится плавным. При этом, с ростом температуры поведение меньшей щели меняется от скачкообразного к плавному при  $T \sim 0.1T_c$ . Именно поэтому критическая температура  $T_c$  не имеет никаких особенностей, связанных со ступенчатым характером перехода при малых  $\sigma$ , оставаясь гладкой функцией интенсивности рассеяния на примесях  $\Gamma_a$ .

Для дальнейшего анализа мы можем представить пару функций  $\phi_{1an}$  и  $\phi_{2an}$  как действительную и мнимую часть комплексной функции  $\phi_{an} = \phi_{1an} + i\phi_{2an}$ , которую запишем в следующем виде:

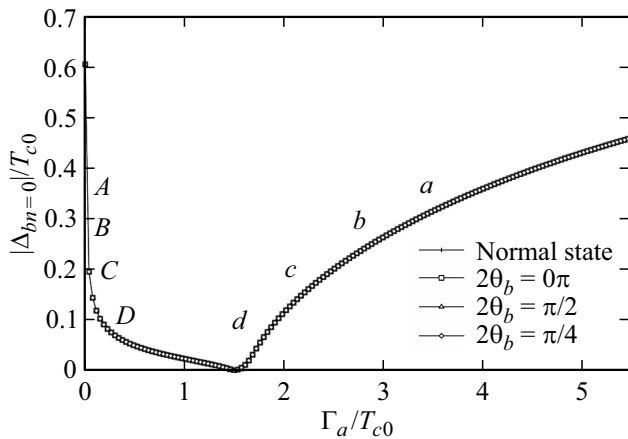
$$\phi_{an} = |\phi_{an}| \exp(i2\theta_a) \equiv |\phi_{an}| [\cos(2\theta_a) + i \sin(2\theta_a)], \tag{19}$$

где  $|\phi_{an}| = \sqrt{\phi_{1an}^2 + \phi_{2an}^2}$  — это модуль, а  $2\theta_a$  — фаза сверхпроводящего параметра порядка в зоне  $a$ .

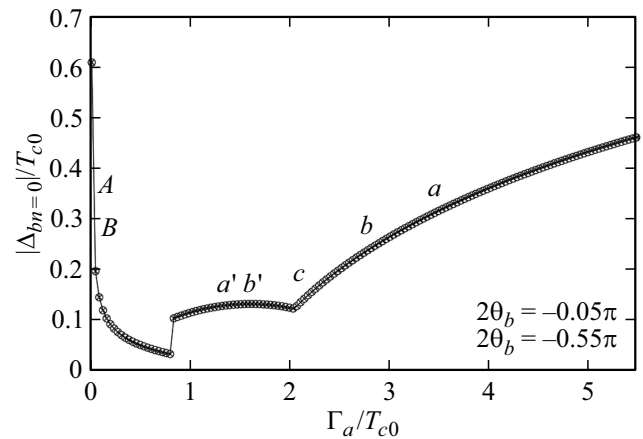
При получении решений системы уравнений Элиашберга (16)–(18) для сверхпроводника с примесями, на каждом шаге по  $\Gamma_a$  в качестве затравочных значений перенормированных мацубаровских частот и параметра порядка принимались результаты с предыдущего шага, начиная с чистого предела. Таким образом, мы можем получить решение для сверхпроводящей фазы без примесей с фиксированной фазой и модулем параметра порядка, и проследить эволюцию системы с последовательным внесением примесей. Значение температуры для расчетов было принято равным  $T = 0.01T_{c0}$ .

Для борновского предела результаты расчетов представлены на рис. 2 и 3, где построены, соответственно, модуль комплексной функции сверхпроводящей щели для первой мацубаровской частоты ( $n = 0$ ) в зависимости от интенсивности рассеяния на примесях  $|\Delta_{b0}(\Gamma_a)|$  и сама функция  $\Delta_{b0}(\Gamma_a)$  на комплексной плоскости в координатах  $(\Delta_{1b0}, \Delta_{2b0})$ . Комплексная функция щели связана с функцией параметра порядка соотношением (2). Из этих рисунков видно, что для всех представленных семейств решений уравнений Элиашберга модуль функции щели остается неизменным для фиксированного значения  $\Gamma_a$ , а его фаза меняется только в момент перехода  $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$  на фиксированное значение, равное  $\pi$ . Тот факт, что  $|\Delta_{b0}(\Gamma_a)|$  не достигает нуля в точке перехода (рис. 2), говорит об изменении щели скачком.

