Физика низких температур, 1995, т. 21, № 2, с. 183–192 УДК 538.911;538.945

К феноменологической теории сверхпроводимости, учитывающей пространственную симметрию сверхпроводников

Ю. М. Полуэктов

Национальный научный центр. Харьковский физико-технический институт, Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1

Статья поступила в редакцию 8 апреля 1994 г., после переработки 5 октября 1994 г.

Феноменологический подход к теории сверхпроводимости обобщен с учетом пространственной симметрии кристаллических сверхпроводников. Такое обобщение дает возможность исследовать сверхпроводящие переходы, при которых наряду с изменением поворотной симметрии возможно также нарушение трансляционной симметрии в распределении плотности сверхпроводящих электронов при неизменной симметрии кристаллической решетки. Предложена методика нахождения базисных функций неприводимых представлений пространственной группы с учетом как распределения центров масс куперовских пар по кристаллу, так и внутренней симметрии пар. Найден общий вид термодинамического потенциала сверхпроводника, инвариантного относительно пространственной группы симметрии нормального состояния. Показано, что при наличии в термодинамическом потенциале сверхпроводника линейных по градиентам параметра порядка членов при определенных условиях возможно существование сверхпроводящей модулированной структуры.

Феноменологічний підхід до теорії надпровідності узагальнено з урахуванням просторової симетрії кристалічних надпровідників. Таке узагальнення дає можливість досліджувати надпровідні переходи, при яких поряд із зміною поворотньої симетрії можливо також порушення трансляційної симетрії в розподілі густини надпровідних електронів при незмінної симетрії кристалічної гратки. Запропоновано методику находження базисних функцій незвідних зображень просторової групи з урахуванням як розподілу центрів мас куперовських пар по кристалу, так і внутрішньої симетрії пар. Знайдено загальний вид термодинамічного потенціалу надпровідника, інваріантного відносно просторової групи симетрії нормального стану. Показано, що у разі присутності в термодинамічному потенціалі надпровідника лінійних по градієнтам параметра порядку членів з'являється можливість існування при деяких умовах надпровідної модульованої структури.

Феноменологическое описание сверхпроводимости, предложенное Гинзбургом и Ландау [1], широко и плодотворно используется для решения многих конкретных задач. Значение этой теории стало общепризнанным после ее микроскопического обоснования, данного Горьковым [2]. В то же время теория Гинзбурга—Ландау, как известно, имеет свои ограничения и использует ряд приближений. Одним из приближений, на которое до недавнего времени обращалось мало внимания, является пренебрежение кристаллической структурой сверхпроводника. При теоретическом исследовании сверхпроводимости указанное приближение во многих случаях несомненно оправданно. Особенно естественным было пренебрежение кристалличностью сверхпроводника на ранних этапах теоретического изучения сверхпроводимости. Накопление экспериментальных данных и открытие сверхпроводников, имеющих сложное кристаллическое строение, вызвало необходимость учета их кристаллической структуры и симметрии. В связи с возможностью нетривиальных типов спаривания в сверхпроводниках с тяжелыми фермионами Андерсоном [3], а также Воловиком и Горьковым [4] с помощью привлечения теории групп была изучена точечная симметрия кристаллических сверхпроводников. В подходе, развитом в работе [5], исследование сверхпроводимости в кристаллах основано на использовании неприводимых представлений (НП) точечных групп и теории фазовых переходов. Симметрийная классификация возможных состояний в высокотемпературных сверхпроводниках приведена в [6]. Обзор работ по теории сверхпроводников с учетом их кристаллической симметрии применительно к системам с тяжелыми фермионами сделан в [7], а к высокотемпературным сверхпроводникам — в [8].

Следствием учета кристаллической симметрии сверхпроводника является то, что от неприводимого представления, по которому происходит сверхпроводящий переход, и его размерности зависит как число комплексных компонент параметра порядка (ПП), так и вид соответствующих уравнений Гинзбурга—Ландау. Число компонент ПП увеличивается, если сверхпроводник содержит несколько групп электронов, участвующих в сверхпроводимости (многозонные сверхпроводники). Двухзонные сверхпроводники тетрагональной и орторомбической симметрии рассмотрены в [9].

© Ю. М. Полуэктов, 1995

В перечисленных выше работах учитывалась точечная симметрия сверхпроводника и не принималась во внимание симметрия относительно трансляций на векторы решетки. Между тем теория фазовых переходов второго рода, на базе которой сформулирована теория сверхпроводимости Гинзбурга—Ландау, позволяет исследовать структурные фазовые переходы, связанные с изменением пространственной симметрии решетки [10,11]. Объединение подхода, развитого в теории структурных переходов, с подходом Гинзбурга—Ландау к теории сверхпроводимости позволяет учесть влияние пространственной симметрии кристаллического сверхпроводника на его сверхпроводящие свойства. Учет пространственной симметрии сверхпроводника дает возможность изучать гораздо более широкий класс возможных переходов, при которых наряду с поворотной симметрией может изменяться также трансляционная симметрия в распределении плотности сверхпроводящих электронов на фоне неизменной симметрии кристаллической решетки. Как и в теории структурных переходов, предполагается, что сверхпроводящие переходы происходят по звездам, лучи которых лежат в изолированных особых точках зоны Бриллюэна (точках Лифшица).

В начале статьи рассмотрена структура сверхпроводящего ПП при учете пространственной периодичности кристалла и построена методика нахождения базисных функций НП пространственных (федоровских) групп, по которым может быть разложен сверхпроводящий параметр порядка. Затем изложен общий подход к построению термодинамических потенциалов (ТП) типа Гинзбурга–Ландау с учетом пространственной симметрии. Рассмотрено сверхпроводящее модулированное состояние, возникновение которого возможно при наличии в ТП сверхпроводника членов линейных по градиентам ПП (инвариантов Лифшица).

В данной работе использован феноменологический подход. Однако для установления вида ПП привлечем некоторые соображения из микроскопической теории. Как известно [12], явление сверхпроводимости связано с появлением в системе проводящих электронов отличных от нуля аномальных квазисредних $\langle\psi_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\rangle$, $\langle\psi^+_\sigma(\mathbf{r})\psi^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\rangle$, где $\psi^+_\sigma(\mathbf{r})$, $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ — операторы рождения и уничтожения электронов в пространственной точке $\mathbf{r}$ с проекцией спина σ. Таким образом, в качестве исходного параметра порядка сверхпроводника может быть выбрана матрица в спиновом пространстве

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\psi_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\rangle \ , \qquad (1)$$

являющаяся функций координат. Из условия антикоммутации фермиевских операторов ψ_σ, ψ^+_σ следует, что

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\Delta_{\sigma'\sigma}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \ . \qquad (2)$$

Для построения феноменологической теории сверхпроводимости с произвольным типом спаривания достаточно постулировать, что сверхпроводимость описывается параметром порядка (1), обладающим свойством (2). В дальнейшем удобно перейти к переменным

$$\vec{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' \ , \quad \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \ , \qquad (3)$$

определяющим относительное положение электронов в паре и положение ее центра масс. В новых переменных имеем

