

Бездисперсионные моды и сверхпроводимость ультратонких пленок

Ю. С. Бараш¹⁾, П. И. Нагорных

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка 142432 Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 2 марта 2006 г.

После переработки 5 апреля 2006 г.

На простом примере пленки из трех атомных слоев найдено самосогласованное аналитическое решение задачи о сверхпроводимости ультратонких металлических пленок в рамках прыжковой модели для электронов в металле (*tight-binding model*). В пленках с атомной толщиной сверхпроводимость не разрушается, если энергии электронной подсистемы лежат вблизи поверхности Ферми хотя бы для некоторых значений компоненты квазиимпульса вдоль пленки. Существенное увеличение критической температуры сверхтонкой металлической пленки по сравнению с ее объемным значением возможно при наличии в спектре электронных возбуждений низкоэнергетических мод с аномально слабой дисперсией.

PACS: 74.78.–w

Изучение сверхпроводимости малых металлических гранул и тонких пленок активно проводится в течение многих лет и включает широкий круг физических проблем. Одной из исследуемых задач является поведение критической температуры с уменьшением размеров гранул или толщины пленок и разрушение сверхпроводимости в сверхмалых частичках и сверхтонких пленках металла. В этой связи важную роль могут играть эффекты размерного квантования в электронной и фононной подсистемах, изменение константы сверхпроводящего спаривания вблизи границ раздела (в частности, вследствие появления поверхностных мод в фононном спектре), близость к переходу сверхпроводник – изолятор или металл – изолятор в сильно неупорядоченных (например, гранулированных) пленках, флуктуации сверхпроводящего параметра порядка, а также влияние матрицы, содержащей малые частицы, или подложки, на которой выращена пленка, и соответствующих границ раздела на свойства изучаемых образцов (см., например, [1–17] и приведенную там литературу).

В настоящее время стало возможным приготовление эпитаксиально выращенных монокристаллических ультратонких пленок с атомно-гладкими поверхностями и небольшим числом атомных слоев, фиксированным на площади макроскопического масштаба. Это позволило измерить осцилляции T_c с изменением числа атомных слоев в ультратонких сверхпроводящих пленках из свинца на кремниевой подложке [17]. Если размерное квантование электронных состояний в малых металлических гранулах приво-

дит к дискретным уровням с энергиями превышающими энергетический интервал для спаривательного взаимодействия, сверхпроводимость в этих гранулах отсутствует. В простейших случаях сделанный вывод относится также к ультратонким металлическим пленкам [2]. Экспериментальные результаты показывают, однако, что температура сверхпроводящего перехода T_c может оказаться не малой даже в пленках, содержащих пять монослоев [17]. Это делает актуальным дальнейшее теоретическое изучение данного круга задач.

В предлагаемой работе в рамках прыжковой модели для электронов в металле (*tight-binding model*) и стандартной теории среднего поля БКШ показано, что ультратонкие пленки атомной толщины остаются сверхпроводящими, а соответствующая критическая температура может оказаться заметно выше, чем в массивном образце. Полученные результаты обусловлены, в основном, двумя причинами. Во-первых, электронные уровни обычно зависят от компонент волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} , параллельного границам пленки, и дискретны из-за размерного квантования лишь при фиксированном \mathbf{k}_{\parallel} . Как правило, для большей части возможных значений \mathbf{k}_{\parallel} дискретные уровни в пленках атомной толщины действительно лежат вне энергетического интервала $E < E_c$ существования сверхпроводящего спаривания, и заселяющие их электроны не участвуют в сверхпроводимости. Однако для некоторой небольшой области векторов \mathbf{k}_{\parallel} дисперсионные уровни могут лежать около поверхности Ферми и соответствующие электроны образуют куперовские пары. В результате сверхтонкая пленка является сверхпроводящей, а критичес-

¹⁾e-mail: barash@issp.ac.ru

кая температура в ней, в отсутствие низкоэнергетических бездисперсионных мод, зависит от константы связи стандартным для теорий типа БКШ образом. В данных условиях для сравнения критических температур пленки и массивного образца требуется существенная дополнительная информация, в частности, об изменении константы связи в пленках с уменьшением их толщины. Во-вторых, если в спектре возбуждений электронной подсистемы присутствуют нулевые моды или низкоэнергетические моды с аномально слабой дисперсией, поведение T_c изменяется качественно. Спаривание заселяющих такие моды квазичастиц приводит, в первом приближении, к линейной зависимости T_c от константы связи и, как следствие, к возможности значительного повышения критической температуры сверхтонкой пленки по сравнению с ее значением при больших толщинах.

