

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

Fyzikálne vlastnosti Dynesových supravodičov

Dizertačná práca

Mgr. František Herman

Študijný odbor: 1121 Všeobecná fyzika a matematická fyzika

Študijný program: Teoretická fyzika a matematická fyzika

Školiteľ: doc. RNDr. Richard Hlubina, DrSc.

Katedra experimentálnej fyziky

BRATISLAVA, 2017



Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

- Meno a priezvisko študenta:** Mgr. František Herman
Študijný program: teoretická fyzika a matematická fyzika (Jednoodborové štúdium, doktorandské III. st., denná forma)
Študijný odbor: všeobecná fyzika a matematická fyzika
Typ záverečnej práce: dizertačná
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický
- Názov:** Fyzikálne vlastnosti Dynesových supravodičov
Physical properties of the Dynes superconductors
- Literatúra:** G. Rickayzen: Green's functions and condensed matter, Dover 2013
K.H. Bennemann and J.B. Ketterson: Superconductivity, Springer 2008
- Cieľ:** Hustotu stavov neusporiadaných supravodičov často dobre popisuje fenomenologická Dynesova formula. Hlavným cieľom práce bude identifikovať možné mikroskopické mechanizmy, ktoré vedú k Dynesovej fenomenológii. Ďalším cieľom bude preskúmať fyzikálne vlastnosti Dynesových supravodičov, ako napríklad spektrálne funkcie elektrónov alebo optickú vodivosť.
- Kľúčové slová:** neusporiadané supravodiče, procesy narúšajúce páry, priblíženie koherentného potenciálu
- Školiteľ:** doc. RNDr. Richard Hlubina, DrSc. (od 18.06.2015)
Katedra: FMFI.KEF - Katedra experimentálnej fyziky
Vedúci katedry: prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc.
Dátum zadania: 01.04.2016
- Dátum schválenia:** 01.04.2016
prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc.
garant študijného programu

študent

školiteľ

Podakovania

V prvom rade sa chcem poďakovať svojmu školiteľovi Richardovi Hlubinovi za navrhnutie témy predkladanej práce, cenné diskusie i odbornú pomoc.

Vďaka za vhlad do experimentálnych meraní v oblasti supravodivosti patrí Martinovi Žemličkovi, Veronike Haškovej a Michalovi Šindlerovi.

Vďaka za podporu a vytváranie pozitívnej pracovnej atmosféry patrí taktiež širšiemu kolektívu ľudí z KTFDF, KEF FMFI UK a v neposlednom rade študentom.

Za trpezlivosť, pokoru, rozvahu i odvahu púšťať sa do šialeností patrí vďaka rodine.

Za možnosť vidieť zmysel v snahe sa chcem poďakovať ďalším ľuďom, ktorí spolu s tými uvedenými vyššie tvoria z tejto strany 77 číslovanú stranu práce, ak nie viac.

Abstract

Excellent fits of the tunneling density of states in disordered superconductors can be often achieved making use of the phenomenological *Dynes formula*. Here we show that precisely such formula can be derived within the coherent potential approximation in the superconducting state by considering Lorentzian distribution of pair-breaking fields.

Next we formulate Green function of the *Dynes superconductor*, describing one-particle properties of superconductor in which we consider not just the Lorentzian distribution of pair-breaking fields, but also arbitrary distribution of pair-conserving fields.

In this thesis we analyze not only the analytic properties of the Dynes superconductor, but we also make several experimental predictions. We study and predict temperature evolution of the order parameter (also in mag. field), spectral functions, optical conductivity and we also analyze the penetration depth.

Keywords: Dynes superconductor, tunneling density of states, pair-breaking and pair-conserving scattering processes, spectral functions, optical conductivity

Abstrakt

Je experimentálne potvrdené, že spektrá pre hustoty tunelových stavov merané na supravodičoch obsahujúcich nečistoty sa často dajú s výbornou presnosťou fitovať fenomenologickou *Dynesovou formulou*. V práci ukazujeme, ako sa dá táto formula odvodiť riešením rovníc v priblížení CPA v supravodivom stave pre prípad, keď spektrum rozptylového potenciálu pre nečistoty narúšajúce páry uvažujeme v tvare lorentziánu.