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\psi_\sigma(\mathbf{R} + \frac{\vec{\rho}}{2})\psi_{\sigma'}(\mathbf{R} - \frac{\vec{\rho}}{2})\rangle = \Delta'_{\sigma\sigma'}(\vec{\rho}, \mathbf{R}) \ . \qquad (4)$$

Из условия (2) следует свойство симметрии

$$\Delta'_{\sigma\sigma'}(\vec{\rho}, \mathbf{R}) = -\Delta'_{\sigma'\sigma}(-\vec{\rho}, \mathbf{R}) \ . \qquad (5)$$

В дальнейшем будем иметь дело с параметром порядка $\Delta_{\sigma\sigma'}(\vec{\rho}, \mathbf{R})$, опуская в его обозначении знак штриха. Выполнив преобразование Фурье по переменным $\vec{\rho}$ и (или) R, получаем иные представления параметра порядка: $\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{R})$, $\Delta_{\sigma\sigma'}(\vec{\rho}, \mathbf{Q})$, $\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{Q})$. В данной работе будем использовать $\vec{\rho}$ – R- и k – R-представления ПП. Для последнего справедливо соотношение, аналогичное (5):

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{R}) = -\Delta_{\sigma'\sigma}(-\mathbf{k}, \mathbf{R}) \ . \qquad (6)$$

При последующем анализе используются элементы теории пространственных групп (ПГ), необходимые сведения о которых содержатся, например, в [11,13–17]. Общий вид элемента g пространственной группы G в обозначениях Вигнера—Зейтца следующий:

$$g = \{ h | \vec{\tau} + \mathbf{t} \} \ , \qquad (7)$$

где h — поворотный элемент; $\vec{\tau}$ — сопровождающая элемент h трансляция, равная либо нулю, либо составляющая 1/2, 1/3 или 1/4 долю ребра ячейки Браве; $\mathbf{t} = \sum_i n_i \mathbf{t}_i$ — вектор трансляции, $\mathbf{t}_i$ — элементарные трансляции, n_i — целые числа, $i = 1, 2, 3$. В данной работе предполагается, что под действием оператора симметрии $T(g)$, соответствующего элементу g и действующего в пространстве функций [14], координатная и спиновая части параметра порядка при поворотах преобразуются совместно. Последнее является следствием предположения о «вмороженности» спинов в решетку в ре-

зультате спин-орбитального взаимодействия. В итоге имеем

$$T(g)\Delta_{\sigma\sigma'}(\rho, \mathrm{R}) =$$

$$= \sum_{\sigma_1, \sigma_1' = \pm 1} D^{(1/2)}_{\sigma\sigma_1}(h)\Delta_{\sigma_1\sigma_1'}(h^{-1}\vec{\rho}, g^{-1}\mathrm{R})D^{(1/2)}_{\sigma_1'\sigma'}(h) \ , \quad (8)$$

где $D^{(1/2)}_{\sigma\sigma'}(h)$ — матрица конечных вращений [14]; $(g^{-1}\mathrm{r})_i = R^{-1}_{ij}(h)(\mathrm{r} - \vec{\tau} - \mathrm{t})_j$; $R_{ij}(h)$ — матрица пространственного преобразования, соответствующая элементу h. Отметим, что вектор $\vec{\rho} = \mathrm{r} - \mathrm{r}'$, очевидно, нечувствителен к трансляциям, поэтому в (8) учтено соотношение $g^{-1}\vec{\rho} = h^{-1}\vec{\rho}$. Аналогично с учетом замены $\vec{\rho} \to \mathrm{k}$ преобразуется $\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathrm{k}, \mathrm{R})$.

Если в (8) отвлечься от преобразования по переменной R, то (8) даст преобразование волновой функции куперовской пары в системе центра масс под действием элементов точечной группы G_0 , образованной поворотными частями элементов пространственной группы G. Именно симметрия относительно таких преобразований исследовалась ранее в работах, посвященных учету кристаллической симметрии сверхпроводников. Если же отвлечься в (8) от преобразований по относительной координате $\vec{\rho}$ и спиновым индексам, то соотношение (8) даст закон преобразования распределения центров масс куперовских пар по кристаллу при вращениях и трансляциях. Во втором случае ситуация фактически соответствует подходу теории структурных фазовых переходов Ландау [10,11], при котором исследуется симметрия распределения зарядов, не имеющих внутренней структуры. В рассматриваемом случае куперовские пары обладают как симметрией относительно их распределения по кристаллу, так и внутренней симметрией волновой функции пары. В общем случае разделить эти виды симметрии нельзя и необходимо рассматривать полную симметрию ПП $\Delta_{\sigma\sigma'}(\vec{\rho}, \mathrm{R})$ относительно элементов пространственной группы. Заметим, что возможное понижение пространственной симметрии в данном случае происходит не только в результате деформации плотности распределения электронов по кристаллу, но и в результате образования куперовских пар со сложным типом спаривания.

Особенно наглядную и привычную физическую трактовку допускает параметр порядка в k – R-представлении. Величину $\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathrm{k}, \mathrm{R})$ можно рассматривать как амплитуду вероятности куперовской пары электронов с импульсами k и –k, центр массы которой находится в точке R кристалла. Дальше ПП будет рассматриваться именно в k – R-представлении.

Подчеркнем, что нами везде рассматривается пространственная симметрия распределения электронов сверхпроводящей подсистемы. Что же касается кристаллической решетки, то ее симметрия в точке сверхпроводящего перехода из нормальной фазы, как правило, не меняется, хотя фазовый переход в электронной системе оказывает воздействие на устойчивость решетки. Взаимное влияние структурных и сверхпроводящих переходов при учете точечной симметрии сверхпроводника исследовалось в [18].

В параметре порядка, представленном в матричной форме, удобно выделить синглетную Δ_s и триплетную $\vec{\Delta}_t$ части:

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathrm{k}, \mathrm{R}) = i\Delta_s(\mathrm{k}, \mathrm{R})\sigma^y_{\sigma\sigma'} + i\vec{\Delta}_t(\mathrm{k}, \mathrm{R})(\vec{\sigma}\sigma^y)_{\sigma\sigma'} \ , \quad (9)$$

где $\sigma^j_{\sigma\sigma'}$ $(j = x, y, z)$ — матрицы Паули. С учетом (8) действие оператора $T(g)$ на синглетную и компоненты триплетной части ПП приобретает вид

$$T(g)\Delta_s(\mathrm{k}, \mathrm{R}) = \Delta_s(h^{-1}\mathrm{k}, g^{-1}\mathrm{R}) \ , \quad (10\mathrm{a})$$

$$T(g)\Delta_{ti}(\mathrm{k}, \mathrm{R}) = \sum_j \delta_h R_{ij}(h)\Delta_{tj}(h^{-1}\mathrm{k}, g^{-1}\mathrm{R}) \ , \quad (10\mathrm{б})$$

где $\delta_h = 1$ для элементов, соответствующих чистым поворотам, и $\delta_h = -1$ для элементов, которые являются произведением поворота на инверсию. Из свойства (6) следует, что

$$\Delta_s(\mathrm{k}, \mathrm{R}) = \Delta_s(-\mathrm{k}, \mathrm{R}) \ , \quad (11\mathrm{a})$$

$$\vec{\Delta}_t(\mathrm{k}, \mathrm{R}) = -\vec{\Delta}_t(-\mathrm{k}, \mathrm{R}) \ . \quad (11\mathrm{б})$$

Если инверсия является элементом пространственной группы кристалла, то эти условия позволяют рассматривать синглетное и триплетное спаривания раздельно в зависимости от того, по четному или по нечетному НП происходит фазовый переход. Если же пространственная группа не содержит инверсию, то рассматривать синглетное и триплетное спаривания необходимо совместно [19]. В данной работе исследуется случай, когда группы содержат инверсию.