Ниже основные аналитические результаты сначала получены для упрощенной двумерной модели чистой ультратонкой сверхпроводящей пленки (полоски), содержащей всего три атомных слоя (атомные цепочки). Пленка считается изолированной, то есть любые перескоки частиц из пленки наружу и из внешнего окружения в узлы пленки запрещены. Преимуществом такой модели является возможность получить сравнительно простое явное аналитическое самосогласованное решение задачи на каждом узле пленки в рамках теории среднего поля. В наиболее важных случаях мы дополняем такой расчет соответствующими результатами для пленки с тремя (111) атомными слоями простой кубической решетки, согласно которым основные полученные для двумерных пленок результаты сохраняются и в ультратонких чистых пленках, содержащих несколько атомных слоев трехмерного кристалла. В связи с экспериментальными результатами работы [17], в конце нашей работы обсуждаются также свойства ультратонких (111) пленок с ГЦК кристаллической структурой.

Гамильтониан для электронов в сверхпроводнике запишем в приближении среднего поля

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (t_{ij} + \mu \delta_{ij}) \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \sum_i \left\{ \Delta_i \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{i\downarrow}^+ + \text{h.c.} \right\}. \quad (1)$$

Здесь t_{ij} – матричный элемент перескока электрона с узла \mathbf{j} на узел \mathbf{i} , $\hat{c}_{i\sigma}^+$ – оператор рождения электрона со спином σ на узле \mathbf{i} , μ характеризует степень заполнения зоны, а Δ_i – значение параметра порядка s -сверхпроводника на узле \mathbf{i} , определяемое уравнением самосогласования:

$$\Delta_i = -g \langle \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} \rangle. \quad (2)$$

Рассмотрим сверхпроводящую пленку с N атомными слоями на двумерной квадратной решетке, границы которой имеют ориентацию (11) или (10) (см. рис.1). Будем учитывать лишь перескоки между

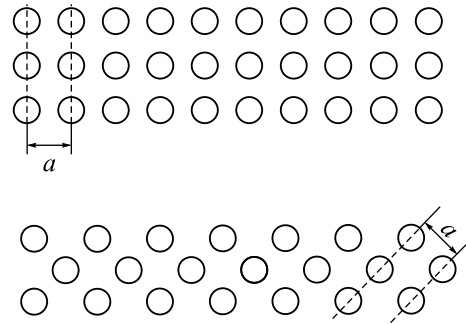


Рис.1. Полоска (двумерная пленка) из трех атомных цепочек с расстоянием a между ближайшими соседями и ориентацией границ (10) (вверху) и (11) (внизу)

ближайшими соседями и предполагать, что сверхпроводящее спаривание имеет место в интервале энергий $|E| < E_c \ll t$, где t отвечает перескокам между ближайшими соседними узлами. Константу g считаем малой, $g \ll E_c$, и заданной феноменологически, как это делается в рамках моделей типа БКШ. Эта константа, вообще говоря, зависит от толщины пленки и может существенно отличаться от своего значения в массивном образце (см., например, [13]).

Гамильтониан (1) диагонализуется обычным образом с помощью преобразований Боголюбова:

$$\hat{c}_{j\sigma} = \sum_n \left[u_{n\sigma}(\mathbf{j}) \hat{b}_{n\sigma} + \sigma v_{n\sigma}^*(\mathbf{j}) \hat{b}_{n\bar{\sigma}}^+ \right]. \quad (3)$$

Вследствие кристаллической периодичности пленки вдоль ее границы, в уравнениях Боголюбова для функций $u_{\sigma}(j_x, j_y)$, $v_{\sigma}(j_x, j_y)$ удобно провести преобразование Фурье вдоль оси y , параллельной границе двумерной пленки, и ввести соответствующую компоненту k_y волнового вектора ($\mathbf{k}_{\parallel} = (k_y, 0)$)

$$\begin{pmatrix} u_{\sigma}(\mathbf{j}) \\ v_{\bar{\sigma}}(\mathbf{j}) \end{pmatrix} = \frac{d_y}{2\pi} \int_{-\pi/d_y}^{\pi/d_y} dk_y e^{ik_y d_y j_y} \begin{pmatrix} u_{\sigma}(j_x, k_y) \\ v_{\bar{\sigma}}(j_x, k_y) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Здесь $d_y = a, \sqrt{2}a$ для (10), (11) границ раздела, где a есть постоянная квадратной решетки.

В результате уравнения Боголюбова можно записать в следующей матричной форме:

$$\begin{pmatrix} \hat{K}(k_y) & -\hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^* & -\hat{K}(k_y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{u}_{n\sigma}(k_y) \\ \hat{v}_{n\bar{\sigma}}(k_y) \end{pmatrix} = E_{n\sigma}(k_y) \begin{pmatrix} \hat{u}_{n\sigma}(k_y) \\ \hat{v}_{n\bar{\sigma}}(k_y) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Для пленки из N слоев $\hat{K}(k_y)$ и $\hat{\Delta}$ есть $N \times N$ матрицы с элементами $K_{ij} = -d_1(k_y)\delta_{ij} - d_2(k_y)\delta_{ij}$ и $\Delta_{ij} = \Delta_i\delta_{ij}$, где $i, j = 1, 2, \dots, N$ отвечают x -координатам атомных узлов, то есть нумеруют атомные слои в пленке. Дельта-символы Кронеккера δ_{ij} и δ_{ij} предполагаются отличными от нуля для совпадающих и ближайших соседних значений индексов, соответственно. Волновые функции $\hat{u}_\sigma(k_y)$, $\hat{v}_\sigma(k_y)$ содержат по N компонент $u_\sigma(j, k_y)$, $v_\sigma(j, k_y)$, $j = 1, 2, \dots, N$ и отвечают значениям этих функций на соответствующих атомных слоях. Для пленки с ориентацией границ (11) имеем $d_1(k_y) = 2t \cos(k_y a/\sqrt{2})$, $d_2(k_y) = \mu$, а для пленки с ориентацией границ (10) $d_1 = t$, $d_2 = [2t \cos(k_y a) + \mu]$.

Для пленки с N атомными слоями имеется N решений уравнений (5) с $E_{n\sigma}(k_y) > 0$ и столько же решений для $E_{n\sigma}(k_y) < 0$. Собственным состояниям квазичастиц отвечают стоячие вдоль оси x , то есть поперек пленки, волны. Особый интерес представляет возможность появления лежащих вблизи поверхности Ферми бездисперсионных мод или возбуждений с аномально слабой дисперсией. Квазичастицы в бездисперсионных состояниях локализованы, поскольку в отсутствие зависимости энергии от k_y их групповая скорость вдоль пленки равна нулю. При учете только перескоков между ближайшими соседями, бездисперсионные моды всегда возникают в металлических пленках с нечетным числом атомных слоев, если слои образуют две подрешетки и перескоки квазичастиц вдоль них (то есть вдоль границ пленки) отсутствуют. При этом уравнения Шредингера для электронов и дырок $(E + \mu)u_i = -d_1[u_{i+1} + u_{i-1}]$, $(E - \mu)v_i = d_1[v_{i+1} + v_{i-1}]$ имеют нетривиальные решения, соответственно, с энергиями $E = \mp\mu$. Им отвечают волновые функции, нечетные при инверсии координат относительно центрального атомного слоя и обращающиеся в нуль на всех атомных слоях подрешетки, содержащей центральный слой. При половинном заполнении ($\mu = 0$) данные решения являются нулевыми модами [18, 19]. Как следует из условий нормировки, с ростом толщины пленки амплитуда бездисперсионных мод уменьшается примерно как $1/\sqrt{N}$ при большом числе атомных слоев. По этой причине проявление бездисперсионных мод оказывается заметным лишь в ультратонких пленках, содержащих несколько атомных слоев. Строгая локализация этих мод нарушается за счет более далеких перескоков, которые приводят к сравнительно слабой дисперсии. Так, перескоки на следующие за ближайшими узлы с матричным элементом t' сохраняют низкоэнергетический характер обсуждаемых возбуждений во всей зоне Бриллюэна, поскольку $t' \ll t$.

При условии $t' < E_c \ll t$ такие перескоки приводят лишь к малым поправкам к основным полученным ниже результатам.

Рассмотрим далее двумерные пленки с тремя атомными слоями при половинном заполнении $\mu = 0$, когда аналитические результаты имеют сравнительно простой вид. Пусть индексы $j = 1, 2, 3$ отвечают нижнему, центральному и верхнему атомным слоям, x -координаты которых в пленке с ориентацией границ (11) есть, соответственно, $-a/\sqrt{2}$, 0 , $a/\sqrt{2}$, а в пленке с ориентацией границ (10) $-a$, 0 , a . В силу симметрии системы при инверсии относительно среднего атомного слоя параметр порядка также оказывается симметричен $\Delta_1 = \Delta_3$, а значения решений уравнений (5) на крайних слоях либо совпадают, либо отличаются знаком: $u_n(1, k_y) = \pm u_n(3, k_y)$, $v_n(1, k_y) = \pm v_n(3, k_y)$. Поскольку любое решение уравнений Боголюбова с энергией $-E$ легко построить, если известно соответствующее решение с энергией E , достаточно описать три имеющихся в данной задаче решения с положительной энергией. В случае ориентации границ (11), нечетному решению отвечает бездисперсионная мода с энергией $E_1 = \Delta_1$. При этом волновая функция обращается в нуль на центральном слое, а на крайних слоях $u_1(1) = -v_1(1) = 1/2$. Два других состояния описываются четными волновыми функциями и проявляют существенную дисперсию. Используя обозначения $\Delta = (\Delta_1 + \Delta_2)/2$, $D = \sqrt{\Delta^2 + 2d_1^2}$, энергии этих состояний можно записать в виде $E_{2,3} = D \pm (\Delta_1 - \Delta_2)/2$. В пленке из нормального металла, когда $\Delta_{1,2} = 0$, соответствующие энергии вырождены и имеют вид $E_m(k_y) = 2\sqrt{2}t \cos(k_y a/\sqrt{2})$. Далее получаем $u_{2,3}(1, k_y) = \mp v_{2,3}(1, k_y)$, $u_{2,3}(2, k_y) = \pm v_{2,3}(2, k_y)$, где

$$u_{2,3}(1, k_y) = \pm \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{\Delta}{D}\right)^{1/2}, \quad (6)$$

$$u_{2,3}(2, k_y) = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{\Delta}{D}\right)^{1/2} \frac{\Delta \mp D}{d_1}. \quad (7)$$