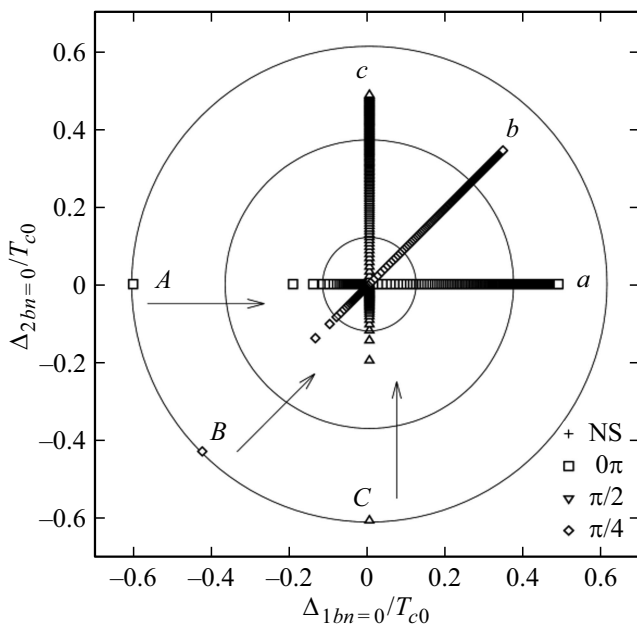
В промежуточном случае,  $\sigma = 0.5$  (рис. 4, 5, 6 и 7) картина несколько отличается. Для решений, в которых фаза в чистом пределе составляет  $2\theta_b = m\pi/4$ , где  $m$  — целое число, решения ведут себя так же, как и в борновском пределе. Разница лишь в том, что рассматриваемый переход происходит плавно и модуль функции щели достигает нулевого значения (рис. 4); и только при  $|\Delta_{b0}| = 0$  происходит смена фазы на величину  $\pi$  (рис. 5). Однако, как только мы отклоняемся от этих симметричных направлений на плоскости  $(\Delta_{1b0}, \Delta_{2b0})$



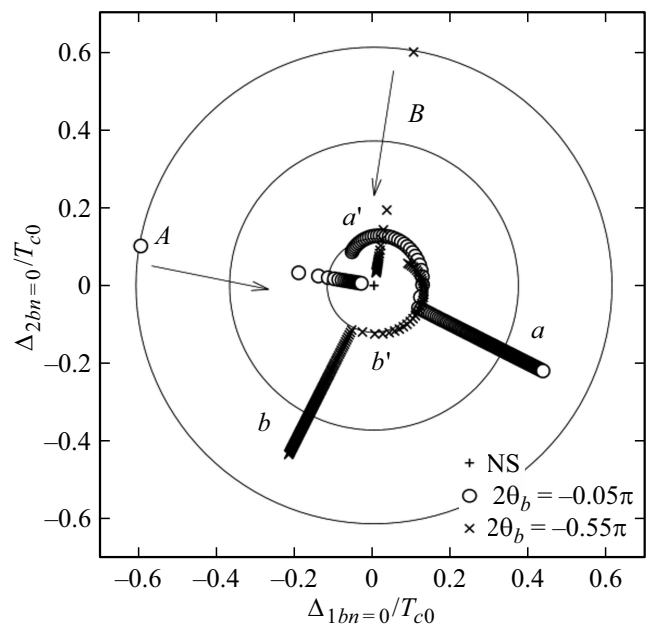
**Рис. 4.** Графики модуля функции щели  $\Delta_{bn}$  для первой мацубаровской частоты ( $n = 0$ ) в зависимости от интенсивности рассеяния на примесях  $\Gamma_a$ . Промежуточный случай,  $\sigma = 0.5$ . Представлены решения, в которых фаза в чистом пределе соответствует условию  $2\theta_b = m\pi/4$ . В подписи значение фазы для каждого графика соответствует фазе решения в чистом пределе ( $\Gamma_a = 0$ ). Прописными буквами обозначаются ветви графиков до перехода ( $s_{\pm}$ -состояние), а строчными — после перехода ( $s_{++}$ -состояние). Исключая случай нормального состояния, все линии графиков идеально накладываются друг на друга.