Následne skonštruujeme Greenovu funkciu pre *Dynesov supravodič*. Prostredníctvom nej získavame popis jednočasticových vlastností supravodiča, v ktorom okrem lorentzovského potenciálu pre nečistoty narúšajúce páry, uvažujeme taktiež ľubovoľné rozdelenie pre potenciál popisujúci rozptyly na nečistotách, ktoré páry naopak zachovávajú.

Okrem štúdia analytických vlastností teórie Dynesových supravodičov venujeme taktiež nemalú časť experimentálnym predpovediam. Predpovedáme teplotnú závislosť parametra usporiadania (v istom priblížení aj v mag. poli), spektrálne vlastnosti, optickú vodivosť a taktiež analyzujeme hĺbku vniku.

Kľúčové slová: Dynesov supravodič, tunelová hustota stavov, rozptylové procesy, ktoré zachovávajú resp. narúšajú Cooperové páry, spektrálne funkcie, optická vodivosť

Obsah

Úvod	1
Osnova práce	6
1 Dynesova formula pre tunelovú hustotu stavov	7
Motivácia a hlavné výsledky	7
Článok [H1]	14
2 Spektrálne vlastnosti Dynesových supravodičov	22
Motivácia a hlavné výsledky	22
Článok [H2]	28
3 Elektromagnetické vlastnosti Dynesových supravodičov	36
Motivácia a hlavné výsledky	36
Článok [H3]	44
Záver	53
Dodatky	55
Dodatok A: Nambu-Gorkovov formalizmus	55
Dodatok B: Teória lineárnej odozvy z rýchlika	60
Dodatok C: Sumačné pravidlá	62
Dodatok D: Prípady iných ako lorentzovských rozdelení	64
Dodatok E: Riešenie CPA rovníc pre fluktuujúcu energetickú medzeru	66
Dodatok F: Výpočet optickej funkcie odozvy	70
Zoznam publikácií a konferenčných príspevkov	74
Bibliografia	75

Úvod

BCS a čisté supravodiče

Vďaka výraznému experimentálnemu pokroku pri dosahovaní ultranízkych teplôt bol Heike Kamerlingh Onnes schopný pri teplote $4.19K$ v roku 1911 pozorovať *vymiznutie* odporu ortuti. Nasledujúce experimenty ukázali, že pri veľmi nízkych teplotách vzniká aj v iných kovoch nová-*supravodivá* fáza, pri ktorej dochádza k bezdisipatívnemu transportu náboja.

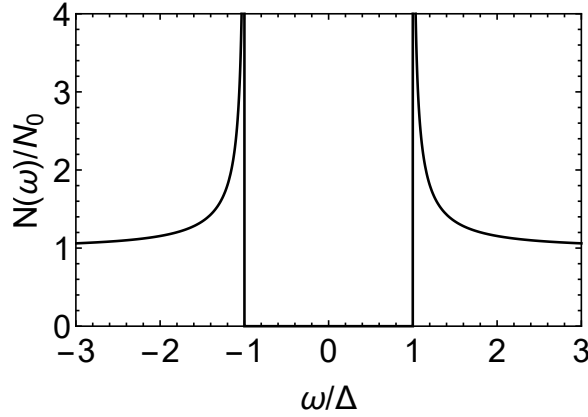
Teória, ktorá bolá schopná podať vysvetlenie mikroskopického mechanizmu supravodivosti bola sformulovaná až o 46 rokov neskôr fyzikmi Johnom Bardeenom, Leonom Cooperom a Johnom Robertom Schriefferom. Na počesť jej zakladateľov nesie názov *teória BCS* a supravodivosť popisuje ako kondenzát bozónov, tvorený dvojicami elektrónov viazaných prostredníctvom príťažlivej interakcie sprostredkovanej fonónmi do tzv. *Cooperových párov*.

