

多带超导体中的自发磁场和奇频配对态

张艳艳 陈家麟 查国桥 周世平

Spontaneous magnetic field and odd-frequency pairing state in multiband superconductors

Zhang Yan-Yan Chen Jia-Lin Zha Guo-Qiao Zhou Shi-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 167401 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190445

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190445>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

两带超导体LaNiC₂上临界磁场的理论分析

Theoretical analysis of the upper critical field of two-band superconductor LaNiC₂

物理学报. 2016, 65(3): 037401 <https://doi.org/10.7498/aps.65.037401>

新型4d/5d基超导体的结构和物性

Crystal structures and physical properties of novel 4d/5d based superconductors

物理学报. 2018, 67(12): 127101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180767>

铁基超导体的扫描隧道显微镜研究进展

Studies of scanning tunneling spectroscopy on iron-based superconductors

物理学报. 2018, 67(20): 207401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181818>

利用单轴压强下的电阻变化研究铁基超导体中的向列涨落

Nematic fluctuations in iron-based superconductors studied by resistivity change under uniaxial pressure

物理学报. 2018, 67(12): 127401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180627>

磁场中的拓扑绝缘体边缘态性质

Edge mode of InAs/GaSb quantum spin hall insulator in magnetic field

物理学报. 2015, 64(9): 097302 <https://doi.org/10.7498/aps.64.097302>

压力下碱金属铁硒基超导体中的现象与物理

Phenomena and findings in pressurized alkaline iron selenide superconductors

物理学报. 2015, 64(21): 217406 <https://doi.org/10.7498/aps.64.217406>

多带超导体中的自发磁场和奇频配对态*

张艳艳 陈家麟 查国桥 周世平†

(上海大学物理系, 上海市高温超导重点实验室, 上海 200444)

(2019年3月29日收到; 2019年6月19日收到修改稿)

基于金兹堡-朗道模型, 本文研究了双带超导体硼化镁中的奇频配对态, 并证明了带间耦合可以诱导“半-涡旋”结构以及四度旋转对称与二度旋转对称的涡旋格子相变. 零外场条件下, 带间耦合可以诱导出新物质态和奇特的自发畴结构; 具体表现为, 环绕着畴壁, 该自发磁场的极性螺旋进动, 对应着局域旋转对称自发破缺, 从而允许存在时间反演破缺束缚态. 与此同时, 磁性畴壁散射引起的自旋相反的电子的费米波矢失配则允许自旋单态与自旋三重态的共存, 而一个偶宇称的三重态必将是频域奇称的配对态. 文中给出了双带硼化镁超导体普适的相图.

关键词: 金兹堡-朗道模型, 自发磁场, 奇频配对态

PACS: 74.25.Ha, 74.20.De, 74.20.Rp

DOI: 10.7498/aps.68.20190445

1 引言

大约在 45 年前, 前苏联科学家 Berezinskii [1] 猜测奇频 s-波配对态作为一个基态可存在于液氦超流中. 随着钙钛矿铜氧化物超导电性的发现, 人们也曾尝试探讨这类超导体中的奇频配对态 [2-4]. 如 Pauli 不相容原理所要求, 在同一时刻置换一对电子的坐标和自旋时, 电子对关联波函数振幅将要改变符号. 一个频域为偶对称的自旋单态 s-波/d-波、或者一个自旋三重态 p 波对关联函数就遵守该准则. 基于这一基本对称性的考虑, 人们建议在一个自旋旋转或者是平移对称破缺的非均匀超导系统中, 可望存在奇频自旋三重态 s 波 [5], 或奇频自旋单态 p 波 [6]. 事实上, 有迹象表明, 频域奇称配对态极有可能是在半金属 [7,8] 和基于钛/锆 [9,10] 的超导异质结中承载着长程超流的态. 尽管如此, 无须引入对称破缺场或者是磁性拓扑缺陷的前提

下, 在一个均匀的超导系统中仍未见存在奇频 s 波配对态的证据. 然而, Annica 等 [11] 的工作 却为寻找奇频配对态带来一丝曙光, 他们建议源于铁基超导序参量奇-偶宇称的轨道耦合可望为奇频配对态提供一条有效路径. 其实, 如此的相互作用在多带超导体如铁基超导体 [12] 和重费米子超导体 [13] 中普遍存在着; 而奇-偶宇称的带间/轨道间的耦合对基态对关联函数的对称性注入了一个约束机制, 允许在不违反 Pauli 不相容原理的前提下, 实现自旋单态与三重态的转换; 进而可以引发偶频-奇频配对态间的转换.

系统的哈密顿量对称性的自发破缺往往能诱导出新的元激发. 例如, 整数量子 Hall 态 [14] 与分数量子 Hall 态 [15] 以及基于能带反转的强自旋-轨道耦合作用所导致的自旋量子 Hall 效应 [16,17] 等都是对称破缺诱导的新物质态强有力的佐证. 多带超导中, 不同对称性的对态带间耦合为非平庸的电子对态和奇异涡旋束缚态提供一种机制. 仅以相对简

* 国家自然科学基金 (批准号: 61571277, 61771298) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: spzhou@shu.edu.cn