Уравнения самосогласования имеют вид $\Delta_i = -2g \sum'_{n, k_y} u_n(i, k_y) v_n^*(i, k_y) \text{th}(E_n(k_y)/2T)$, где суммирование ведется по положительным ветвям спектра и по всем состояниям, в которых константа связи не обращается в нуль. Последнее обстоятельство приводит к разным областям интегрирования по k_y для разных мод. Так, электроны, заселяющие в металлической пленке бездисперсионную нулевую моду, участвуют в сверхпроводящем спаривании при всех допустимых значениях $-\pi/\sqrt{2}a < k_y < \pi/\sqrt{2}a$.

По этой причине в уравнении самосогласования параметр обрезания в соответствующем интеграле по k_y не возникает. Данное утверждение сохраняется и при небольших отклонениях от половинного заполнения, если $2|\mu| < g$ (см. ниже (11)). В то же время дисперсионная мода $E_m(k_y)$ в металлической пленке лежит вдали от поверхности Ферми ($E_m(k_y) > E_c$) для большей части возможных значений k_y . Для этой моды только электроны с компонентами импульса $k_{y,c} < |k_y| \leq \pi/\sqrt{2}a$, лежащими достаточно близко к краю зоны Бриллюэна, участвуют в образовании куперовских пар и вносят вклад в уравнение самосогласования. Величина $k_{y,c}$ связана с энергией обрезания соотношением $E_c = 2\sqrt{2}t \cos(k_{y,c}a/\sqrt{2}) \ll t$.

Уравнения самосогласования для значений параметра порядка на соседних атомных слоях трехслойной (11) пленки существенно различаются. Бездисперсионная мода не вносит прямого вклада в уравнение для Δ_2 , поскольку волновые функции заселяющих ее квазичастиц обращаются в нуль на центральном слое. Подставляя найденные выше решения для $u_n(i, k_y)$, $v_n(i, k_y)$ в уравнения самосогласования, получаем при $T = 0$ следующую систему уравнений для значений параметра порядка на внешних (Δ_{10}) и центральном (Δ_{20}) атомных слоях:

$$\Delta_{10} = \frac{1}{2}(g + \Delta_{20}), \quad (8)$$

$$\Delta_{20} = \frac{2g}{\pi} \int_{\xi_c}^{\pi/2} d\xi \frac{\Delta_{10} + \Delta_{20}}{\sqrt{(\Delta_{10} + \Delta_{20})^2 + 32t^2 \cos^2 \xi}}. \quad (9)$$

Здесь $\xi_c = \arccos(E_c/2\sqrt{2}t)$. Первое слагаемое в правой части уравнения (8) описывает вклад в Δ_{10} от бездисперсионных мод. При условии $g \ll t$ этот вклад доминирует и приводит к линейной зависимости параметра порядка Δ_{10} от константы связи. Отсутствие прямого влияния бездисперсионной моды на Δ_{20} приводит в конечном счете к сравнительной малости значения параметра порядка на центральном атомном слое $\Delta_{20} \ll \Delta_{10}$. Имеется, однако, существенное косвенное влияние бездисперсионной моды на величину Δ_{20} , обусловленное эффектом близости атомных слоев. Поскольку энергии и волновые функции дисперсионных мод зависят как от Δ_{20} , так и от Δ_{10} , величина Δ_{10} входит в уравнение самосогласования (9) для Δ_{20} и в значительной мере определяет самосогласованное значение последней. В первом неисчезающем приближении получаем

$$\Delta_{10} \approx \frac{g}{2}, \quad \Delta_{20} \approx \frac{g^2}{4\sqrt{2}\pi t} \ln \frac{4E_c}{g}. \quad (10)$$

Согласно (10), соотношение $\Delta_{20} \ll \Delta_{10}$ справедливо при выполнении условия $g \ln(4E_c/g) \ll 2\sqrt{2}\pi t$, что очень близко к критерию слабой связи и не противоречит принятым условиям $g \ll E_c \ll t$. Таким образом, сверхпроводящий параметр порядка в рассматриваемой пленке существенно неоднороден, изменяясь во много раз при переходе от одного из атомных слоев к соседнему.