Osobitú úlohu v teórii BCS zohráva tzv. funkcia energetickej medzery Δ . Teplotná závislosť $\Delta(T)$ je popísaná spojitou, monotónne klesajúcou funkciou, ktorá pri nulovej teplote nadobúda hodnotu $\Delta(0)$ a pri kritickej teplote platí: $\Delta(T_c) = 0$. Vďaka tejto vlastnosti zohráva $\Delta(T)$ úlohu parametra usporiadania v supravodivom stave. V rámci teórie BCS pre konvenčné supravodiče, kde je Δ nezávislá od frekvencie, existuje materiálovo nezávislý súvis medzi energetickými škálami parametra usporiadania a kritickej teploty¹:

$$\Delta(0) \approx 1.76T_c.$$

Tento výsledok je pre nízkoteplotné supravodiče rôzneho chemického zloženia vo výbornej zhode s experimentami.

¹Upozorňujeme čitateľa, že v celej práci budeme uvažovať sústavu jednotiek, v ktorej $\hbar = k_B = 1$.



Obr. 1: Hustota tunelových stavov pre konvenčné BCS supravodiče (normovaná na normálny stav).

Parameter Δ je zaujímavý aj z pohľadu tunelovej spektroskopie, ktorou sa dá merať tunelovacia hustota stavov. Teória BCS, v ktorej je $\Delta = \text{konšt.}$, predpovedá hustotu stavov $N(\omega)$ v tvare:

$$N(\omega) = N_0 \operatorname{Re} \left[\frac{|\omega|}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \right], \quad (1)$$

kde N_0 je hustota energie na Fermiho ploche v normálnom stave.

Tvar funkcie zodpovedajúci (1) je znázornený na obr. 1, kde frekvencia $\omega = 0$ zodpovedá hodnote Fermiho energie. Predpoveď BCS teórie spočíva v dvoch základných črtách. Prvou je nulová hodnota hustoty stavov na intervale $\omega \in (-\Delta, \Delta)$ a druhou sú singularity v prípadoch $\omega = \{-\Delta, \Delta\}$. Hustota tunelových stavov meraná na množstve nízkoteplotných supravodivých vzorkách ukazuje súhlas experimentu s BCS teóriou.

Supravodiče s nečistotami

Zatiaľčo v predchádzajúcej podkapitole sme v krátkosti predstavili azda dva najdôležitejšie výsledky pre čisté supravodiče popísané v rámci BCS teórie, v tejto sa zameriame na také, v ktorých sú prítomné aj rozptylové procesy na nečistotách. Hlavným cieľom tejto podkapitoly je predstaviť skúmaný problém, ktorý v dizertačnej práci riešime, v skratke zaviesť kľúčové pojmy a ukázať stupeň porozumenia, ktorý sme mali pred začiatkom nášho štúdia a výskumu.

Pri našich úvahách sa sústreďíme na oblasť veľmi nízkych teplôt, pri ktorých môžeme rozptylové procesy na nečistotách chápať ako elastické.

Dá sa ukázať, že v takomto prípade možno rozptylové procesy z pohľadu narúšania symetrie voči inverzii času rozdeliť na *procesy narúšajúce páry (NP rozptyly)* a *procesy zachovávajúce páry (ZP rozptyly)*, pričom postačujúca podmienka pre identifikovanie

NP rozptylov sa dá formulovať nasledovne: Ak zodpovedajúci člen narúša symetriu otočenia znamienka času v Hamiltoniáne, jedná sa o NP rozptyl. Samozrejme, keďže má táto podmienka postačujúci charakter, nevyklučuje existenciu NP rozptylových procesov, ktoré symetriu otočenia znamienka času v Hamiltoniáne zachovávajú. Takýto príklad analyzujeme v Dodatku E.

Dvojaké správanie voči symetrii inverzie času sa u supravodičov s nečistotami následne prejaví aj v rozdielnych spôsoboch, akým tieto procesy ovplyvňujú ich supravodivé vlastnosti. Toto správanie sa dá zhrnúť vo formulácii *Andersonovho teóremu* ktorý tvrdí, že *ZP rozptyly neovplyvnia ani funkciu Δ , a ani kritickú teplotu² T_c* [1]. Dôsledok tohto teóremu je taký, že experimentálne predpovede, ktoré sme predstavili v predchádzajúcej kapitole, zostanú nezmenené aj v prípade, keď v supravodiči prebiehajú len ZP rozptyly.