Согласно общей теории фазовых переходов в кристаллах [10,11,14], параметры порядка (11) могут быть разложены по функциям, преобразующимся по неприводимым представлениям Γ группы пространственной симметрии нормальной фазы:

$$\Delta(\mathrm{k}, \mathrm{R}) = \sum_{\Gamma; m} \eta_m(\Gamma)\psi_m(\Gamma; \mathrm{k}, \mathrm{R}) \ , \quad (12\mathrm{a})$$

$$\vec{\Delta}(\mathrm{k}, \mathrm{R}) = \sum_{\Gamma; m} \eta_m(\Gamma)\vec{\psi}_m(\Gamma; \mathrm{k}, \mathrm{R}) \ . \quad (12\mathrm{б})$$

Здесь индекс m нумерует базисные функции неприводимого представления Γ, а $\eta_m(\Gamma)$ — комплексные коэффициенты. Индексы s и t в $\Delta_s(\mathrm{k}, \mathrm{R})$ и

$\vec{\Delta}_t(\mathrm{k}, \mathrm{R})$ в (12) и последующих формулах опускаем. Из условий (11) следует, что базисные функции в разложении (12) обладают свойствами

$$\psi_m(\Gamma; \mathrm{k}, \mathrm{R}) = \psi_m(\Gamma; -\mathrm{k}, \mathrm{R}) , \qquad (13а)$$

$$\vec{\psi}_m(\Gamma; \mathrm{k}, \mathrm{R}) = -\vec{\psi}_m(\Gamma; -\mathrm{k}, \mathrm{R}) . \qquad (13б)$$

Построение базисных функций рассмотрено ниже. Согласно концепции Ландау [10], фазовый переход происходит по одному определенному физически неприводимому представлению, так что в суммах по Г в разложениях (12) останется по одному слагаемому. Если фазовый переход происходит не по единичному НП, то очевидно, что такой сверхпроводящий переход наряду с нарушением калибровочной инвариантности сопровождается понижением пространственной симметрии распределения сверхпроводящих электронов, поскольку ПП перестает быть инвариантным относительно некоторых элементов ПГ G.

Рассмотрим методику построения базисных функций НП пространственных групп, зависящих от переменных k, R (или $\vec{\rho}$, R) и удовлетворяющих условиям (13). Напомним очень кратко необходимые в данном случае сведения из теории пространственных групп. Неприводимое представление ПГ определяется, во-первых, звездой волнового вектора $\{\mathrm{q}\}$, которая представляет собой совокупность всех неэквивалентных векторов (лучей звезды), получающихся из одного луча действием всех поворотных элементов группы G, и, во-вторых, номером ν малого НП τ_ν. Информацию о НП пространственных групп будем брать из справочника [13]. Важной подгруппой ПГ G является пространственная группа волнового вектора G_q, элементы которой оставляют вектор q неизменным (с точностью до произвольного вектора b обратной решетки). Неприводимые представления ПГ G_q (малые представления) τ_ν отличаются индексом ν. Матрицы НП группы волнового вектора q обозначим $d^{\mathrm{q}\nu}_{\mu\lambda}(g)$, где индексы μ, λ пробегают значения $\lambda, \mu = 1, 2, ..., l_\nu$, а l_ν — размерность малого НП. Базисные функции группы G_q обозначим $\psi^{\mathrm{q}\nu}_\lambda$. Под действием элементов ПГ G, входящих в G_q, эти функции преобразуются друг через друга с неизменным q:

$$T(g)\psi^{\mathrm{q}\nu}_\lambda = \sum_\mu d^{\mathrm{q}\nu}_{\mu\lambda}(g)\psi^{\mathrm{q}\nu}_\mu . \qquad (14)$$

Таким образом, базис НП группы G_q составляет совокупность l_ν функций $\psi^{\mathrm{q}\nu}_1, \psi^{\mathrm{q}\nu}_2, ..., \psi^{\mathrm{q}\nu}_{l_\nu}$. Каждый луч звезды $\{\mathrm{q}\}$ может быть получен действием поворотной части элемента $g_L = \{h_L|\vec{\tau}_L\}$ на заданный волновой вектор: $\mathrm{q}_L = h_L\,\mathrm{q}$, где $L = 2, ..., l_\mathrm{q}$, а l_q — число лучей звезды $\{\mathrm{q}\}$. Элементы g_L, которых имеется $(l_\mathrm{q} - 1)$ штук, считаются выбранными определенным образом. Базисные функции полного неприводимого представления $D^{\{\mathrm{q}\}\nu}$ всей ПГ G можно получить, действуя операторами $T(g_L)$ на базисные функции группы волнового вектора q:

$$\psi^{\mathrm{q}}_1{}^{L\nu} = T(g_L)\psi^{\mathrm{q}\nu}_1 , \quad \psi^{\mathrm{q}}_2{}^{L\nu} = T(g_L)\psi^{\mathrm{q}\nu}_2 , \quad ...,$$
$$\psi^{\mathrm{q}}_{l_\nu}{}^{L\nu} = T(g_L)\,\psi^{\mathrm{q}\nu}_{l_\nu} . \qquad (15)$$

Всего получим $l_\nu \times l_\mathrm{q}$ базисных функций НП $D^{\{\mathrm{q}\}\nu}$. Таким образом, достаточно уметь строить базисные функции группы G_q, поскольку базисные функции всей ПГ найдутся из соотношений (15). Эти функции преобразуются под действием элемента g группы G друг через друга по правилу

$$T(g)\psi^{\mathrm{q}}_\lambda{}^{L\nu} = \sum_{\mu;M} D^{\{\mathrm{q}\}\nu}_{M\mu;L\lambda}(g)\psi^{\mathrm{q}}_\mu{}^{M\nu} , \qquad (16)$$

где $\mu = 1, 2, ..., l_\nu$, $M = 1, 2, ..., l_\mathrm{q}$. Матрица $D^{\{\mathrm{q}\}\nu}(g)$ может быть построена из матриц $d^{\mathrm{q}\nu}(g)$ следующим образом:

$$D^{\{\mathrm{q}\}\nu}_{M\mu;L\lambda}(g) = d^{\mathrm{q}\nu}_{\mu\lambda}(g_M^{-1} g g_L)\Delta(h_M^{-1} h h_L \mathrm{q}\,|\,\mathrm{q}) . \qquad (17)$$

Здесь введен символ

$$\Delta(\mathrm{q}_1\,|\,\mathrm{q}_2) = \sum_\mathrm{b} \delta_{\mathrm{q}_1;\mathrm{q}_2+\mathrm{b}} , \qquad (18)$$

который равен единице, если векторы q_1 и q_2 отличаются на вектор обратной решетки b, и нулю в противоположном случае.