Бездисперсионная мода также вносит доминирующий вклад в уравнение для T_c , и результат имеет простой вид $T_c \approx g/4$. Отметим выполнение соотношений $2\Delta_{10}/T_c \approx 4$ и $\Delta_{20} \ll T_c$. Критическая температура сверхпроводящей пленки оказывается сравнимой с максимальным значением параметра порядка в ней, а ее необычная зависимость от константы связи обусловлена наличием низкоэнергетической бездисперсионной моды в спектре возбуждений. В условиях $g \ll E_c \ll t$ значение $T_c \approx g/4$ может существенно превысить стандартную величину $\propto E_c \exp(-at/g)$ с не слишком малой постоянной α (см., например, выражение (16) ниже). Здесь соответствующая длина когерентности $\sim ta/g \gg a$ еще достаточно велика и на ее масштабе имеется много частиц. Это гарантирует малость флуктуаций модуля параметра порядка, которая, вместе с ограничениями на фазовую жесткость, необходима для применения обычной теории среднего поля. Отклонение от половинного заполнения приводит к нарушению симметрии частица-дырка и к понижению T_c . Если $|\mu| < \Delta_{10}|_{\mu=0} \approx g/2$ и бездисперсионные моды с энергиями $E = \pm \sqrt{\Delta_1^2 + \mu^2}$ доминируют в формировании критической температуры, имеем

$$T_c \approx \mu \left[\ln \left(\frac{g + 2\mu}{g - 2\mu} \right) \right]^{-1}. \quad (11)$$

В локальной плотности состояний для нормальной металлической (11) пленки на внешних атомных слоях имеется один низкоэнергетический дельта-пик при нулевой энергии, который индуцирован нулевой модой. При этом на центральном слое пики с энергиями $E \ll t$, после интегрирования по k_y , вовсе отсутствуют. Отсутствие низкоэнергетических пиков в локальной плотности состояний двумерной металлической (11) пленки, происходящих от дисперсионных мод, связано с отсутствием у этих мод каких-либо экстремумов при $E \ll t$. Дисперсионные энергетические ветви с положительной и отрицательной энергиями $\pm E_m(k_y) = \pm 2\sqrt{2}t \cos(k_y a/\sqrt{2})$ пересекаются на энергии Ферми на краях зоны Бриллюэна $k_y = \pm \pi/\sqrt{2}a$. При этом величина $|\partial E_m(k_y)/\partial k_y|$ не равна нулю и не является аномально малой. Отталкивание между уровнями и их пересоединение возникает

ют при переходе в сверхпроводящее состояние. Это приводит к экстремумам в дисперсионной энергии и появлению дополнительных корневых пиков в двумерных пленках. Локальная плотность состояний на внешних слоях сверхпроводящей (11) пленки из трех атомных слоев имеет при малых энергиях и $\mu = 0$ один пик в окрестности $E = \Delta_1$:

$$\nu(1, E) = \frac{1}{\pi} \delta(E - \Delta_1) + \frac{1}{4\sqrt{2}\pi^2 t} \sqrt{\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{E - \Delta_1}}. \quad (12)$$

Член с дельта-функцией в плотности состояний возникает от бездисперсионной моды $E_1 = \Delta_1$. Уширение может затруднить идентификацию бездисперсионных возбуждений в пленке, исходя из формы соответствующих пиков в локальной плотности состояний. Второе слагаемое в (12) отлично от нуля при $E > \Delta_1$ и возникает в двумерной пленке от дисперсионной моды $E_2(k_y)$, минимум которой на краю зоны Бриллюэна $k_y = \pi/\sqrt{2}a$ есть Δ_1 . Корневой характер таких пиков существенно связан с двумерностью задачи, когда имеется лишь одна параллельная поверхности пленки компонента квазиимпульса. На центральном слое пик в локальной плотности состояний формируется только дисперсионной модой $E_3(k_y)$ и расположен при $E = \Delta_2$, что отвечает низкоэнергетическому минимуму дисперсионной ветви на краю зоны Бриллюэна $k_y = \pi/\sqrt{2}a$. Таким образом, положения пиков в локальной плотности состояний на внешних и на центральном атомных слоях сверхпроводящей (11) пленки характеризуются существенно разными масштабами энергий $\Delta_1 \gg \Delta_2$.