V Dodatku A (venovanom Nambu-Gorkovovému formalizmu) ukazujeme, že v rámci Eliašbergovej teórie je hustota stavov pre všeobecný supravodič (teda aj s nečistotami), závislá len od frekvenčne závislej funkcie energetickej medzery $\Delta(\omega)$ vo forme³:

$$N(\omega) = N_0 \operatorname{Re} \left[\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right]. \quad (2)$$

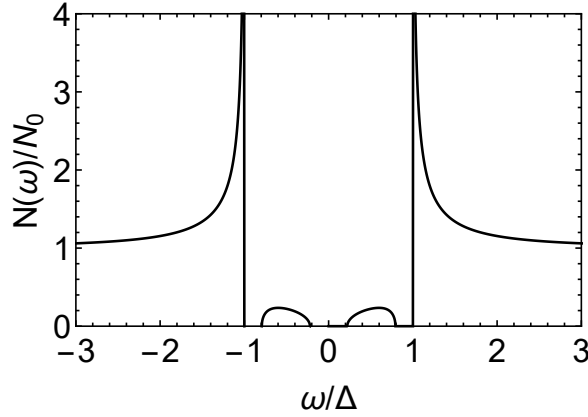
Keďže hustota stavov necíti vplyv ZP rozptylov, dá sa na ňu pozeráť aj ako na jednoduchý a priamočiary nástroj, ktorým môžeme skúmať len NP rozptyly ako z pohľadu teórie, tak aj experimentu.

Z teoretického hľadiska treba spomenúť tzv. T-maticovú aproximáciu [2], ktorá pre nízke koncentrácie nečistôt vedúcich k NP rozptylom predpovedá nenulovú hodnotu hustoty stavov vnútri pásma zakázaných stavov v $N(\omega)$ pre BCS supravodič, tak ako je zobrazené na obr. 2.

Pre kompletnú analýzu závislosti veľkosti a polohy pásma dovolených stavov spôsobených vplyvom NP rozptylov v hustote stavov odkážeme čitateľa na pôvodný článok [2]. Spomeňme len, že hoci sme zväčšovaním koncentrácie nečistôt v rámci T-maticovej aproximácie schopní vytvoriť pásmo dovolených stavov vnútri energetickej medzery v hustote stavov, nie sme schopní vysvetliť vyplnenie celej medzery, tak ako by to žiadali niektoré experimenty [3, 4, 5].

²Predpokladajúc že rozptylové procesy nie sú dostatočne silné na to, aby viedli k Andersonovej lokalizácii.

³V tejto forme uvažujeme ten koreň odmocniny, ktorý má kladnú imaginárnu časť.

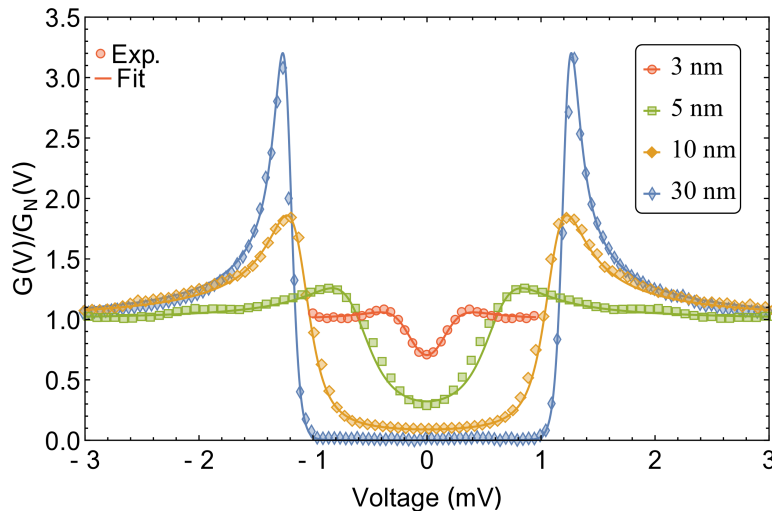


Obr. 2: Normalizovaná hustota stavov supravodiča s nízkou koncentráciou nečistôt vedúcich k NP rozptylom v rámci T-maticovej aproximácie.

V prípade spomínaných experimentov sa prítomnosť NP rozptylov prejavuje preusporiadaním stavov prostredníctvom rozmazania singularít a súčasným vyplňaním celej energetickej medzery v hustote stavov. Tento efekt môžeme následne pozorovať aj v tunelovej vodivosti (ktorá pre $T = 0$ zodpovedá priamo $N(\omega)$) znázornenej na obr. 3.