单的双带硼化镁超导体为例, 基于一个双带的 GL 自由能泛函, Babaev 和 Speight [18] 提出可能存在任意分数量子磁通, 以及由 Meissner 畴和涡旋团簇所组合成的 “semi-Meissner” 态的建议. Moshchalkov 等 [19] 和 Nishio 等 [20] 报道了外磁场中硼化镁单晶超导中 “条纹与蛛网状” 共存的磁通涡旋结构实验观测现象, 并建议在涡旋间相互作用为长程相吸引、短程相排斥相互竞争框架下理解之, 提出了所谓 “Type-1.5” 超导体的观点. 然而, 也有一些学者对第 “1.5 类” 超导体和分数量子磁通的观点提出了质疑. 例如, 文献 [21–23] 指出, 由于两个带的对关联函数必须耦合在同一个规范场中, 因而那种在传统 Ginzburg-Landau (GL) 模型框架中两个孤立的特征长度的假定是非本质的. 此外, 在 SU(2) 模型框架下, Šimánek [24] 给出了双带超导体中由超导环流所屏蔽的一个单涡旋的磁通量依然是量子化 ($h/2e$) 的结论. 由此可见, 仅从澄清双带超导体中 “semi-Meissner” 态是否为热力学意义上的基态及其物理本质角度, 更为深入的研究显得十分必要.

本文通过求解描述硼化镁超导体的金兹堡-朗道模型, 证明了 π 带与 σ 带间耦合确实提供了一个内在的对称破缺机制; 特别是, 适当的梯度耦合强度下, 可以诱导出一种新的畴结构; 其中对应两个带的对势函数相位差在畴内部为一个恒定值, 穿越畴壁却显示出剧烈变化, 并由此诱导出自发磁偶极子. 与 σ 带的六角对称结构不同, 绕晶面对称轴每转动 90° 该局域自发磁偶极子极性翻转一次, 具有二度旋转对称结构. 与此旋转对称自发破缺相对应的, 允许存在时间反演破缺束缚态 $\psi_\sigma \pm i\psi_\pi$; 与此同时, 自发磁性畴壁散射引起的自旋相反的电子的费米波矢失配则允许自旋单态与自旋三重态的共存; 而一个偶宇称的三重态必将是频域奇称的配对态.

2 模型

(1) 式为一个表述双带超导的 GL 自由能泛函一般形式,

$$\begin{aligned}
 & F(\Delta_1, \Delta_2, \mathbf{A}) \\
 &= \int d\Omega \left\{ \sum \left(\alpha_i |\Delta_i|^2 + \frac{1}{2} \beta_i |\Delta_i|^4 + \epsilon_i |\Pi \Delta_i^*|^2 \right) \right. \\
 &\quad + \gamma_1 (\Delta_1 \Delta_2^* + \Delta_2 \Delta_1^*) + \gamma_2 (\Delta_2^{*2} \Delta_2^2 + \text{H.c.}) \\
 &\quad + \gamma_3 (\Pi_x^* \Delta_1 \Pi_x \Delta_2^* - \Pi_y^* \Delta_1 \Pi_y \Delta_2^* + \text{H.c.}) \\
 &\quad \left. + (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right\}, \tag{1}
 \end{aligned}$$

其中下标 $i = 1, 2$ 以区别两个凝聚带的指标; 符号 Δ_1, Δ_2 和 \mathbf{A} 为对势函数和矢势函数. $\alpha_i = -N_i V_i \ln(T/T_i)$, $\beta_i = 7\zeta(3)N_i/8(\pi T_i)^2$, $\epsilon_i = \nu_{Fi}^2 \beta_i$; ν_{Fi} , N_i 和 V_i 分别表示对应带费米面电子的平均速度、态密度和吸引势强度. 定义转变温度为 $N_i V_i \ln(2e^\gamma \omega_i / \pi T_i) = 1$, 其中 ω_i 为 Debye 频率, γ 表示 Euler 常数. 动量算符记为 $\Pi = i\kappa^{-1} \nabla + \mathbf{A}$, κ 为等效 GL 参数. 符号 γ_1, γ_2 和 γ_3 分别表示带间 Josephson 耦合、二阶耦合和梯度耦合强度.

模型的参数值取决于具体材料费米面处的电子结构. 对硼化镁化合物, Mg^+ 离子提供了导带中的载流子, 扮演着电荷库的角色, 其轨道运动对电输运贡献度却不大; 而正六面顶角的硼轨道电子主导了材料的电行为. 类似于苯环中碳原子 sp^2 轨道键合, 一个元胞中六个顶角上最近邻原子对轨道构成了 σ 键, 而剩余的那个 p 轨道电子沿六角平面 c-轴形成了 π 键. 前者具有较强的电子-声子耦合模, 给出了 2 维的 σ 主带; 后者则呈现相对较弱的电子-声子耦合, 对应 π -带配对. 参考扫描隧道显微镜观测数据 [25] 和紧束缚模型拟合结果 [26], 我们选取 $\Delta_1 = 7\text{meV}$, $\Delta_2 = 2.35\text{meV}$, $N_1 = 0.4N_0$, $N_2 = 0.6N(0)$. 其中 $N(0) = 0.41 \text{ states}/(\text{eV} \cdot \text{Cell} \cdot \text{Spin})$, 面内费米速度 $\nu_{F1}^2 (\nu_{F2}^2) = 2.215(1.51) \times 10^{15} (\text{cm/s})^2$, 主带 (σ -band) 的转变温度 $T_1 = 39\text{K}$, 而 π -带的转变温度 T_2 可以在 (20–30)K 之间取值.