Рассмотрим теперь токовые состояния сверхтонкой сверхпроводящей пленки с ориентацией (11). Как было показано выше, электроны, заселяющие бездисперсионные моды, образуют куперовские пары и оказывают существенное влияние на величину критической температуры пленки. Однако в сверхпроводящем транспорте соответствующие моды не участвуют вследствие их локализации. В рассматриваемой задаче это обстоятельство непосредственно следует из выражения для тока $\mathbf{j}(r_i) = -c \langle \delta \hat{H} / \delta \mathbf{A}(r_i) \rangle$, при учете зависимости интегралов перескока в гамильтониане (1) от магнитного поля: $t_{ij} = t \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_i^j \mathbf{A} d\mathbf{l}\right)$. В результате выражение для орбитальной части тока содержит, в приближении ближайших соседей, попарные произведения волновых функций квазичастиц, взятых на ближайших соседних узлах. Для (11) решетки с нечетным N один из этих узлов всегда принадлежит подрешетке, содержащей центральный атомный слой, на которой волновые функции рассмотренных выше бездисперсионных состояний обращаются в нуль. Бездисперсионные моды в нор-

мальной металлической пленке с нечетным $N > 3$ приобретают слабую дисперсию и могут непосредственно участвовать в процессах переноса не только за счет дальних перескоков, но и вследствие перехода в сверхпроводящее состояние. В сверхпроводящей пленке из трех атомных слоев слабая дисперсия у моды E_1 возникает только при дополнительном влиянии приложенного магнитного поля и поэтому сказывается на поведении нелинейного отклика. Рассмотрим ниже линейный отклик сверхпроводящей (11) полоски с тремя атомными слоями на слабое магнитное поле, приложенное вдоль оси z , и ограничимся приближением ближайших соседей. Тогда имеется лишь вклад в ток от квазичастиц, заселяющих дисперсионные моды $E_{2,3}(k_y)$ и соответствующие моды с отрицательной энергией. С учетом спектра и волновых функций (6) этих мод нетрудно вычислить, например, плотность тока в узлах внешних слоев пленки:

$$j(i_x = 1, i_y) = -\frac{2e^2 t H}{\pi \hbar^2 c} \left(1 - \frac{\Delta_2}{4\sqrt{2}t}\right). \quad (13)$$

Вследствие очень малой ширины полоски по сравнению с глубиной проникновения магнитного поля сверхпроводящий диамагнитный отклик пленки оказывается сильно подавлен. По этой причине отклик (13) близок к орбитальному диамагнетизму полоски в состоянии нормального металла (первое слагаемое в (13)). Малая сверхпроводящая поправка, описываемая вторым слагаемым в (13), имеет парамагнитный знак. Знак малой сверхпроводящей поправки зависит от ориентации пленки и для (10) границ оказывается диамагнитным.

В отличие от случая двумерной (11) пленки (полоски), при рассмотрении трехмерных пленок имеются не одна, а две компоненты квазиимпульса $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_y, k_z)$, параллельные плоскости пленки, по которым следует вести суммирование при нахождении самосогласованных решений и локальной плотности состояний. Аналогичный приведенному выше расчет свойств сверхпроводящей пленки (111) из трех атомных слоев простой кубической решетки показывает, что основные полученные выше результаты сохраняются и в трехмерном случае. Для трехслойной (111) пленки простой кубической решетки $\Delta_1 = \Delta_3$, а энергетический спектр получается из выражений для спектра двумерной (11) полоски после замены $d_1^2(k_y) \rightarrow |d_3(\mathbf{k}_{\parallel})|^2$, где $d_3(\mathbf{k}_{\parallel}) = t [1 + \exp(ik_y d) + \exp(ik_z d)]$ и $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_y, k_z)$, $d = a\sqrt{2}$. В результате минимумы двумерных дисперсионных зон сверхпроводящей пленки, лежащие вблизи поверхности Ферми, расположены при $k_y = -k_z = \pm 2\pi a/3$. Как и в двумерном случае, наличие

бездисперсионной моды связано с отсутствием перекоков квазичастиц вдоль границ пленки из-за отсутствия ближайших соседей в (111) плоскости простой кубической решетки. После интегрирования по двум компонентам квазиимпульса пики в плотности состояний сверхпроводящей пленки, связанные с максимумами или минимумами дисперсионных зон, оказываются полностью размыты. В то же время седловые точки в дисперсионной зависимости энергии приводят к логарифмическому поведению соответствующих пиков в локальной плотности состояний. К таким пикам в плотности состояний приводят седловые точки при $\mathbf{k}_{\parallel} = (\pm\pi/\sqrt{2}a, \pm\pi/\sqrt{2}a)$, которые имеются у дисперсионных зон (111) пленки в нормальном металлическом состоянии.

