

Szupravezető heteroszerkezetek kvázirészecske spektruma

Csire Gábor

Témavezetők:

Prof. Cserti József
Eötvös Loránd Tudományegyetem

Dr. Újfalussy Balázs
Wigner Fizikai Kutatóközpont



Ph.D. Tézisfüzet

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Fizika Doktori Iskola

A Fizika Doktori Iskola vezetője: Prof. Tél Tamás

Statisztikus fizika, biológiai fizika és kvantumrendszerek fizikája program

A program vezetője: Prof. Kürti Jenő

Budapest, 2017

1. Bevezetés

A fém-szupravezető mesterséges kompozit anyagok előállítása és vizsgálata manapság ismét az érdeklődés középpontjába került. A modern rétegnövesztési technikákkal tiszta szupravezető-fém többrétegek hozhatók létre. Az ilyen határrétegekben a szupravezető anyagokra jellemző korrelációk figyelhetők meg a normál fémekben is az Andreev szórás következtében, melynek során az elektron (melynek energiája a szupravezető tiltott sáv tartományába esik) koherens módon alakul át lyukká és fordítva, miközben a szupravezetőben egy Cooper-pár keletkezik. Ez a jelenség kontrollálja a transzporttulajdonságokat szupravezető-fém heteroszerkezetekben és teszi lehetővé a proximity-effektus mikroszkopikus értelmezését. Ismert, hogy az Andreev szórás következtében a normál fémekben ún. Andreev-állapotok alakulnak ki. Azonban kérdés hogy ezen állapotoknak milyen a disperziós relációja, és az milyen kapcsolatban áll a normál állapotú sáv szerkezettel.

Azon kísérletekben amikor a szupravezető vastagsága a ránövesztett fém vastagságánál lényegesen nagyobb, azt tapasztalták hogy a rendszer szupravezető átmeneti hőmérséklete lineárisan változik a normál állapotú fém vastagságának függvényében.

Azonban, amikor mind a szupravezető, mind a normál fém néhány atomi rétegből áll, egy új jelenséget figyeltek meg a kísérletekben. A rendszer szupravezető átmeneti hőmérséklete nőtt néhány normál fém atomi réteget növesztve szupravezetőre. Míg a klasszikus proximity effektus során a normál fém csökkenti a szupravezetőben a szupravezető rendparaméter értékét, itt pont az ellentétes hatás figyelhető meg, ezért a jelenség az inverz proximity effektus nevet kapta.

A dolgozat fő célja az volt, hogy kidolgozzunk egy olyan eljárást, amely lehetővé teszi ezen jelenségek kvantitatív és anyagspecifikus vizsgálatát.

Szupravezető tömbi rendszerekre általánosították és sikeresen alkalmazták a sűrűség-funkcionál elméletet, amely a Kohn-Sham-Bogoljubov-de Gennes egyenletekre vezet. Az elmélet nagy pontossággal jósolja meg a szupravezető tiltott sáv és átmeneti hőmérséklet értékét. A Kohn-Sham-Bogoljubov-de Gennes egyenletek megoldására ezt megelőzően az LMTO (Linear Muffin-Tin-Orbital) módszert dolgozták ki, ami viszont csak tömbi rendszerekre alkalmazható.

A szupravezető-normál fém többréteg rendszer leírását is ezen egyenletekre alapozzuk. A többréteg rendszer geometriai modelljét két dimenzióban translációinvariáns rétegek-

ből építhetjük föl. A Screened Korringa-Kohn-Rostoker (Green függvényes) sávszerkezet-számítási eljárást általánosítva a szupravezető állapotra egy általános, tetszőleges – akár félvégtelen – geometriájú többréteges rendszerben kiszámolhatjuk a töltéshordozók diszperziós relációját, az állapotsűrűségeket, a kötött állapotok kötési energiáját, a szupravezető rendparamétert és sok más fizikai tulajdonságot. A kicserélődési korrelációs energiában figyelembe véve az elektron-fonon csatolást (ami a McMillan-Gaspari-Gyórfy elméleten keresztül számolható) az elmélet teljesen paramétermentessé tehető.