В качестве базисных функций часто выбираются блоховские функции. В нашем случае базисные функции зависят от двух переменных, например k и R (или $\vec{\rho}$ и R), и подчиняются условиям (13). Во избежание возможных недоразумений подчеркнем, что имеется два сорта волновых векторов, с существенно различным физическим смыслом. Вектор k, входящий в качестве аргумента в базисную функцию $\psi(\mathrm{k}, \mathrm{R})$, можно трактовать как квазиимпульс электрона куперовской пары, а волновые векторы q, ..., q_L являются лучами звезды $\{\mathrm{q}\}$ неприводимого представления, по которому происходит фазовый переход, и определяют происходящее при этом изменение трансляционной симметрии распределения сверхпроводящих электронов. Поскольку вектор k изменяется только при вращениях, но не трансляциях, и функция $\psi(\mathrm{k}, \mathrm{R})$ периодична по координатам $\mathrm{R} = (x, y, z)$, базисные функции группы G_q могут быть представлены в виде

$$\psi_\lambda^{q\nu}(k, R) = e^{iqR} u_\lambda^{q\nu}(k, R) , \qquad (19а)$$

$$\vec{\psi}_\lambda^{q\nu}(k, R) = e^{iqR} \mathbf{u}_\lambda^{q\nu}(k, R) , \qquad (19б)$$

где $u_\lambda^{q\nu}(k, R)$, $\mathbf{u}_\lambda^{q\nu}(k, R)$ — периодические по R функции, удовлетворяющие, согласно (13), условиям

$$u_\lambda^{q\nu}(k, R) = u_\lambda^{q\nu}(-k, R) , \qquad (20а)$$

$$\mathbf{u}_\lambda^{q\nu}(k, R) = - \mathbf{u}_\lambda^{q\nu}(-k, R) . \qquad (20б)$$

Псевдовекторную функцию $\mathbf{u}_\lambda^{q\nu}(k, R)$ удобно разложить по аксиальным единичным векторам $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}$, $\mathbf{x}_2 = \mathbf{y}$, $\mathbf{x}_3 = \mathbf{z}$:

$$\mathbf{u}_\lambda^{q\nu}(k, R) = \sum_{m=1}^{3} u_{\lambda m}^{q\nu}(k, R)\mathbf{x}_m , \qquad (21)$$

причем последние определены так, что векторы $\mathbf{e}_\pm = \mp \mathbf{x} + i\mathbf{y}$, $\mathbf{e}_0 = \sqrt{2}\mathbf{z}$ являются собственными функциями оператора спина $S = 1$ и описывают состояния с проекциями $S_z = \pm 1, 0$ на ось z. Согласно (20б),

$$u_{\lambda m}^{q\nu}(k, R) = - u_{\lambda m}^{q\nu}(-k, R) . \qquad (22)$$

Разложим функции $u_\lambda^{q\nu}(k, R)$ и $u_{\lambda m}^{q\nu}(k, R)$ в ряд по степеням проекций вектора k, причем в силу (20), (22), в разложении $u_\lambda^{q\nu}(k, R)$ останутся только четные степени, а в разложении $\mathbf{u}_{\lambda m}^{q\nu}(k, R)$ — только нечетные степени проекции k. Кроме того, поскольку данные функции периодичны по R, разложим их по этой переменной в ряд Фурье. В итоге базисные функции НП τ_ν группы G_q синглетного и триплетного типов примут вид

$$\psi_\lambda^{q\nu}(k, R) =$$

$$= \sum_b \left[A_\lambda^\nu(q + b) + \sum_{ij} A_{\lambda ij}^\nu (q + b) k_i k_j + \ldots \right] e^{i(q+b)R} , \qquad (23а)$$

$$\vec{\psi}_\lambda^{q\nu}(k, R) = \sum_{b;m} \mathbf{x}_m \left[\sum_i A_{\lambda mi}^\nu (q + b) k_i + \right.$$

$$\left. + \sum_{ijk} A_{\lambda mijk}^\nu (q + b) k_i k_j k_k + \ldots \right] e^{i(q+b)R} . \qquad (23б)$$

В неоднородной анизотропной среде, такой как кристалл, состояние пар нельзя классифицировать по их орбитальному моменту. Можно, однако, определить состояния s-, p-, d-типа [7]. Такими состояниями назовем состояния, для которых выполнено соотношение

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(tk, R) = t^l \Delta_{\sigma\sigma'}(k, R) , \qquad (24)$$

где $l = 0, 1, \ldots$; t — вещественный множитель. В соответствии с введенным определением первое и второе слагаемые в (23а) описывают спаривания s- и d-типа, а в (23б) — p- и f-типа.

Таким образом, чтобы найти общий вид базисных функций, необходимо знать коэффициенты A_λ^ν, $A_{\lambda ij}^\nu$, $A_{\lambda mi}^\nu$, ... в разложениях (23). Эти коэффициенты могут быть определены из системы линейных алгебраических уравнений. Подставляя (24) в закон преобразования функций (14) и учитывая правила действия оператора $T(g)$ (10), получаем для синглетного случая уравнения

$$A_\lambda^\nu(q + b) = e^{i[h(q+b)]\vec{\tau}} \sum_\mu d_{\mu\lambda}^{q\nu} \left(\{h | \vec{\tau}\} \right) A_\mu^\nu \left(h(q + b) \right) , \qquad (25)$$

а для триплетного —

$$A_{\lambda mi}^\nu(q + b) = e^{i[h(q+b)]\vec{\tau}} \times$$

$$\times \sum_{\mu,i';m'} d_{\mu\lambda}^{q\nu} \left(\{h | \vec{\tau}\} \right) R_{i'i}(h) R_{m'm}(h) \delta_h A_{\mu m'i'}^\nu \left(h(q+b) \right) . \qquad (26)$$

Аналогичные уравнения легко записать для коэффициентов при более высоких степенях k_i. Достаточно, чтобы уравнения (25), (26) удовлетворялись для генераторов точечной группы G_0, образованной поворотными элементами группы G.