Fity, ktoré sú znázornené na obr. 3 sú založené na pôvodne fenomenologickej, tzv. *Dynesovej formule* pre tunelovú hustotu stavov [6], ktorá sa dá zapísať vzorcom (2), uvažujúc energetickú závislosť pre $\Delta(\omega)$ v tvare:

$$\Delta(\omega) = \frac{\omega \bar{\Delta}}{\omega + i\Gamma}. \quad (3)$$



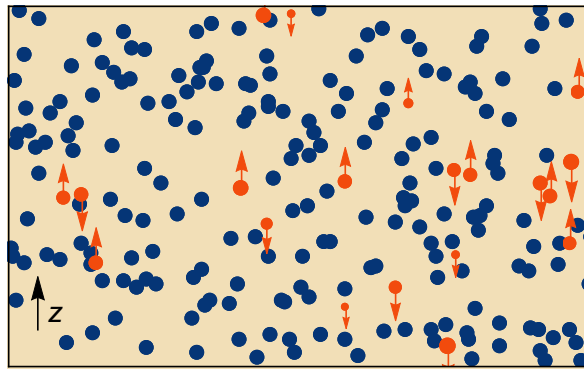
Obr. 3: Normalizované tunelové vodivosti vzoriek MoC supravodiča s rôznou hrúbkou pri teplote $T \approx 500\text{mK}$ [3].

Kvôli tomu, aby sme zdôraznili rozdiel medzi $\Delta(\omega)$ uvažovanou v prípade BCS supravodiča a supravodiča, ktorého hustota stavov sa dá popísať Dynesovou formulou, zavádzame nový symbol $\bar{\Delta}$. Upozorníme, že hoci je novozavedený parameter Γ schopný opísať

vypĺňanie energetickej medzery v tunelovej hustote stavov (zrejme prostredníctvom vplyvu NP rozptylov), jeho mikroskopický charakter bol v rámci predstavenej fenomenológie v skutočnosti neznámy. Jedným z cieľov tejto práce je odvodiť Dynesovu formulu prostredníctvom riešenia CPA rovníc, ktoré ako veríme, jej mikroskopický charakter značne poodhaľuje.

Navyše, treba si uvedomiť, že vďaka platnosti Andersonovho teorému tvorí akákoľvek, či už fenomenologická, alebo odvodená znalosť $\Delta(\omega)$ stále len polovicu informácie o rozptylových procesoch v supravodičoch. Pre úplnú informáciu potrebujeme popísať taktiež vplyv ZP rozptylov. Táto práca si kladie za cieľ posunúť chápanie vplyvu oboch typov spomínaných rozptylových procesov na supravodivé vlastnosti.

Prejdime teraz k modelovej predstave generickej supravodivej vzorky obsahujúcej nečistoty, ktorú sme sa rozhodli v predkladanej práci skúmať. Takúto predstavu v podstate zachytáva obr. 4, kde dva typy náhodne rozmiestnených rozptylových nečistôt znázorňujeme rôznymi farbami. Modrou farbou sú znázornené ZP nečistoty,



Obr. 4: Ilustračný obrázok Dynesovho supravodiča. NP nečistoty sú znázornené červenou farbou, zatiaľ čo ZP nečistoty sú modré.

kým červená farba zodpovedá podstatne redším NP nečistotám. Pre jednoduchosť uvažujeme fixovaný priemet spinu magnetických nečistôt len v smere osi z . Meniacou sa pravdepodobnosť rozptylu na NP nečistote je znázornená meniacou sa veľkosťou nečistoty. V podstate si takú istú vlastnosť môžeme predstaviť aj v prípade ZP nečistôt, avšak pre ZP rozptylové procesy uvažujeme podstatne širšie a rovnomernejšie rozdelenie (Čo sa týka pravdepodobnosti rozptylu elektrónu na nej) a preto ich rozptylové centrá znázorňujeme jednou veľkosťou.