由这些参数出发, 在弱耦合极限下通过求解平衡态方程可以估算耦合参数强度. 首先, 假设约瑟夫森耦合项与 π -带对势有相同的温度分布. 弱耦合条件下 $\gamma_1 \approx |\alpha_\pi| (\Delta_\pi / \Delta_\sigma)$ [27]. 其次, 将 γ_1 代入平衡态方程得到

$$\gamma_2 / |\alpha_\pi| \approx \frac{N_1(0)}{N_2(0)} (1/|\psi_{20}|^2) + \frac{2}{3} |\beta_\sigma \alpha_\pi / \beta_\pi \alpha_\sigma|.$$

最后, 参考文献 [28] 的第 (10) 式, 取 $\gamma_3 / |\alpha_\pi| \approx \frac{2}{3} (\nu_\pi^2 / \nu_\sigma^2) (\Delta_\pi / \Delta_\sigma) (\xi_\pi / \xi_\sigma)$. 为便于进行数值模拟, 需要将 (1) 式作无量纲化处理, 记 $\vartheta =$

$7\zeta(3)/8(\pi T)^2$, 定义 $\Delta_0 = \sqrt{(4/3\vartheta)\ln(T_\sigma/T)}$ 和相干长度 $\xi_0 = \nu_F \sqrt{\vartheta/\ln(T_\sigma/T)}/2$. 无量纲化的超导序参量波函数、长度和矢势函数分别为 $(\psi_i, l, \mathbf{A}) \equiv [\Delta_i/\Delta_0, l/\xi_0, \mathbf{A}/(\Phi_0/2\pi\xi_0)]$, 其中 $\Phi_0 = h/2e$ 为超导量子磁通. 此外, 磁场强度由 $\sqrt{2}H_c$ 来约化, 这里 $H_c \equiv \sqrt{4\pi\vartheta\Delta_0^2}$.

利用松弛迭代公式 (2) 和周期性边界条件 (3) 将自由能泛函极小化:

$$\begin{aligned} \psi_\pi^{(n+1)} &= \psi_\pi^{(n)} - \epsilon_1(\partial f/\partial\psi_\pi^*)|^{(n)}, \\ \psi_\sigma^{(n+1)} &= \psi_\sigma^{(n)} - \epsilon_2(\partial f/\partial\psi_\sigma^*)|^{(n)}, \\ \mathbf{A}_x^{(n+1)} &= \mathbf{A}_x^{(n)} - \epsilon_3(\partial f/\partial\mathbf{A}_x)|^{(n)}, \\ \mathbf{A}_y^{(n+1)} &= \mathbf{A}_y^{(n)} - \epsilon_4(\partial f/\partial\mathbf{A}_y)|^{(n)}. \end{aligned} \quad (2)$$

其中 ϵ_j 为松弛因子, 取值范围为 (0, 2). 迭代精度, 即相邻两次迭代所对应的能量增量 $|\delta F| \leq 10^{-8}$.

$$\begin{aligned} \psi_{\pi,\sigma}(\mathbf{X} + \mathbf{t}_k) &= \psi_{\pi,\sigma}(\mathbf{X})e^{ig_k(X)}, \\ \mathbf{A}(\mathbf{X} + \mathbf{t}_k) &= \mathbf{A}(\mathbf{X}) + \nabla(g_k(X)), \\ g_k(\mathbf{X}) &\equiv c_k - \frac{1}{2}\bar{B}[(1+\theta)t_{ky}x - (1-\theta)t_{ky}y], \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $g_k(X)$ 称作生成函数, θ 和 $c_k (k = 1, 2)$ 为任意常数. 磁场平均强度 $\bar{B} \equiv 2\pi m/|\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2|$; 整数 m 表示外加磁场通量涡度, 即 $\Phi = m\Phi_0$, $|\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2|$ 表示磁元胞的面积. 方便起见, 选取 $\theta = c_k = 0$.

3 结果与讨论

先讨论面外垂直磁场下带间耦合引起的相分离现象. 为避免受限尺寸效应对数值解的影响, 我们选取足够大的磁元胞尺寸 $L_x \times L_y = 128 \times 128\xi^2$. 图 1 给出温度为 $T \in (T_1, T_2)$ 时的计算结果, 图 2 给出了温度为 $T < \min(T_1, T_2)$ 时的计算结果, 两图的外磁场磁通涡量均为 $m = 2$, 当 $T_1 < T < T_2$ 时, 得到了经典的 Abriksov 涡旋格子, 如图 1 所示. 此时, 由于 $\alpha_\pi(T) > 0$, (1) 式本质上描述了一个单带“超导-金属”耦合系统. 一个非零的 π 带序参量 $|\psi_\pi|$ 可以理解为近邻效应诱导的束缚态波函数振幅; 重要的是, 在涡旋芯处无论是 π -带还是 σ -带的波函数振幅皆以指数方式很快地趋于零. 对应于 $|\psi_\pi|$ 的 4 叶瓣结构, 一个单涡旋具有四度旋转对称性. 与上述情形不同, 随着温度降低, 当 $T \leq \min(T_1, T_2)$ 时, π 带电子相互作用也变为吸引的, 相应地, 其对势幅度逐渐提升. 当 $T = 0.1\text{K}$, $|\psi_\pi|$ 与 $|\psi_\sigma|$ 大体相当时, 出现了空间相

分离现象, 如图 2 所示. 此时, 高温区的单涡旋芯派生出 4 个“Semi-涡旋”而构成一个新的磁元胞. 该涡旋格子的奇特之处在于在每一个“半涡旋”芯处, 仅仅是一个带的对势幅度指数下降到零, 而另一个带的幅度却依然可观. 为便于区分, 我们称涡旋芯处 $|\psi_\pi| \rightarrow 0$ 的半涡旋为 π -涡旋、而 $|\psi_\sigma| \rightarrow 0$ 的半涡旋为 σ -涡旋. 两对 π -涡旋和 σ -涡旋交替出现在四方磁格子的对角线上, 因而它具有二度旋转对称性.