**Рис. 6.** Графики модуля функции щели  $\Delta_{bn}$  для первой мацубаровской частоты ( $n = 0$ ) в зависимости от интенсивности рассеяния на примесях  $\Gamma_a$ . Промежуточный случай,  $\sigma = 0.5$ . Представлены решения, в которых фаза в чистом пределе не удовлетворяет условию  $2\theta_b = m\pi/4$ . В подписи значение фазы для каждого графика соответствует фазе решения в чистом пределе ( $\Gamma_a = 0$ ). Прописными буквами обозначаются ветви графиков до перехода ( $s_{\pm}$ -состояние), а строчными — после перехода ( $s_{++}$ -состояние).



**Рис. 5.** Значения функции щели  $\Delta_{bn}(\Gamma_a)$  для первой мацубаровской частоты ( $n = 0$ ), построенные на комплексной плоскости ( $\Delta_{1b0}, \Delta_{2b0}$ ) в направлениях  $0, \pi/4$  и  $\pi/2$ . Промежуточный случай,  $\sigma = 0.5$ . Подобно рис. 3, внешняя окружность соответствует решениям для чистого сверхпроводника. Прописными буквами обозначаются ветви графиков до перехода ( $s_{\pm}$ -состояние), а строчными — после перехода ( $s_{++}$ -состояние). Стрелки указывают направление увеличения  $\Gamma_a$ .



**Рис. 7.** Значения функции щели  $\Delta_{bn}(\Gamma_a)$  для первой мацубаровской частоты  $n = 0$ , построенные на комплексной плоскости ( $\Delta_{1b0}, \Delta_{2b0}$ ) в направлениях, отличных от  $\pi m/4$ , где  $m$  — целое число. Промежуточный случай,  $\sigma = 0.5$ . Подобно рис. 3, внешняя окружность соответствует решениям для чистого сверхпроводника. Прописными буквами обозначаются ветви графиков до перехода ( $s_{\pm}$ -состояние), а строчными — после перехода ( $s_{++}$ -состояние), строчными буквами со штрихом обозначаются области плохой сходимости решений уравнений Элиашберга. Стрелки указывают направление увеличения  $\Gamma_a$ .

даже на малый угол, вблизи перехода  $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$  возникает область плохой сходимости системы уравнений. Это видно на рис. 6 и 7 для случаев с фазой параметра порядка чистого сверхпроводника  $2\theta_b = -0.05\pi$  и  $2\theta_b = -0.55\pi$  на участке между значениями  $\Gamma_a = 0.8T_{c0}$  и  $\Gamma_a = 2.1T_{c0}$ , где значение  $|\Delta_{b0}|$  отличается от случаев с симметричными направлениями. Значения модуля  $\Delta_{b0}$  для данных несимметричных направлений построены на рис. 6 для наглядности, поскольку процедура численного решения системы уравнений выходила на бесконечный цикл и останавливалась по лимиту итераций, оставляя не выполненным условие по невязке решения. Тем не менее, стоит отметить, что в каждом таком случае значение модуля функции щели для фиксированного значения  $\Gamma_a$  остается неизменным. Что касается фазы такого решения, то, как видно из рис. 7, в данной области плохой сходимости она не стабильна: решение „блуждает“ по комплексной плоскости  $(\Delta_{1b0}, \Delta_{2b0})$  до тех пор, пока не выйдет на новое устойчивое семейство решений. Разность фаз параметра порядка для разных зон при этом остается фиксированной:  $|2\theta_a - 2\theta_b| = \pi$  в  $s_{\pm}$ -состоянии и  $|2\theta_a - 2\theta_b| = 0$  в  $s_{++}$ -состоянии.

Такое поведение решений в случае  $\sigma = 0.5$  вне симметричных направлений связано с тем, что при значениях  $|\Delta_{b0}|$  близких к нулю, фаза функции щели (параметра порядка) в зоне  $b$  оказывается неопределена, и система уравнений Элиашберга не может сойтись к устойчивому решению. В борновском пределе любое направление на плоскости  $(\Delta_{1b0}, \Delta_{2b0})$  дает устойчивое решение, поскольку для значений  $\sigma$ , близких к нулю, переход  $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$  происходит скачком и функция  $\Delta_{b0}$  не успевает достигнуть таких значений, при которых ее фаза оказывается неопределена. В случае симметричных направлений  $2\theta_b = 0 \pm \pi t$  и  $2\theta_b = \pi/2 \pm \pi t$  функция щели — действительная (уравнения разрешаются только относительно либо действительной, либо мнимой части  $\Delta_{bn}$ ), и ее фаза, фактически, определена для любого значения  $\Gamma_a$ . Картина похожа и в случае направления  $2\theta_b = \pi/4 \pm \pi t$ , где уравнения (17) и (18) совпадают с точностью до знака и их решения также оказываются устойчивы.