Experimentálne sa zdá byť predkladaná teória Dynesových supravodičov najlepšie aplikovateľná u vzoriek tenkých, znečistených supravodivých vrstiev [3, 7]. Dôvodom pre jej použiteľnosť práve v tejto oblasti môže byť prítomnosť magnetických, t.j. NP prímiesi na rozhraní vzorky a substrátu, ktoré sa môžu vyskytnúť aj v inak veľmi čistých supravodivých filmoch [8, 9].

Osnova práce

Predkladaná dizertačná práca pozostáva zo štyroch častí a dodatkov. V prvej časti sa pozrieme na spomínané riešenie CPA rovníc. Uvážením lorentzovského rozdelenia pre NP nečistoty a ľubovoľného rozdelenia pre nečistoty zodpovedajúce ZP rozptylom nájdeme Greenovu funkciu pre Dynesov supravodič, ktorá podáva kompletný popis jednočasticových vlastností elektrónu v "špinavom" supravodiči. Súčasťou prvej časti je diskusia limitného prípadu na T-maticovú aproximáciu, ako aj predpovede pre termodynamické vlastnosti Dynesovho supravodiča ako s vypnutým, tak aj so zapnutým magnetickým poľom.

V druhej časti práce sa sústredíme na štúdium spektrálnych funkcií Dynesovho supravodiča. Súčasťou tejto časti bude porovnanie s iným modelom [10], ktorý sa v prípade d-vlnových vysokoteplotných supravodičov taktiež pokúša zahrnúť oba typy nečistôt. V neposlednom rade sa taktiež pozrieme na analytické a limitné vlastnosti Greenovej funkcie pre Dynesov supravodič.

V tretej časti predstavujeme štúdium dvojčasticových vlastností pre Dynesov supravodič v podobe výpočtu optickej vodivosti. Po analýze vplyvu NP rozptylov na reálnu časť vodivosti, najmä pre prípad $\omega < 2\bar{\Delta}$ kde je tento efekt najdôležitejší, preskúmame pri nulovej teplote analyticky aj vplyv rozptylových procesov na koncentráciu supravodivých častíc (ktorá súvisí s hĺbkou vniku ako $n_s \propto \lambda^{-2}$). Rovnako zaujímavá môže byť pre čitateľa aj analýza koherenčného píku v oblasti veľmi nízkych frekvencií $\omega \ll \bar{\Delta}$.

V závere zhrneme naše najdôležitejšie výsledky, ale taktiež sa pozrieme na otvorené otázky, ktoré môžu byť podnetom pre ďalšie štúdium v oblasti Dynesových supravodičov.

Súčasť práce tvorí aj 6 dodatkov. Do nich presunieme materiál trojakého charakteru:

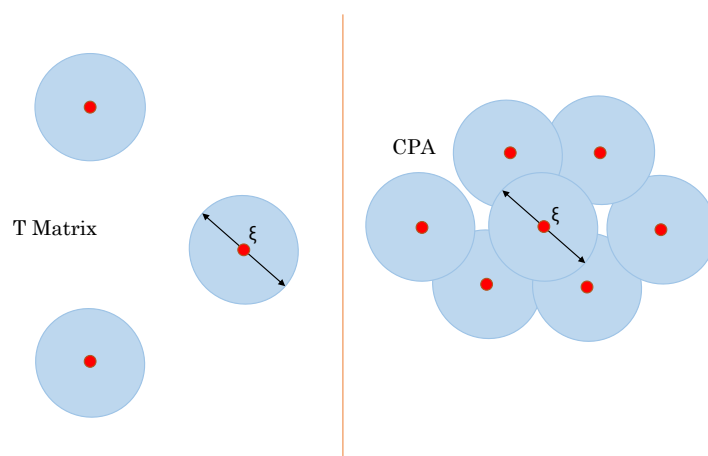
- Najpodstatnejší teoretický základ ktorý pri našich úvahách využívame (Nambu-Gorkovov formalizmus, teória lineárnej odozvy, sumačné pravidlá).
- Doplnujúci materiál (odvodenie hustoty tunelových stavov pre všeobecný eliášbergovský supravodič v rámci Nambu-Gorkovovho formalizmu, efekt rôznych rozdelení pre NP nečistoty na tunelovú hustotu stavov, riešenie CPA pre "roz-mazanú" funkciu energetickej medzery).
- Technické detaily výpočtov, ktoré pre pochopenie hlavných myšlienok v prvom kole nevyhnutne nepotrebujeme (Výpočet optickej funkcie odozvy).