下面简要分析引起一个四度旋转对称的涡旋格子到二度旋转对称格子的起因. 由于涡旋芯附近波函数幅值较低, 直接耦合项的贡献可以忽略, 于是重点考虑梯度耦合项的贡献. 一个梯度算符可以等效为一个轨道角动量. 作为一阶近似, 涡旋芯附近该轨道角动量可表示为 $\hbar\frac{1}{\xi}\partial_\varphi(\theta_{\pi,\sigma})$. 如图 1 所示, π -带与 σ -带波函数相位绕向是彼此相反的, 前者为逆时针方向, 后者却是顺时针的. 由此我们推断, 梯度耦合项对两个不同带的电子轨道施加了方向相反的角动量. 如果有意识地引用“自旋”来描述该相位反向环绕效应, 就可以假设 σ -带电子是自旋向上的, π -带是下自旋. 梯度耦合项则诱导出一个等效轨道磁场, 相对于两个互为相反的自旋带彼此是反向的, 这等同于 Rashba 自旋-轨道相互作用. 由于其强度与两个带波函数模的乘积成正比, 在合适的温度下当 $|\psi_\pi|^2 = |\psi_\sigma|^2$ 时, 该等效轨道场强度达到最大值; 从而可望诱导相分离而形成新的二度旋转对称的涡旋格子.

本节考虑零外场条件, 探索与带间耦合相对应的自发对称破缺所诱导的新物质态. 温度设置为 $T = 0.1\text{K}$, 结果如图 3 所示, 显示出非常奇特的畴结构. 坐标空间中, 除去环状的畴壁近邻区域外, 两个带的波函数幅度 ψ_1 和 ψ_2 都是均匀不变的. 与此同时, 它们的位相差在畴内部也是一个不变的常量, 但在非常靠近环形畴壁的两侧呈现出急剧的凸陡, 与此相对应的自发场空间分布也一并示于图中. 环绕着环形畴壁, 自发磁场的极性螺旋进动, 与六角对称的晶面结构不同, 绕晶面对称轴每转动 $\pi/2$ 弧度该局域自发磁偶极子极性翻转一次, 因而具有二度旋转对称. 显然, 这是带间耦合散射过程所导致的旋转自发对称破缺. 而旋转对称自发破缺则允许存在时间反演破缺束缚态 $\frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_\pi \pm i\psi_\sigma\rangle$. 与此同时, 磁性畴壁散射引起的自旋相反的电子的费