Полученные общие выражения для базисных функций позволяют утверждать, что при учете пространственной периодичности кристалла можно построить базисные функции любого синглетного типа (s-, d-, ...) при переходах по каждому из четных НП и базисные функции любого триплетного типа (p-, f-, ...) при переходах по каждому из нечетных НП. Отсюда следует важный вывод о том, что в принципе любое спаривание синглетного типа может реализовываться при переходе по любому НП, и любое спаривание триплетного типа может реализовываться при переходе по любому нечетному НП. При учете только точечной симметрии, когда не принимается во внимание периодичность кристалла, это несправедливо. Например, функция s-типа для точечной группы D_{2h} возможна только при переходе по единичному представлению. Переходы по всем другим четным НП отвечают d-спариванию или более высоким типам спаривания [9]. С учетом же периодичности для звезды $q = 0$ пространственной группы D_{2h}^{18} переход в s-состояние оказывается возможным

и для переходов по НП, отличным от единичного. Простейшие из базисных функций s-типа для представлений τ_1, τ_3, τ_5, τ_7 имеют вид

$$\psi^{\tau}1 = 1\ , \quad \psi^{\tau}3 = \sin\frac{\pi X}{\tau_x}\cos\frac{\pi Y}{\tau_y}\ ,$$

$$\psi^{\tau}5 = \cos\frac{\pi Z}{\tau_z}\ , \quad \psi^{\tau}7 = \sin\frac{\pi X}{\tau_x}\cos\frac{\pi Y}{\tau_y}\cos\frac{\pi Z}{\tau_z}\ ,$$

где τ_x, τ_y, τ_z — половины длин периодов прямой решетки по осям x, y, z.

Найдем общий вид плотности термодинамического потенциала (ТП), учитывающей пространственную симметрию сверхпроводника. Плотность ТП может быть представлена в виде суммы четырех вкладов

$$\Phi = \Phi_2 + \Phi_4 + \Phi_g + \Phi_L\ , \qquad (27)$$

где Φ_2, Φ_4 — вклады, пропорциональные вторым и четвертым степеням компонент ПП; Φ_g — градиентная энергия, пропорциональная квадрату градиентов компонент ПП; Φ_L — плотность энергии, линейная по градиентам ПП. Отметим, что слагаемые, пропорциональные третьей степени компонент ПП, в ТП сверхпроводника входить не могут в силу требования калибровочной инвариантности, поэтому условие Ландау [10,14] об отсутствии в ТП при фазовых переходах второго рода таких членов для сверхпроводника всегда выполняется. Базисные функции НП обозначим малыми латинскими буквами m, n, k, l. У рассматриваемых нами пространственных групп под каждым индексом понимается две характеристики: 1) луч звезды, по которой происходит переход; 2) индекс, нумерующий базисные функции малого НП, так что $m = (\mathrm{q}_M, \mu)$, $n = (\mathrm{q}_N, \nu)$, $k = (\mathrm{q}_K, \chi)$, $l = (\mathrm{q}_L, \lambda)$. Плотность ТП сверхпроводника должна подчиняться требованиям: 1) вещественности: $\Phi = \Phi^*$; 2) инвариантности относительно калибровочных преобразований: $\eta_m \to \eta_m e^{i\chi}$, $\mathbf{A} \to \mathbf{A} + (\hbar c/2e)\nabla\chi$ ($\mathbf{A}$ — векторный потенциал; $\hbar$ — постоянная Планка; c — скорость света; e — элементарный заряд); 3) инвариантности относительно операции обращения времени: $\eta_m \to \eta_m^*$, $\mathbf{A} \to -\mathbf{A}$. Инвариантность ТП относительно обращения времени можно было бы учесть, используя теорию копредставлений. В данной работе общий вид термодинамического потенциала выбирается сразу в t-инвариантном виде, в копредставления не используются. При построении ТП удобно считать базисные функции $\psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{R})$, $\vec{\psi}_m(\mathbf{k}, \mathbf{R})$ в разложении ПП фиксированными и полагать, что по данному НП D преобразуются коэффициенты $\eta_m = \eta_\mu^{\mathrm{q}M}$, так что

$$T(g)\eta_\lambda^{\mathrm{q}L} = \sum_{\mu;M} D_{L\lambda;M\mu}(g)\eta_\mu^{\mathrm{q}M}\ . \qquad (28)$$

Здесь и в дальнейшем опускается индекс НП, по которому происходит переход.

Как известно [14], имеется один квадратичный инвариант, составленный из компонент ПП, поэтому

$$\Phi_2 = \alpha(T)\sum_m |\eta_m|^2\ , \qquad (29)$$

где $\alpha(T) = \alpha_0(T - T_c)$, $\alpha_0 > 0$, T_c — температура сверхпроводящего перехода.

Вклад в ТП слагаемых четвертой степени имеет вид

$$\Phi_4 = \sum_{klmn}\beta_{klmn}\eta_k^*\eta_l^*\eta_m\eta_n = \sum_{klmn}\beta_{klmn}B^{klmn}\ , \qquad (30)$$

где

$$B^{klmn} = \frac{1}{2}\left(\eta_k^*\eta_l^*\eta_m\eta_n + \eta_k\eta_l\eta_m^*\eta_n^*\right)\ . \qquad (31)$$

То, что компоненты ПП входят в Φ_4 только в виде блоков B^{klmn} и в ТП не входят комбинации типа $i(\eta_k^*\eta_l^*\eta_m\eta_n - \eta_k\eta_l\eta_m^*\eta_n^*)$ является следствием инвариантности термодинамического потенциала относительно операции обращения времени. По той же причине, а также в силу вещественности Φ, коэффициенты β_{klmn} вещественны и кроме того подчинены очевидным из определения (31) условиям:

$$\beta_{klmn} = \beta_{lkmn} = \beta_{klnm} = \beta_{lknm} =$$

$$= \beta_{nmlk} = \beta_{mnlk} = \beta_{nmkl} = \beta_{mnkl}\ . \qquad (32)$$

Требуя, чтобы Φ_4 был инвариантен относительно преобразований (28), находим уравнения, определяющие коэффициенты β_{klmn}:

$$\beta_{klmn} = \mathrm{Re}\sum_{k'l'm'n'} D_{k'k}^*\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)D_{l'l}^*\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)D_{m'm}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)\times$$

$$\times D_{n'n}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)\Delta\left((h_{K'} + h_{L'} - h_{M'} - h_{N'})\mathrm{q}\,|\,0\right)\beta_{k'l'm'n'}\ , \qquad (33а)$$

$$\mathrm{Im}\sum_{k'l'm'n'} D_{k'k}^*\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)D_{l'l}^*\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)D_{m'm}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)\times$$

$$\times D_{n'n}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right)\Delta\left((h_{K'} + h_{L'} - h_{M'} - h_{N'})\mathrm{q}\,|\,0\right)\beta_{k'l'm'n'} = 0. \qquad (33б)$$

Требование инвариантности относительно трансляций приводит к тому, что отличными от нуля могут быть только те коэффициенты β_{klmn}, у кото-

рых индексы, обозначающие лучи звезды, совместимы с условием

$$\mathbf{q}_L + \mathbf{q}_K - \mathbf{q}_M - \mathbf{q}_N = \mathbf{b} \ . \qquad (34)$$

Выполнение условий (33) достаточно проверить для элементов нулевого блока, поворотные части которых являются генераторами точечной группы, образуемой поворотными элементами данной пространственной группы. Уравнения (33) оставляют часть коэффициентов неопределенными. Количество таких коэффициентов дает число независимых инвариантных комбинаций параметров порядка. Число инвариантов может быть заранее подсчитано, поскольку оно совпадает с кратностью вхождения единичного представления группы G в состав симметризованного произведения представлений $[D^*\otimes D^*\otimes D\otimes D]$.