Отличие между конкретными выражениями для $d_1(k_y)$ и $d_3(\mathbf{k}_{\parallel})$ приводит к более громоздким, по сравнению с (6) и (7), выражениям для собственных трехкомпонентных функций $\hat{u}_{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel})$, $\hat{v}_{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel})$, отвечающих дисперсионным модам в трехслойной трехмерной пленке. Это приводит и к более громоздкому, по сравнению со случаем двумерной (11) пленки, описанию вклада дисперсионных мод в уравнение самосогласования. Бездисперсионная мода имеет такую же энергию, как и в двумерном случае, $E_1 = \Delta_1$, и отвечающие ей собственные волновые функции по-прежнему обращаются в нуль на центральном атомном слое $u_2(\mathbf{k}_{\parallel}) = v_2(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0$. При этом волновые функции на крайних атомных слоях теперь комплексны и определяются выражениями $u_1(\mathbf{k}_{\parallel}) = -u_3(\mathbf{k}_{\parallel})e^{-2i\beta(\mathbf{k}_{\parallel})} = -v_1(\mathbf{k}_{\parallel}) = v_3(\mathbf{k}_{\parallel})e^{-2i\beta(\mathbf{k}_{\parallel})} = 1/2e^{-2i\beta(\mathbf{k}_{\parallel})}$, $\tan \beta(\mathbf{k}_{\parallel}) = (\sin(k_y d) + \sin(k_z d)) (1 + \cos(k_y d) + \cos(k_z d))^{-1}$. При тех же условиях, что и в двумерном случае, бездисперсионная ветвь доминирует в уравнении самосогласования для Δ_1 , а соотношения $\Delta_{10} \approx g/2$, $T_c \approx g/4$ оказываются без изменений применимы к рассматриваемой трехмерной пленке.

Характеристики сверхпроводящей пленки при наличии и при отсутствии в ней бездисперсионной низкоэнергетической моды существенно различаются. Это видно, например, из сравнения полученных выше результатов со свойствами двумерной сверхпроводящей пленки из трех атомных слоев с (10) ориентацией границ. В последнем случае все состояния квазичастиц являются дисперсионными, а одно из них лежит вдали от поверхности Ферми при всех значениях $-\pi/a < k_y < \pi/a$. Поэтому в сверхпроводящем спаривании участвуют только квазичастицы, заселяющие четыре из шести ветвей возбуждений. Дисперсия двух существенных ветвей возбуждений с положительными энергиями имеет вид

$$E_1(k_y) = (\Delta_1^2 + d_2^2(k_y))^{1/2}, \quad E_2(k_y) = \frac{1}{2} \left\{ 8t^2 + 4d_2^2(k_y) + 2\Delta_1^2 + 2\Delta_2^2 - 2[(\Delta_1^2 - \Delta_2^2)^2 + 8t^2(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 32t^2 d_2^2(k_y)]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (14)$$

Энергии $E_1(k_y)$ и $E_2(k_y)$ лежат вблизи поверхности Ферми в окрестностях $k_y a = \pm\pi/2$ и $k_y a = \pm\pi/4, \pm 3\pi/4$, соответственно (см. рис.2). Из

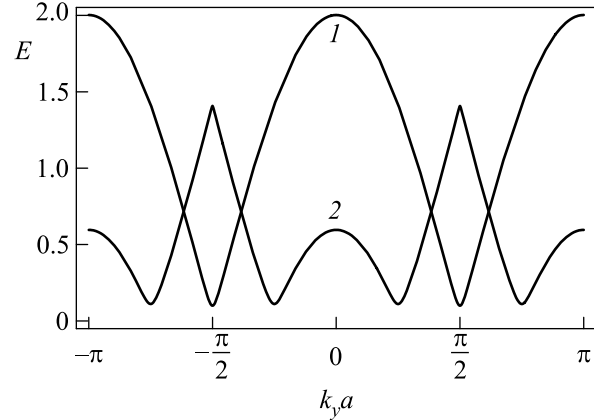


Рис.2. Энергии $E_{1,2}(k_y) > 0$ как функции компоненты k_y волнового вектора для (10) пленки с параметрами $t = 1$, $\Delta_1 = 0.1$, $\Delta_2 = 0.122$

приближенного решения уравнений самосогласования следует:

$$\Delta_{10} \approx 2E_c \exp\left(-\frac{0.78\pi t}{g}\right), \quad \Delta_{20} \approx 1.22\Delta_{10}, \quad (15)$$

$$T_c \approx \frac{E_c}{2} \exp\left(-\frac{0.78\pi t}{g}\right), \quad \frac{2\Delta_{10}}{T_c} \approx 8. \quad (16)$$

Зависимости критической температуры и параметра порядка от константы связи для (10) пленки являются неаналитическими и качественно близки к имеющим место в объемном образце (а также в (11) пленках с четным числом атомных слоев), хотя значение $2\Delta_0/T_c$ в (10) пленке оказывается существенно больше объемного. Эти зависимости контрастируют с полученными результатами для (11) пленок с нечетным числом слоев, обусловленными присутствующими там низкоэнергетическими бездисперсионными состояниями квазичастиц. Наиболее существенно, что критическая температура $T_c \approx g/4$, найденная выше для пленки с (11) границами, может оказаться гораздо выше критической температуры (10) пленки, описываемой формулой (16).