#### 4. Заключение

В настоящей работе мы численно исследовали решения уравнений Элиашберга в представлении Намбу для двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями. Мы рассмотрели, как будут вести себя решения при наличии перехода между  $s_{\pm}$ - и  $s_{++}$ -состояниями, если в исходной системе оставить ненулевыми коэффициенты при матрицах Паули  $\hat{\tau}_1$  и  $\hat{\tau}_2$  в разложении собственно-энергетической части. У решений для чистого сверхпроводника модуль параметра порядка сохраняется, т. е. семейство решений удовлетворяет условию  $\phi_{1an}^2 + \phi_{2an}^2 = \text{const}$ . Это также справедливо и при внесении немагнитных примесей в систему в борновском пределе  $\sigma = 0$ , где параметр

порядка при переходе меняет знак скачком. Вдали от борновского предела ( $\sigma = 0.5$ , где параметр порядка меняется плавно) при последовательном введении примесей в систему результат зависит от решения, полученного для чистого предела. Так, если для сверхпроводника без примесей решения уравнений Элиашберга удовлетворяют калибровкам  $\phi_{1an} \neq 0$  и  $\phi_{2an} = 0$ ,  $\phi_{1an} = 0$  и  $\phi_{2an} \neq 0$  или  $\phi_{1an} = \phi_{2an} \neq 0$ , то модуль параметра порядка также остается неизменным на каждом шаге по  $\Gamma_a$ . Для всех других семейств решений в чистом пределе при внесении примесей в систему появляется область плохой сходимости решений уравнений, и мы не можем с уверенностью судить о том, как ведет себя параметр порядка в таких случаях. На основе всего сказанного, мы можем сделать вывод, что стандартная калибровка для уравнений Элиашберга, в которой одна из функций  $\phi_{1an}$  или  $\phi_{2an}$  тождественно равна нулю, в случае сверхпроводника, испытывающего переход со сменой знака параметра порядка, не только допустима для снижения вычислительных затрат, но и необходима для устойчивости и сходимости решений.

#### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer. Phys. Rev. **108**, 8, 1175 (1957).
- [2] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Добросвет, М. (1998). 514 с.
- [3] Г.М. Элиашберг. ЖЭТФ **38**, 3, 966 (1960).
- [4] P.J. Hirschfeld, M.M. Korshunov, I.I. Mazin. Rep. Prog. Phys. **74**, 12, 124508 (2011).
- [5] Y. Ohashi. J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 8, 1978 (2002).
- [6] Y. Ohashi. Physica C **412–414**, 41 (2004).
- [7] М.М. Коршунов, Ю.Н. Тогушова, О.В. Долгов. УФН **186**, 12, 1315 (2016).
- [8] D.V. Efremov, M.M. Korshunov, O.V. Dolgov, A.A. Golubov, P.J. Hirschfeld. Phys. Rev. B **84**, 18, 180512 (2011).
- [9] M.M. Korshunov, D.V. Efremov, A.A. Golubov, O.V. Dolgov. Phys. Rev. B **90**, 13, 134517 (2014).
- [10] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, Yu.N. Togushova, O.V. Dolgov. Supercond. Sci. Technol. **34**, 075008 (2021).
- [11] Y. Nambu. Phys. Rev. **117**, 3, 648 (1960).
- [12] P. Allen, B. Mitrovic. Solid State Phys. **37**, 1 (1982).
- [13] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, O.V. Dolgov. Symmetry **10**, 323 (2018).
- [14] V.A. Shestakov, M.M. Korshunov, Yu.N. Togushova, D.V. Efremov, O.V. Dolgov. Supercond. Sci. Technol. **31**, 3, 034001 (2018).

Редактор Ю.Э. Кутаев