Найдем вид градиентной энергии. Вклад в ТП слагаемых, пропорциональных квадратам градиентов, имеет вид

$$\Phi_g = \sum_{ij;kl} K_{kl}^{ij} (D_i \eta_k)^* (D_j \eta_l) = \sum_{ij;kl} K_{kl}^{ij} G_{ij}^{kl} \ , \qquad (35)$$

где $D_i = \nabla_i - i\frac{2e}{\hbar c} A_i$, а также

$$G_{ij}^{kl} = \frac{1}{2}\left[(D_i \eta_k)^* (D_j \eta_l) + (D_i \eta_k)(D_j \eta_l)^*\right] \ . \qquad (36)$$

Калибровочная инвариантность Φ_g достигается введением обобщенной производной D_i. В силу вещественности и инвариантности Φ_g относительно обращения времени коэффициенты в (35) подчинены условиям

$$K_{kl}^{ij} = K_{lk}^{ji} \ . \qquad (37)$$

То, что градиентные слагаемые входят в виде комбинаций (36) и не содержат выражений типа $i\left[(D_i \eta_k)^* (D_j \eta_l) - (D_i \eta_k)(D_j \eta_l)^*\right]$ является следствием инвариантности ТП относительно обращения времени. Условия инвариантности Φ_g относительно действия поворотных элементов нулевого блока дают уравнения для коэффициентов

$$K_{kl}^{ij} = \mathrm{Re} \sum_{i'j';k'l'} D_{k'k}^* \left(\{h|\vec{\tau}\}\right) D_{l'l}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right) \times$$

$$\times R_{i'i}(h) R_{j'j}(h) \Delta\left((h_{K'} - h_{L'})\mathbf{q} \,|\, 0\right) K_{k'l'}^{i'j'} \ , \qquad (38a)$$

$$\mathrm{Im} \sum_{i'j';k'l'} D_{k'k}^* \left(\{h|\vec{\tau}\}\right) D_{l'l}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right) \times$$

$$\times R_{i'i}(h) R_{j'j}(h) \Delta\left((h_{K'} - h_{L'})\mathbf{q} \,|\, 0\right) K_{k'l'}^{i'j'} = 0 \qquad (38б)$$

Инвариантность G_{ij}^{kl} относительно трансляций требует, чтобы компоненты ПП η_k, η_l соответствовали одному лучу:

$$\mathbf{q}_K - \mathbf{q}_L = \mathbf{b} \ . \qquad (39)$$

Условия (38) достаточно проверить для генераторов точечной группы. Число коэффициентов, оставшихся неопределенными из уравнений (38), дает количество инвариантных комбинаций, квадратичных по градиентам. Это число может быть заранее определено по кратности вхождения единичного представления группы G в состав произведения представлений $\Gamma_{(D)}^* \otimes D^* \otimes \Gamma_{(D)} \otimes D$, где $\Gamma_{(D)}$ обозначает представление, по которому преобразуется вектор $\mathbf{D}$.

Помимо слагаемых, квадратичных по градиентам ПП, в термодинамический потенциал могут входить и линейные по градиентам слагаемые. Их вклад в ТП может быть записан в виде

$$\Phi_L = \sum_{i;kl} N_{kl}^i L_i^{kl} \ , \qquad (40)$$

где

$$L_i^{kl} = \frac{1}{2}\left[\eta_k^* (D_i \eta_l) + \eta_k (D_i \eta_l)^* - \eta_l (D_i \eta_k)^* - \eta_l^* (D_i \eta_k)\right] , \qquad (41)$$

а вещественные коэффициенты в силу требований, предъявляемых к ТП, подчинены условиям

$$N_{kl}^i = - N_{lk}^i \ . \qquad (42)$$

Может показаться, что в Φ_L, наряду с L_i^{kl}, допустимы выражения

$$i\left[\eta_k^* (D_i \eta_l) + \eta_l^* (D_i \eta_k) - \eta_k (D_i \eta_l)^* - \eta_l (D_i \eta_k)^*\right],$$

однако это не так, поскольку они меняют знак при операции обращения времени. Тем не менее такие выражения могут входить в ТП сверхпроводников в виде скалярного произведения с магнитным полем в кристаллах, где отсутствует центр инверсии [19]. Условие инвариантности Φ_L относительно действия поворотных элементов нулевого блока дают уравнения для коэффициентов

$$N_{kl}^i = \mathrm{Re} \sum_{i';k'l'} D_{k'k}^* \left(\{h|\vec{\tau}\}\right) D_{l'l}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right) \times$$

$$\times R_{i'i}(h) \Delta\left((h_{K'} - h_{L'})\mathbf{q} \,|\, 0\right) N_{k'l'}^{i'} \ , \qquad (43a)$$

$$\mathrm{Im} \sum_{i';k'l'} D_{k'k}^* \left(\{h|\vec{\tau}\}\right) D_{l'l}\left(\{h|\vec{\tau}\}\right) \times$$

$$\times R_{i'i}(h) \Delta\left((h_{K'} - h_{L'})\mathbf{q} \,|\, 0\right) N_{k'l'}^{i'} = 0 \ , \qquad (43б)$$

которые достаточно рассмотреть при элементах, поворотные части которых являются генераторами точечной группы G_0. Для трансляционной инвариантности выражения L_i^{kl} на вектор решетки необходимо выполнение условия (39). Коэффициенты, оставшиеся неопределенными из уравнений (43), дадут количество и вид инвариантов, линейных по градиентам ПП. Число таких инвариантов можно заранее определить по кратности вхождения единичного представления группы G в состав антисимметризованного произведения

$$\left\{D^*\otimes D\otimes\Gamma_{(D)}\right\}.$$

Согласно Лифшицу [20], отсутствие линейных по градиентам слагаемых в ТП является условием устойчивости пространственно-однородного состояния. Наличие таких инвариантов приводит либо к невозможности существования соответствующих фаз, либо к тому, что фазы оказываются пространственно-неоднородными с периодом, значительно превосходящим постоянную решетки.

Поскольку в случае сверхпроводящего фазового перехода компоненты ПП комплексны, как уже указывалось, важно учитывать инвариантность ТП относительно операции обращения времени. Здесь возможны три случая [14,15,17]:

1) представление, по которому происходит переход, вещественное. Матрицы такого представления унитарным преобразованием могут быть приведены к вещественному виду;

2) исходное представление D и ему комплексно сопряженное D^* эквивалентны, но не приводятся к вещественному виду;

3) представления D и D^* не эквивалентны. Тип неприводимого представления устанавливается с помощью критерия Херринга [14,15,17].