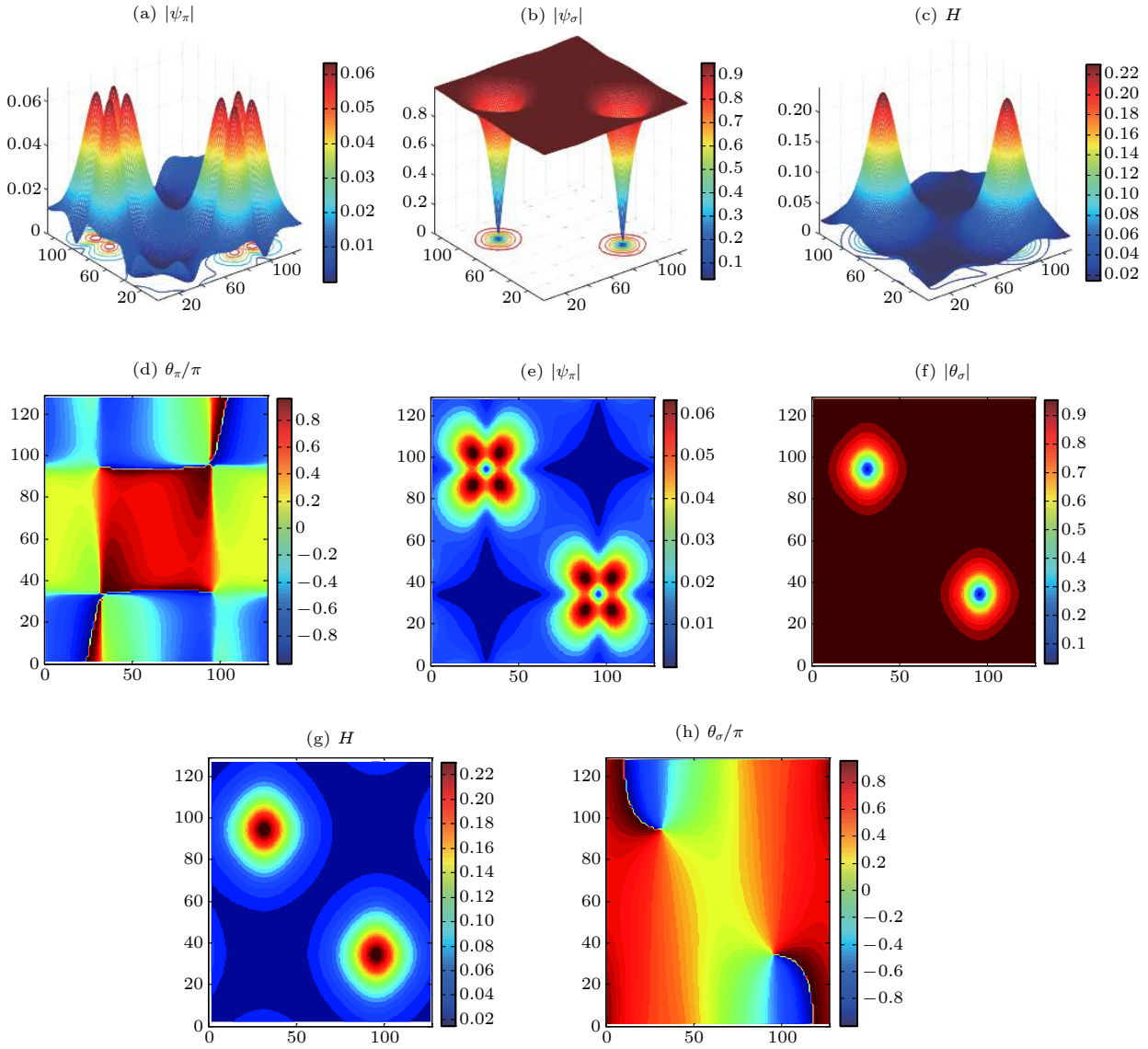


图 1 当温度 $T \in (T_1, T_2)$, 外磁场磁通量 $m = 2$ 时, 四度旋转对称的 Abrikosov 涡旋格子图 (a)–(c) 分别为 π - 带和 σ 带序参量和磁场的空间分布图; (e)–(g) 分别为对应的等高图; (d) 和 (h) 分别为 π 带和 σ 带波函数的相位分布图, 两者的相位绕向彼此相反

Fig. 1. The fourfold rotational symmetric Abrikosov vortex for the superconductor with coupled π - and σ - pairings under the external magnetic flux of two quanta ($m = 2$) and at the temperature $T \in (T_1, T_2)$: Panels (a)–(c) show the spatial distributions for π - and σ - channel amplitude and magnetic field H , respectively; (e)–(g) show the contour plots, respectively; (d) and (h) show the phase distribution for the π - and σ - channel, An opposite phase winding is indicated in the π - and σ - channels.

米波矢失配则允许自旋单态与自旋三重态共存, 而一个 (轨道) 偶宇称的三重态必将是频域奇称的配对态. 事实上, 频域奇称的配对态与自旋/轨道指标轮换而反号的对态是互易的, 由于关于轨道奇偶对换操作 (P) 和时间反演操作 (T) 服从这样的原则: 作用于自旋单态 $TP = +1$, 作用于自旋三重态 $TP = -1$.

有必要强调, 不同于一个平庸的点缺陷, 在那里局域对势波函数严格趋于零; 自发磁畴则是一种奇特的非平庸拓扑缺陷. 尤其是电子局域坐标穿越

畴界时, 由于带间波函数相位差的突变, 可望诱发所谓的“相孤子”或者是“磁扭结”. 而一个闭合的二度旋转对称扭结环, 正是一种拓扑非平庸的 Skymion (斯格明子) 结构. 另一方面, 外场中, 一旦斯格明子模与 Abrikosov 磁通格子得以共存, 则可望对前文提到的由 Meissner 畴和涡旋团簇所构成的“Semi-Meissner”现象给予一种解释. 此外, 时间反演对称破缺态究竟以何种方式呈现, 与超导体配对态对称性是密切相关的, 与此同时, 它还决定了相应基态载流与否. 基于此分析, 在讨论同样是

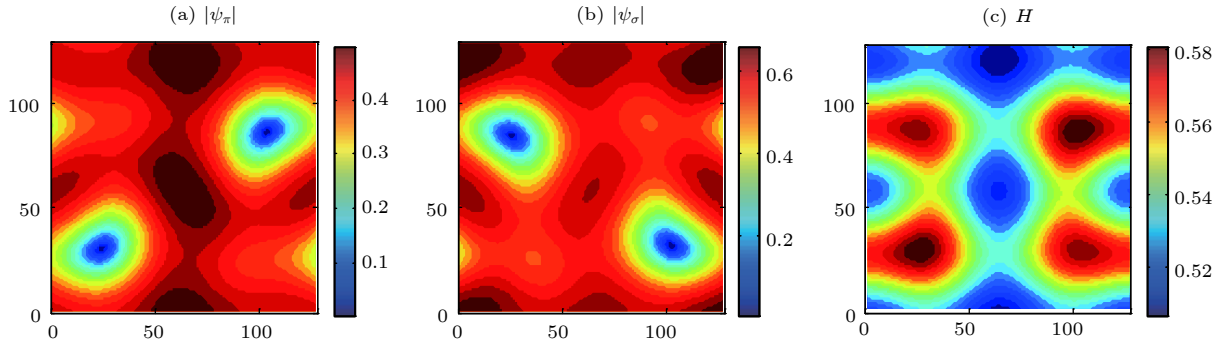


图 2 当温度 $T = 0.1\text{K}$, 外磁场磁通量子 $m = 2$ 时, π - 和 σ - 带空间分离的两度旋转对称半涡旋图 (a)–(c) 分别为 π - 和 σ - 带序参量和磁场的空间分布图

Fig. 2. The twofold rotational symmetric semi-vortex unit, consisting of spatially separated π - wave and σ - channel cores at the temperature $T = 0.1\text{K}$ and under the external magnetic flux of two quanta ($m = 2$), (a)–(c) show the contour plots for π - and σ - channel amplitude and magnetic field H , respectively.