2. Tézispontok

1. A szupravezető-normál fém többréteg rendszer leírását a Kohn-Sham-Bogoliubov-de Gennes (KSBdG) egyenletre alapoztuk. Levezettem a KSBdG egyenletek skalár-relativisztikus alakját, amely a relativisztikus korrekciók közül a tömegnövekedési és Darwin tagokat veszi figyelembe (a spin-pálya kölcsönhatást nem). A többréteg rendszer geometriai modelljének a figyelembe vételéhez a Screened Korringa-Kohn-Rostoker sávszerkezet-számítási eljárást általánosítottam (a skalár-relativisztikus) KSBdG egyenletek megoldására. Kidolgoztam az egyszórás probléma megoldását az Andreev szórás figyelembe vételével. A dolgozat legfontosabb formális eredménye, hogy a KSBdG-Hamiltoni Green-függvényét meghatározó Faulkner-Stocks formulát levezettem az Andreev szórást is figyelembe vevő többszörös szórás elméletből. Elkészítettem erre az új elméletre alapozott, a szupravezető – normál állapotú fém heteroszerkezetek kvázirészecske spektrumának anyagspecifikus számítására alkalmas új számítógépes eljárást. Megmutattam, hogy a Faulkner-Stocks formula funkcionális alakja a teljesen relativisztikus tárgyalásmód során sem változik.
2. A kifejlesztett KSBdG-SKKR sávszerkezet-számítási eljárás segítségével megvizsgáltam a kísérletekben szereplő Nb/Au heteroszerkezetek (ahol a szupravezető hossza a koherenciahossz nagyságrendjébe esik, ún. vastag szupravezetők) kvázirészecske spektrumát. A szupravezetési tulajdonságot úgy modelleztem, hogy a nióbiumra a párpotenciál (melynek értéke tömbi rendszer esetén szupravezető tiltott sáv nagyságával egyezik meg) irodalomból ismert kísérleti értéket alkalmaztam, míg az arany esetén nulla értéket feltételeztem. Megállapítottam, hogy normál állapotban az ilyen rendszerekben a kvantumos bezártságra jellemző (kvantumvölgy) állapotok vannak. Meghatároztam, hogy ekkor a normál állapotú sávszerkezetből hogyan lehet származtatni a szupravezető állapotra jellemző kvázirészecske spektrumot: a normál kvantumvölgy állapotokat a Fermi szintre meg kell tükrözni és minden elektron-

és lyuk-szerű sáv találkozásánál egy minigapet kell felnyitni a tömbi szupravezető tiltott sáv tartományában. Ez az eljárás lehetővé teszi a normál fémekben megjelenő Andreev állapotok diszperziójának meghatározását. Megmutattam, hogy más rendszerek esetén amikor nincsenek kvantumvölgy állapotok, akkor ez az egyszerű kép nem alkalmazható.

3. A normál fémekben megjelenő indukált tiltott sáv adott rétegvastagságnál nem változott a különböző rétegekben (atomi rétegről atomi rétegre haladva ugyanaz maradt), de a fedőrétegek vastagságát növelve lecsengett. Azonban szupravezető rendparaméterhez köthető egy rétegre jutó anomális töltés már jól mutatta a hagyományos, rétegfüggő proximity effektust, amely korábbi irodalmi eredményekkel is egyezést mutatott (a határrétegtől mért távolsággal fordítottan arányosan cseng). Megvizsgáltam a rácsszerkezet szerepét is és azt találtam, hogy ezen alapvető tulajdonságok megegyeznek tércentrált és lapcentrált arany fedőrétegek esetén is.
4. Meghatároztam az anomális spektrálfüggvény alapján is a diszperziós relációt. Megállapítottam, hogy ez a mennyiség a Bloch spektrálfüggvényhez hasonlóan megadja a kvázirészecske spektrumot, azonban több információt tartalmaz a vizsgált rendszerről. Azt tapasztaltam, hogy az anomális spektrálfüggvény mind az Andreev reflexióra utaló jeleket, mind az állapotok elektron-lyuk karakterével kapcsolatos információt is hordoz.
5. Megvizsgáltam a felületi és határréteg állapotok szerepét a Nb/Au heteroszerkezetekben. Azt találtam, hogy a határréteg állapotok energiájában nagyobb tiltott sáv nyílik, mint a kvantumvölgy állapotok esetén. Ezen állapotok elektron-lyuk karakterét megvizsgálva azt találtam, hogy itt a legnagyobb a keveredés. Tehát a határrégbeli kvázirészecskék közelítőleg ugyanannyi elektron-szerű és lyuk-szerű állapotból tevődnek össze. Ezen tulajdonságok annak a következményei, hogy a határréteg állapotok vesznek részt legintenzívebben az Andreev szórásban. Ezzel szemben a normál fém felületi állapotai nem vesznek részt az Andreev szórási folyamatban. Így – ezzel összhangban – azt találtam, hogy ezen állapotok energiájában nem alakul ki tiltott sáv és tisztán elektron vagy lyuk karaktert mutatnak.
6. Kidolgoztam egy ab-initio számolásra alapuló egyszerűsített modellt, ami lehetővé teszi hogy vastag szupravezető – normál állapotú fém heteroszerkezetekre a szupravezető átalakulási hőmérsékletet meghatározzuk. A modellben az elektron-fonon kölcsönhatási paramétert egy Heaviside-függvénnyel közelítettem. A kísérleti eredményekkel nagyon jó egyezést kaptam Nb/Au heteroszerkezetek esetén. Az eljárás