В заключение кратко обсудим на основе развитой выше теории экспериментальные результаты работы [17] по сверхпроводимости ультратонких Pb(111)

пленок. В отличие от простой кубической решетки, в (111) плоскостях ГЦК кристаллической решетки массивного образца свинца имеются ближайшие соседи и перескоки по ним вполне возможны. Большой период кубической решетки и реконструкция поверхности кремниевой подложки Si(111)7 × 7, на которой эпитаксиально выращена монокристаллическая пленка Pb(111) [17], индуцируют напряжения и искажения в исходной ГЦК структуре пленки. В результате кристаллический период в атомных слоях тонкой пленки оказывается увеличен, перекрытие волновых функций между ближайшими узлами в слоях уменьшено, а соответствующие перескоки квазичастиц вдоль границ пленки до некоторой степени подавлены. Если это подавление невелико и движение электронов по ближайшим соседям вдоль границ (111) пленки не отличается радикально от перескоков между атомными слоями, рассмотренные выше моды с аномально слабой дисперсией отсутствуют и тогда наблюдаемая сверхпроводимость возникает целиком за счет дисперсии нескольких двумерных зон, которые в некоторой области волновых векторов расположены вблизи поверхности Ферми. Это согласуется и с найденной в [17] корреляцией между поведением T_c при изменении числа слоев в Pb(111) пленке и близостью к поверхности Ферми одного из пиков в плотности состояний квазичастиц выше T_c . Положение таких пиков, как мы полагаем, связано не с обсуждаемым в [17] положением дискретных бездисперсионных уровней (поскольку их в пленке нет), а со значением энергий дисперсионных ветвей спектра в имеющихся у них при $\mathbf{k}_{\parallel} = (\pm\sqrt{2}\pi/a, \pm\sqrt{2}\pi/a)$ седловых точках. Наши расчеты показывают близкое к наблюдаемому в [17] расположение таких пиков по энергии в зависимости от числа атомных слоев для заполнения состояний, отвечающего $\mu \approx t$.

Представляет также интерес возможность сильного подавления перескоков вдоль границы пленки, хотя прямых указаний на реализацию этого в обсуждаемом эксперименте нет. Значительное подавление перескоков вдоль границ пленки может привести к возникновению низкоэнергетических мод с аномально слабой дисперсией, которые и в трехмерном случае приводят к хорошо выраженным пикам в плотности состояний и к заметному различию в свойствах пленок с четным и нечетным числом атомных слоев. С учетом обсуждаемой в [17] дополнительной фазы в рассеянии квазичастиц от границы с подлож-

кой, слабодисперсионная низкоэнергетическая мода могла бы появиться в пленках как с нечетным числом атомных слоев, так и с четным, в зависимости от эффекта аккумуляции фазы.

Авторы благодарны С.Е. Коршунову и М.В. Фейгельману за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 05-02-17175.

1. P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959).
2. J. M. Blatt and C. J. Thompson, Phys. Rev. Lett. **10**, 332 (1963).
3. B. Abeles, R. W. Cohen, and G. W. Cullen, Phys. Rev. Lett. **17**, 632 (1966).
4. M. Strongin, O. F. Kammerer, J. E. Crow et al., Phys. Rev. Lett. **21**, 1320 (1968).
5. J. M. Dickey and A. Paskin, Phys. Rev. Lett. **21**, 1441 (1968).
6. M. Strongin, R. S. Thompson, O. F. Kammerer and, J. E. Crow, Phys. Rev. B **1**, 1078 (1970).
7. M. Yu, M. Strongin and A. Paskin, Phys. Rev. B **14**, 996 (1976).
8. V. L. Ginzburg and D. A. Kirzhnits (Eds), *High-Temperature Superconductivity*, New York: Consultants Bureau, 1982.
9. A. E. White, R. C. Dynes, and J. P. Garno, Phys. Rev. B **33**, 3549 (1986).
10. H. M. Jaeger, D. B. Haviland, B. G. Orr, and A. M. Goldman, Phys. Rev. B **40**, 182 (1989).
11. Jan von Delft and D. C. Ralph, Phys. Rep. **345**, 61 (2001).
12. V. M. Galitski and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **63**, 174506 (2001).
13. D.-A. Luh, T. Miller, J. J. Paggel, and T.-C. Chiang, Phys. Rev. Lett. **88**, 256802 (2002).
14. A. Frydman, O. Naaman, and R. C. Dynes, Phys. Rev. B **66**, 052509 (2002).
15. Y. Guo, Y.-F. Zhang, X.-Y. Bao et al., Science **306**, 1915 (2004).
16. K. A. Parendo, K. H. Sarwa, B. Tan et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 197004 (2005).
17. D. Eom, S. Qin, M.-Y. Chou, and S. K. Shih, Phys. Rev. Lett. **96**, 027005 (2006).
18. J. Vidal, B. Douçot, R. Mosseri, and P. Butaud, Phys. Rev. Lett. **85**, 3906 (2000).
19. A. M. Bobkov, L.-Y. Zhu, S.-W. Tsai et al., Phys. Rev. B **70**, 144502 (2004).