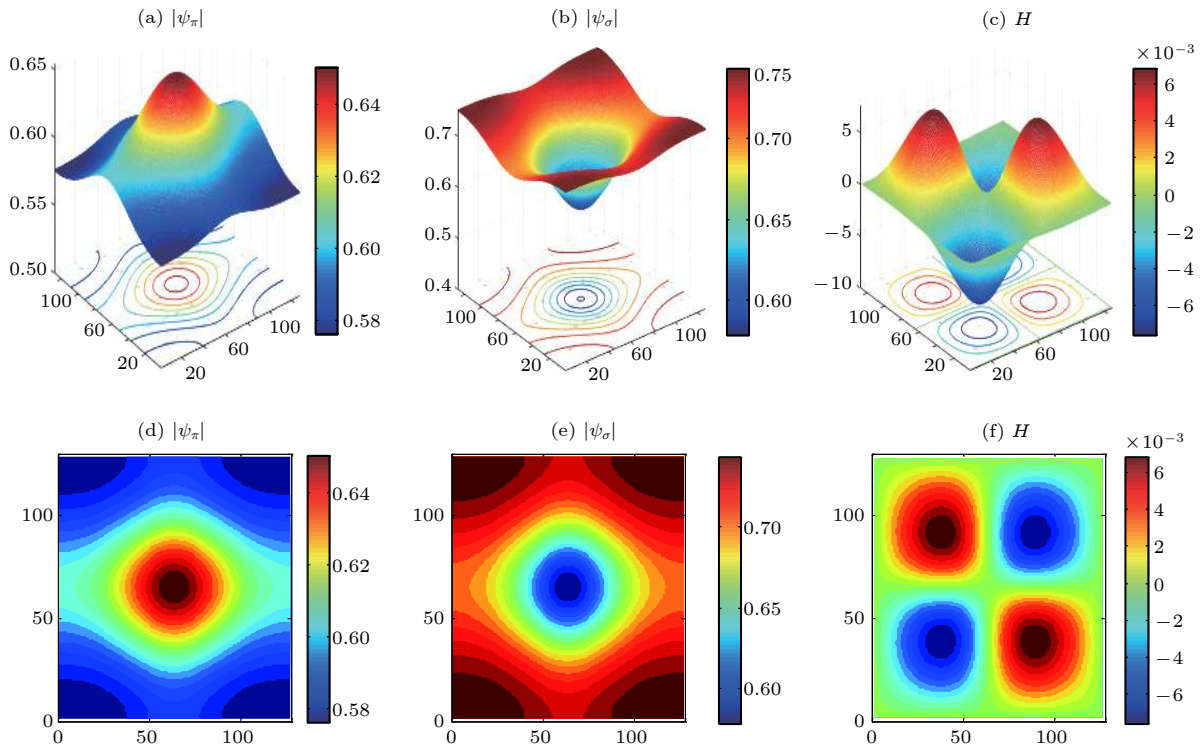


图 3 当温度 $T = 0.1\text{K}$ 时自发场图 (a)–(c) 分别为 π - 带和 σ - 带序参量和磁场的空间分布图; (d)–(f) 分别为对应的等高图
Fig. 3. Spontaneous magnetic field at the temperature $T = 0.1\text{K}$, Panels (a)–(c) show the spatial distributions for π - and σ - channel amplitude and spontaneous magnetic field H , respectively; (d)–(f) show the contour plots, respectively.

多带超导体的铁基超导体体系的基态对称性扮演了重要作用. 更为细致的讨论将在后续工作给出.

值得关注的是, 近期多带/多分量超导体时间反演对称破缺态以及与其相关的非平庸涡旋态的讨论引起了诸多研究者的关注. 如 Garaud 等论述了多带超导体中时间反演破缺态的热力学征兆^[29,30] 以及涡旋结构变化^[31]. Lin 等^[32] 分析了缺陷诱导的不同时间反演破缺 (T-broken) 态的特征.

Grinenko 等^[33] 给出了铁砷超导体中时间反演破缺超导性的观点, 此外, 时间反演破缺态支持了本文的畴结构, 特别是畴界将一对简并的时间反演破缺态 $\psi_\sigma \pm i\psi_\pi$ 局域化^[34]. 如果将 $\psi_\sigma \pm i\psi_\pi$ 理解为内禀轨道角动量为 ± 1 而与正/负自发磁场局域相对应, 正如在向列超导体^[35]和 Bose-Einstein 凝聚^[36,37] 冷原子系统中有望发现拓扑非平庸的涡旋态斯格明子态和 Majorana 零能模^[38].

最后, 利用微扰近似分析给出一个关于多带超导体的典型相图. 定义产生、湮灭算符为 $p_{\pm} = \sqrt{hc/2eH}(\Pi_x \pm i\Pi_y)$, 其中 H 表示磁场强度. 近似至 $\psi_{1,2}$ 的一次项, 并利用对易关系 $[p_+, p_-] = 1$, 平衡态 GL 方程 (2) 式可写为,