В последнем случае в теории структурных фазовых переходов в силу требования вещественности ПП надо рассматривать переход по физически неприводимому представлению, являющемуся прямой суммой $D^*\oplus D$. В случае сверхпроводящих переходов требование вещественности ПП отсутствует, но в термодинамическом потенциале в силу предъявляемых к нему требований, перечисленных выше, необходимо присутствие как компонент η_m, преобразующихся по D, так и комплексно сопряженных компонент, преобразующихся по D^*. Таким образом, здесь также необходимо использовать физически неприводимые представления (или копредставления). Для вещественного представления матрицы D могут быть выбраны вещественными, и поэтому условия (33б), (38б), (43б) не дадут дополнительных ограничений для феноменологических коэффициентов, выполняясь тождественно. При переходах по комплексным представлениям условия (33б), (38б), (43б) дают дополнительные связи между этими коэффициентами, уменьшая количество инвариантов.

В итоге, с учетом энергии магнитного поля Б, полная плотность ТП может быть записана в следующем виде:

$$\Phi = \alpha(T)\sum_m |\eta_m|^2 + \sum_{klmn}\beta_{klmn}B^{klmn} + \sum_{ij;kl}K_{kl}^{ij}G_{ij}^{kl} + \sum_{i;kl}N_{kl}^{i}L_i^{kl} + \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi}. \qquad (44)$$

Уравнения Гинзбурга—Ландау находятся из условия минимума полного ТП и имеют вид

$$\alpha(T)\eta_k + 2\sum_{lmn}\beta_{klmn}\eta_l^*\eta_m\eta_n + 2\sum_{i;l}N_{kl}^{i}(D_i\eta_l) - \sum_{ij;l}K_{kl}^{ij}D_iD_j\eta_l = 0. \qquad (45)$$

По известной плотности ТП, согласно формуле $\mathbf{j} = -c\,\partial\Phi/\partial\mathbf{A}$, находится плотность сверхпроводящих токов:

$$j_i = i\frac{2e}{\hbar}\sum_{j;kl}K_{kl}^{ji}\left[\eta_l(D_j\eta_k)^* - \eta_l^*(D_j\eta_k)\right] + i\frac{2e}{\hbar}\sum_{kl}N_{kl}^{i}(\eta_l\eta_k^* - \eta_l^*\eta_k). \qquad (46)$$

Второе слагаемое в (46) дает вклад инвариантов Лифшица в сверхпроводящий ток.

Чтобы пространственно-однородное сверхпроводящее состояние отвечало минимуму ТП (хотя бы не абсолютному), коэффициенты, входящие в Ф, должны подчиняться определенным условиям. В частности, вклад градиентной энергии (35) в ТП должен быть всегда положителен. Это обеспечивается положительной определенностью матрицы коэффициентов K_{kl}^{ij}. Поскольку матрица K_{kl}^{ij} характеризуется двумя парами индексов (ik) и (jl), удобно каждую пару заменить одним индексом: $(ik)=\alpha$, $(jl)=\beta$, так что $K_{kl}^{ij}=K_{\alpha\beta}$. Новые индексы следует упорядочить. Сделаем это, потребовав, чтобы $\alpha_1=(i_1k_1)$ было больше $\alpha_2=(i_2k_2)$, если $i_1>i_2$, а если $i_1=i_2$, то $\alpha_1>\alpha_2$ при $k_1>k_2$. Необходимым и достаточным условием положительной определенности вещественной симметрической матрицы $K_{\alpha\beta}$ является выполнение условий

$$K_{11}>0,\quad \begin{vmatrix}K_{11}&K_{12}\\K_{21}&K_{22}\end{vmatrix}>0,\ \ldots,\ \begin{vmatrix}K_{11}&\cdots&K_{1n}\\ \cdot&&\cdot\\ \cdot&&\cdot\\ \cdot&&\cdot\\ K_{n1}&\cdots&K_{nn}\end{vmatrix}>0, \qquad (47)$$

n — общее количество различных пар индексов (ik).

Термодинамический потенциал будет иметь минимум для пространственно-однородных фаз, если эрмитова матрица

$$M_{kl} = \partial^2(\Phi_2 + \Phi_4)/\partial\eta_k^*\partial\eta_l = \alpha\delta_{kl} + 4\sum_{nm}\beta_{knlm}\eta_n^*\eta_m \tag{48}$$

положительно определена при значениях ПП, удовлетворяющих условию $\partial(\Phi_2 + \Phi_4)/\partial\eta_k^* = 0$. Таким образом, M_{kl} должна подчиняться условиям, аналогичным (47). На коэффициенты N_{kl}^i какие-либо дополнительные к (42) ограничения не накладываются.

Как отмечалось выше, если в ТП сверхпроводника входят линейные по градиентам ПП инварианты и коэффициенты перед ними аномально малы, то возможно существование сверхпроводящего модулированного состояния. Рассмотрим в качестве примера сверхпроводящие переходы по неприводимым представлениям, характеризуемым однолучевой звездой $\mathbf{q}_{16} = 1/2\,\mathbf{b}_3$ (Z — точка зоны Бриллюэна) [12] в сверхпроводнике с пространственной симметрией группы D_{2h}^{18}. Здесь имеется два малых двумерных НП, переходы по которым описываются ТП

$$\Phi_{16} = \sum_{i=x,y,z} K_{11}^{ii}(G_{ii}^{11} + G_{ii}^{22}) + \alpha(T)(|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2) +$$
$$+ \beta_{1111}(B^{1111} + B^{2222}) + 2\beta_{1122}B^{1122} + 4\beta_{1212}B^{1212} +$$
$$+ N_{12}^z\left[\eta_1^*(D_z\eta_2) + \eta_1(D_z\eta_2)^* - \eta_2^*(D_z\eta_1) - \eta_2(D_z\eta_1)^*\right]. \tag{49}$$

Наличие в ТП Φ_{16} инварианта Лифшица указывает на возможность возникновения при малом N_{12}^z длиннопериодической модулированной структуры. Обратим внимание, что при учете только точечной симметрии у сверхпроводников, относящихся к кристаллическому классу D_{2h}, могут осуществляться переходы только в состояния с однокомпонентным (комплексным) параметром порядка, и, естественно, инварианты Лифшица в таком случае отсутствуют.