más heteroszerkezetekre történő alkalmazásával predikciót tettem más heteroszerkezetek szupravezető átalakulási hőmérsékletére is.

7. Azokban az esetekben amikor a szupravezető is vékony, szükséges az elektron-fonon kölcsönhatás számolása is, amivel az elmélet teljesen ab -initio válik. Ehhez a McMillan-Gaspari-Györffy elmélet alkalmazását kiterjesztettem heteroszerkezetekre, és ezt összekapcsoltam a KSBdG egyenletekkel a kicserélődési energián keresztül. Az elméletben szereplő McMillan-Hopfield paramétert szintén az SKKR módszer segítségével a Gaspari-Györffy formula felhasználásával számoltam ki, míg a rétegfüggő fonon-spektrumot stockholmi kooperáció keretén belül Dr. Stephan Schönecker számolta a VASP programcsomag használatával. Így a KSBdG egyenleteket most már teljesen önkonzisztensen megoldva, meghatároztam a kritikus hőmérsékleteket különböző vastagságú Nb(100) és Nb(110) vékonyrétegekre. Az eljárás lehetővé tette hogy a szupravezetésben kulcsfontosságú, leárnýékolt Coulomb kölcsönhatást jellemző paramétert is meghatározzam indirekt úton. A két különböző nióbbium felületre eltérő viselkedést találtam. Megállapítottam, hogy amikor nyitottabb a felület, a fonon spektrumot az alacsony frekvenciás rezgések dominálják, és emiatt az elektron-fonon kölcsönhatás erősebb lesz, ami a kritikus hőmérsékletet növeli.
8. Az eljárást alkalmazva a Nb/Au vékonyrétegekre egy inverz proximity effektus volt megfigyelhető (kísérletileg Pb/Ag rendszerben sikerült korábban kimutatni ezt a jelenséget). Ultravékony nióbbiumra egy arany réteget növesztve a rendszer kritikus hőmérséklete nő. Megmutattam, hogy a jelenség oka elsősorban az, hogy a mintában az effektív elektron-fonon kölcsönhatás megnő amikor egy arany réteget hozzáadunk.

3. Tézispontokhoz kapcsolódó publikációk

- Gábor Csire, Balázs Újfalussy, József Cserti, Balázs Györffy, Multiple scattering theory for superconducting heterostructures Phys. Rev. B **91**, 165142 (2015).
- Gábor Csire, József Cserti, Istvan Tüttő, Balázs Újfalussy, Prediction of superconducting transition temperatures of heterostructures based on the quasiparticle spectrum, Phys. Rev. B **94**, 104511 (2016).
- Gábor Csire, Stephan Schönecker, Balázs Újfalussy, First-principles approach to

thin superconducting slabs and heterostructures, Phys. Rev. B **94**, 140502(Rapid Communication) (2016).

- Gábor Csire, József Cserti, Balázs Újfalussy, First principles based proximity effect of superconductor – normal metal heterostructures, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 495701 (2016).