$$\begin{aligned} &\alpha_1 \iota^2 (T - T_1) \psi_1^* + \gamma_1 (2p_- p_+ + 1) \psi_1^* \\ &\quad + \gamma_c (p_+^2 + p_-^2) \psi_2^* = 0, \\ &\alpha_2 \iota^2 (T - T_2) \psi_2^* + \gamma_2 (2p_- p_+ + 1) \psi_2^* \\ &\quad + \gamma_c (p_+^2 + p_-^2) \psi_1^* = 0; \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\iota^2 = hc/2eH$, $\alpha_1 = \lambda_1$, $\alpha_2 = \lambda_2$, $\gamma_1 = \alpha(T_c) \lambda_1 \nu_{F1}^2/4$, $\gamma_2 = \alpha(T_c) \lambda_2 \nu_{F2}^2/4$, $\lambda_1 = (1/2)N_1(0)V_1$ 和 $\lambda_2 = (1/2)N_2(0)V_2$. 为避免可能的指数发散, 已将温度函数 $\ln(T_i/T)$ 在 T_i 附近作 Taylor 级数展开至两阶项. 分析中, 梯度耦合强度 γ_c 作为一个可变参量, 取值范围 $(0.0 - 0.6)\sqrt{|\alpha_{\pi}\alpha_{\sigma}|}$. 接下来, 通过逐级近似递推方式 (这里考虑了零阶与一阶近似), 给出相变场曲线方程. 第一步, 取 γ_c 零阶近似下, (4) 式退化为关于 ψ_1, ψ_2 的独立的简谐振子方程. 记各自的基态为 $|0\rangle_1, |0\rangle_2$, 他们分别满足 $p_-|0\rangle_1 = 0, p_-|0\rangle_2 = 0$. 然后, 考虑耦合项的一阶近似, 粒子数表象中, $|0\rangle_1$ 仅与 $|2\rangle_2$ 耦合, $|0\rangle_2$ 仅与 $|2\rangle_1$ 叠加. 于是, 假设对应两个带的本征态为 $|\psi_1^*\rangle = c_1|0\rangle_1 + c_2|2\rangle_2, |\psi_2^*\rangle = d_1|0\rangle_2 + d_2|2\rangle_1$, 其中 $c_{1,2}$ 和 $d_{1,2}$ 为待定的常数. 将 $\psi_{1,2}^*$ 代入到 (4) 式中, 即可得到关于这些待定系数的方程组. 由此可以求得本征值和本征态. 对于 σ 带的最小本征值是, $\frac{1}{2}[\alpha_1 \iota^2 (T - T_1) + \gamma_1 + \alpha_2 \iota^2 (T - T_2) + 5\gamma_2] - \frac{1}{2}\{[\alpha_1 \iota^2 \times (T - T_1) + \gamma_1 - \alpha_2 \iota^2 (T - T_2) - 5\gamma_2]^2 + 4\gamma_c^2\}^{1/2}$ 取最低的本征值为零, 即可得到相变场曲线方程,

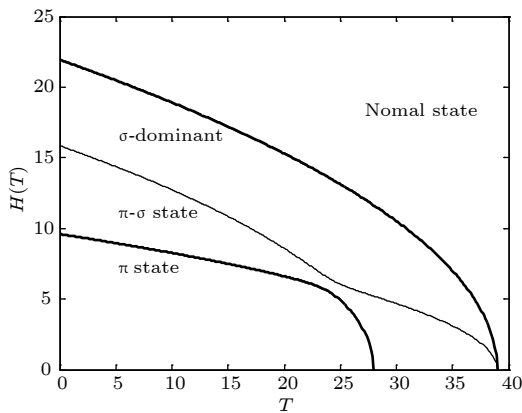


图 4 带间耦合强度 $\gamma_c = 0.5$ 时双带超导体 MgB_2 相图
Fig. 4. The phase diagram for the two-band superconductor MgB_2 with the interband coupling strength $\gamma_c = 0.5$.

$$[\alpha_1 \iota^2 (T - T_1) + \gamma_1][\alpha_2 \iota^2 (T - T_2) + 5\gamma_2]|_{H=H^*} = \frac{\gamma_c^2}{(5)} \quad (5)$$

将表征不同带指标的下标互换, 即可得到 π -带的相变场方程. 由此描绘出的相图示于图 4. 可以看出, 在略低于超导-正常相变的温区, 尤其是 π -带电子间吸引势较弱时, 体系是 σ 带占优的; 合适的温度范围内, 当 $|\psi_{\pi}|$ 与 $|\psi_{\sigma}|$ 大体相当时, 则是 π - σ 混合相, 双带间的耦合是诸多反常现象的主要诱因; 更低的温区, 当 $|\psi_{\pi}| > |\psi_{\sigma}|$ 时, 带间耦合强度反而变弱了, 系统行为将是 π 带占主导. 这样的单带-混合相-单带相变或许是多带/多分量超导体相图中的一个普遍现象.

4 结 论

基于一个半唯像的双带金兹堡-朗道模型, 研究了双带超导体 MgB_2 中奇频配对态存在性问题. 证明了带间耦合特别是梯度耦合作用, 可以诱导“半-涡旋”结构以及四度旋转对称与二度旋转对称的涡旋格子相变. 研究发现, 零外磁场下, 带间耦合所引起的自发磁场的极性绕晶面对称轴每转动 $\pi/2$ 弧度翻转一次, 因而具有二度旋转对称. 显然, 这是带间耦合散射过程所导致的自发对称破缺. 一个旋转对称自发破缺则允许存在时间反演破缺束缚态 $\frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_{\pi} \pm i\psi_{\sigma}\rangle$; 与此同时, 磁性畴壁散射引起的自旋相反的电子的费米波矢失配则允许自旋单态与自旋三重态共存, 而一个 (轨道) 偶宇称的三重态必将是频域奇称的配对态.

事实上, 如果将自发磁畴理解为一个磁性正常畴, 则整个体系就等价于一个磁性金属-超导结构. 与磁性界面散射相对应的反常 Andreev 反射和近邻效应所引起的配对态对称性, 如自旋单态与三重态的转换^[39]、s-波超导局域态密度中的零能峰^[40]等都是存在奇频 s-波配对态的强有力佐证.

感谢张凌峰博士 (Dr. L-F Zhang) 富有成果的讨论.