Для бестокового состояния, в отсутствие магнитного поля ($\mathbf{A} = 0$) и при учете пространственной зависимости ПП только от координаты z, термодинамический потенциал (49) примет вид

$$\Phi_{16} = K\left[\left(\frac{\partial\rho_1}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho_2}{\partial z}\right)^2 + \rho_1^2\left(\frac{\partial\chi_1}{\partial z}\right)^2 + \rho_2^2\left(\frac{\partial\chi_2}{\partial z}\right)^2\right] +$$
$$+ 2N\left[\cos(\chi_1 - \chi_2)\left(\rho_1\frac{\partial\rho_2}{\partial z} - \rho_2\frac{\partial\rho_1}{\partial z}\right) + \rho_1\rho_2\sin(\chi_1 - \chi_2)\frac{\partial(\chi_1 - \chi_2)}{\partial z}\right] +$$
$$+ \alpha(T)(\rho_1^2 + \rho_2^2) + \beta_1(\rho_1^4 + \rho_2^4) + 4\left[\beta_2\cos 2(\chi_1 - \chi_2) + 2\beta_3\right]\rho_1^2\rho_2^2, \tag{50}$$

где $\eta_i = \rho_i e^{i\chi_i}$ $(i = 1, 2)$; $K = K_{11}^{zz}$; $N = N_{12}^z$; $\beta_1 = \beta_{1111}$; $\beta_2 = \beta_{1122}$; $\beta_3 = \beta_{1212}$. Минимизируя полный ТП, получим сложную систему четырех нелинейных дифференциальных уравнений. Отметим, что уже в случае ПП с двумя вещественными компонентами анализ соответствующих уравнений удается выполнить лишь приближенно [16,21]. Тем более такой анализ существенно усложняется в данном случае. Для того чтобы хотя бы качественно исследовать переход в модулированную фазу, воспользуемся вариационным подходом. Поскольку решение должно представлять собой периодическую по оси z структуру, будем искать решение в виде

$$\rho_1 = \rho_0\cos(2\pi z/L_1), \quad \rho_2 = \rho_0\cos(2\pi z/L_1 + \varphi_0),$$
$$\chi_1 = 2\pi z/L_2, \quad \chi_2 = 2\pi z/L_2 + \chi_0. \tag{51}$$

В (51) имеется пять вариационных параметров: ρ_0, L_1, L_2, φ_0, χ_0. Подставляя (51) в (50), находим ТП на единицу длины структуры:

$$\tilde{\Phi}_{16} = 4\pi^2K\rho_0^2(L_1^{-2} + L_2^{-2}) - 4\pi N\rho_0^2(L_1^{-1}\cos\chi_0\sin\varphi_0 +$$
$$+ L_2^{-1}\sin\chi_0\cos\varphi_0) + \alpha(T)\rho_0^2 + \frac{3}{4}\beta_1\rho_0^4 +$$
$$+ \rho_0^4(\beta_2\cos 2\chi_0 + 2\beta_3)(1/2 + \cos^2\varphi_0). \tag{52}$$

Приравнивая нулю производные $\tilde{\Phi}_{16}$ по вариационным параметрам, нетрудно получить систему алгебраических уравнений, определяющих ρ_0, L_1, L_2, φ_0 и χ_0. В самой точке сверхпроводящего перехода в модулированную фазу имеем

$$L_1 = L_2 = \frac{4\pi K}{N}, \quad \sin^2\varphi_0 = \sin^2\chi_0 = 1/2. \tag{53}$$

Температура перехода в такое состояние

$$T_m = T_c + \frac{N^2}{2\alpha_0 K} \qquad (54)$$

выше температуры сверхпроводящего перехода T_c в однородную фазу. Температурные зависимости ПП и ТП имеют вид

$$\rho_0^2 = -\frac{2\alpha_0(T - T_m)}{(3\beta_1 + 8\beta_3)}, \qquad (55)$$

$$\bar{\Phi}_{16} = -\frac{\alpha_0^2(T - T_m)^2}{(3\beta_1 + 8\beta_3)}, \qquad (56)$$

откуда следует, что переход в модулированное состояние является переходом второго рода. Характерный масштаб модулированной структуры $L_0 = 4\pi K/N$ должен быть много больше межатомного расстояния a, так что для коэффициента, стоящего перед инвариантом Лифшица, справедливо уравнение

$$N << 4\pi \frac{K}{a}. \qquad (57)$$

Как отмечалось, в ТП (50) пренебрегли векторным потенциалом, считая, что отсутствует внешнее магнитное поле и рассматривается бестоковое состояние. Хотя выбранное приближенное решение (51) строго не обращает плотность тока в нуль, тем не менее в нуль обращается среднее по периоду структуры значение плотности тока, что позволяет считать используемое приближение достаточно разумным.

Развитый в статье подход к построению феноменологических уравнений сверхпроводимости в кристаллах дает возможность исследовать влияние пространственной симметрии сверхпроводника на его сверхпроводящие свойства и позволяет рассматривать сверхпроводящие переходы, в результате которых наряду с изменением поворотной симметрии в распределении сверхпроводящих электронов меняется и трансляционная симметрия. Фазовые переходы такого типа, очевидно, не могут быть рассмотрены при учете только точечной симметрии кристалла. Сверхпроводящие превращения в кристаллах с различной пространственной симметрией предполагается исследовать в отдельной работе. Учет кристаллической структуры несомненно окажется важным также при изучении взаимного влияния сверхпроводимости и структурных [18], магнитных и иных свойств.

Автор благодарен Г. Я. Любарскому за обсуждения. Работа получила финансовую поддержку по гранту Международного научного фонда Сороса.

1. В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ* **20**, 1064 (1950).
2. Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **36**, 1918 (1959); **37**, 1407 (1959).
3. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* B30, 4000 (1984).
4. Г. Е. Воловик, Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **88**, 1412 (1985).
5. K. Ueda and T. M. Rice, *Phys. Rev.* B31, 7114 (1985).
6. M. Sigrist and T. M. Rice, *Z. Phys.* B68, 9 (1987).
7. M. Sigrist and K. Ueda, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 239 (1991).
8. J. F. Annett, *Adv. Phys.* **39**, 83 (1990).
9. Ю. М. Полуэктов, *ФНТ* **19**, 256 (1993).
10. Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ* **7**, 19 (1937); **7**, 627 (1937).
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1964).
12. П. Де Жен, *Сверхпроводимость металлов и сплавов*, Мир, Москва (1968).
13. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
14. Г. Я. Любарский, *Теория групп и ее применение в физике*, Гостехтеориздат, Москва (1957).
15. Ю. А. Изюмов, В. Е. Найш, Р. П. Озеров, *Нейтронография магнетиков*, т. 2, Атомиздат, Москва (1984).
16. Ю. А. Изюмов, В. Н. Сыромятников, *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*, Наука, Москва (1984).
17. В. В. Еременко, *Введение в оптическую спектроскопию магнетиков*, Наукова думка, Киев (1975).
18. Ю. М. Полуэктов, *ФНТ* **20**, 207 (1994).
19. Ю. М. Полуэктов, *ФНТ* **19**, 1071 (1993).
20. Е. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **11**, 255 (1941); **11**, 269 (1941).
21. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **47**, 992 (1964).

To the phenomenological theory of superconductivity with the spatial symmetry of superconductors taken into account

Yu. M. Poluektov

The phenomenological approach to the theory of superconductivity is generalized with due regard for the spatial symmetry of superconducting crystals. This generalization makes it possible to study the superconducting transitions under which in parallel with the change in the rotational symmetry, a translational symmetry in the distribution of superconducting electron density may be broken with the crystal lattice symmetry unchanged. A method is proposed to determine basis functions of irreducible representations of a space group with due regard for both the distribution of centers of Cooper pair masses over crystal and the intrinsic symmetry of the pairs. A general form of the thermodynamic potential of the superconductor invariant under the symmetry space group of the normal state is obtained. It is shown that the superconducting modulated structure may exist under certain conditions if the thermodynamic potential involves terms linear in the order parameter gradients.