参考文献

- [1] Berezinskii V L 1974 *JETP Lett.* **20** 287
- [2] Kirkpatrick T R, Belitz D 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1533
- [3] Coleman P, Miranda E, Tsvetlik A 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2960
- [4] Balatsky A, Abrahams E, Scalapino D J, Schrieffer J R 1995 *Phys. Rev. B* **52** 1271
- [5] Bergeret F S, Volkov A F, Efetov K B 2005 *Rev. Mod. Phys.*

77 1321

- [6] Tanaka Y, Golubov A A, Kashiwaya S, Ueda M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 037005
- [7] Keizer R S, Goennenwein S T B, Klapwijk T M, Miao G, Xiao G, Gupta A 2006 *Nature* **439** 525
- [8] Eschrig M, Löfwander T 2008 *Nat. Phys.* **4** 138
- [9] Robinson J W A, Witt J D S, Blamire M G 2010 *Science* **329** 59
- [10] Wen L, Jin L J, Chen Y, Zha G Q, Zhou S P 2014 *Europhys. Lett.* **105** 27007
- [11] Annica M, Black S, Alexander V B 2013 *Phys. Rev. B* **88** 104514
- [12] Stewart G R 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1589
- [13] Rourke P M C, Tanatar M A, Turel C S, Berdeklis J, Petrovic C, Wei J Y T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 107005
- [14] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 494
- [15] Tsui D C, Stormer H L, Gossard A C 1982 *Phys. Rev. Lett.* **48** 1559
- [16] Volovik G E, Yakovenko V M 1989 *Condensed Matter Physics* **1** 5263
- [17] Bernevig B A, Zhang S C 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 106802
- [18] Babaev E, Speight M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 180502
- [19] Moshchalkov V, Menghini M, Nishio T, Chen Q H, Silhanek A V, Dao V H, Chibotaru L F, Zhigadlo N D, Karpinski J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 117001
- [20] Nishio T, Dao V H, Chen Q H, Chibotaru L F, Kadowaki K, Moshchalkov V 2010 *Phys. Rev. B* **81** 020506
- [21] Kogan V G, Schmalian J 2011 *Phys. Rev. B* **83** 054515
- [22] Geyer J, Fernandes R M, Kogan V G, Schmalian J 2010 *Phys. Rev. B* **82** 104521
- [23] Babaev E, Silaev M 2012 *Phys. Rev. B* **86** 016501
- [24] Šimánek E 2006 *Phys. Rev. B* **74** 052501
- [25] Iavarone M, Karapetrov G, Koshelev A E, Kwok W K, Crabtree G W, Hinks D G, Kang W N, Choi E M, Kim H J, Kim H J, Lee S I 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 187002
- [26] Kong Y, Dolgov O V, Jepsen O, Andersen O K 2001 *Phys. Rev. B* **64** 020501
- [27] Zhitomirsky M E, Dao V H 2004 *Phys. Rev. B* **69** 054508
- [28] Silaev M, Babaev E 2012 *Phys. Rev. B* **85** 134514
- [29] Garaud J, Babaev E 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 017003
- [30] Garaud J, Silaev M, Babaev E 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 097002
- [31] Garaud J, Silaev M, Babaev E 2017 *Phys. Rev. B* **96** 140503
- [32] Lin S Z, Maiti S, Chubukov A 2016 *Phys. Rev. B* **94** 064519
- [33] Grinenko V, Materne P, Sarkar R, Luetkens H, Kihou K, Lee C H, Akhmadaliev S, Efremov D V, Drechsler S L, Klauss H H 2017 *Phys. Rev.* **95** 214511
- [34] Zhang L F, Covaci L, Milošević M V 2017 *Phys. Rev. B* **96** 224512
- [35] Zyuzin A A, Garaud J, Babaev E 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 167001
- [36] Yu X Z, Onose Y, Kanazawa N, Park J H, Han J H, Matsui Y, Nagaosa N, Tokura Y 2010 *Nature* **465** 901
- [37] Choi J Y, Kwon W J, Shin Y I 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 035301
- [38] Sato M, Ando Y 2017 *Rep. Prog. Phys.* **80** 076501
- [39] Linder J, Yokoyama T, Sudb A E, Schrig M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 107008
- [40] Tanaka Y, Tanuma Y 2007 *Phys. Rev. B* **76** 054522

Spontaneous magnetic field and odd-frequency pairing state in multiband superconductors^{*}

Zhang Yan-Yan Chen Jia-Lin Zha Guo-Qiao Zhou Shi-Ping[†]

(Shanghai Key Laboratory of High Temperature Superconductors, Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

(Received 29 March 2019; revised manuscript received 19 June 2019)

Abstract

We investigate the interband coupling induced odd-frequency pairing state by solving the microscopic Ginzburg-Landau model for the two band superconductor magnesium diboride (MgB_2). It is found that the interband coupling can induce a new domain structure and a heliacal spontaneous magnetic vortex-antivortex pair around the cyclical domain wall, which breaks down spin-rotational symmetry and supports a time-reversal violating bound state, allowing the coexistence of spin-singlet and spin-triplet state close to the spontaneous vortex core. The odd-frequency spin-triplet even parity pairing state occurs since a successive operation in the orbital parity (P) and the time-reversal (T) obeys $\text{PT} = +1(-1)$ for spin-singlet (spin-triplet) pairing amplitude. A general phase diagram is presented.

Keywords: Ginzburg-Landau model, spontaneous magnetic field, odd-frequency pairing state

PACS: 74.25.Ha, 74.20.De, 74.20.Rp

DOI: 10.7498/aps.68.20190445

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61571277, 61771298).

† Corresponding author. E-mail: spzhou@shu.edu.cn