Dynesova formula pre tunelovú hustotu stavov

Od T-matice k CPA

Predtým, ako sa pustíme do samotného vysvetľovania nášho prvého článku [H1], nahliadnime motiváciu pre prechod od tradičného pohľadu na supravodiče obsahujúce NP nečistoty v rámci T-maticového priblíženia [2] k formalizmu CPA⁴.

Začnime obr. 5, ktorý ilustruje rozdiel medzi situáciami v ktorých môžeme vplyv rozptylových procesov zahrnúť v rámci T-maticovej aproximácie, resp. musíme využiť priblíženie CPA. Kým pri T-matici uvažujeme, že stredná vzdialenosť rozptylových nečistôt je väčšia ako supravodivá koherenčná dĺžka ξ , pri priblížení CPA uvažujeme presne opačný prípad. Takto prekrývajúce sa oblasti v ktorých elektrón podlieha vplyvu rozptylových procesov na nečistotách vytvárajú spojitý potenciál, s ktorým potom v rámci CPA pracujeme. Naopak, riedky plyn rozptylových centier zodpovedá jednotlivým rozptylom elektrónu na nečistotách s dobre definovanou väzbovou konštantou, ktorá je dobre zachytená už v rámci T-matice.



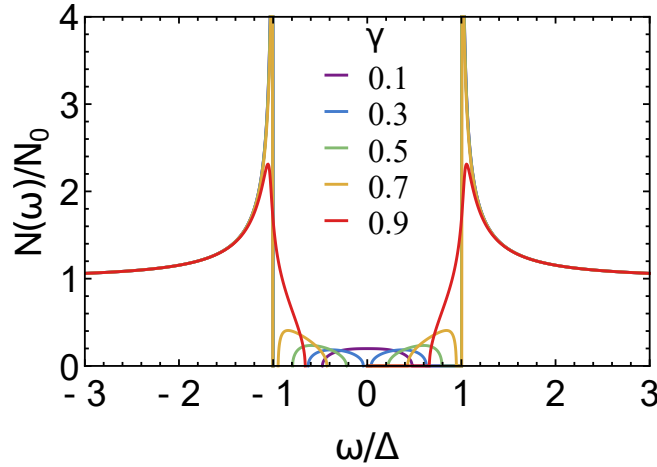
Obr. 5: Ilustračný obrázok zobrazujúci rôzny vplyv rozptylových procesov v rámci T-matice a priblíženia CPA.

⁴Z angl. Coherent Potential Approximation.

Sústredme sa teda najskôr na výsledok pre hustotu stavov v rámci T-maticovej aprox. pre rôzne hodnoty väzbovej konštanty V_0 , zodpovedajúce náhodnému potenciálu pre rozptyl elektrónu na jednej NP nečistote. Nech koncentrácia nečistôt je x . Pre jednoduchosť zavedme parametre:

$$\gamma = \left| \frac{1 - (\pi N_0 V_0)^2}{1 + (\pi N_0 V_0)^2} \right|, \quad \alpha = \frac{2}{\Delta} \frac{x \pi N_0 V_0^2}{1 + (\pi N_0 V_0)^2}.$$

Na obr. 6 prezentujeme hustoty stavov pre rôzne hodnoty γ a fixovanú hodnotu α . Môžeme si všimnúť, že energie viazaných stavov sú dané hodnotou $\pm\gamma\Delta$, zatiaľ čo α má vplyv na šírku zakázaného pásu.



Obr. 6: Normalizované hustoty stavov supravodiča s nízkymi koncentraciami NP rozptylových nečistôt $x \ll 1$ v rámci T-maticovej aproximácie pre rôzne hodnoty parametra γ a fixovanú hodnotu $\alpha = 0.05$ [11].

Ako vidíme na obr. 6, vďaka tomu, že T-matica pracuje s rozptylom elektrónu len na jednej nečistote s definovanou väzbovou konštantou V_0 a teda aj γ , nie sme v rámci tohto popisu schopní popísať vyplnenie celej energetickej medzery.

Ako je však taktiež vidieť na obr. 6, efekt zaplňovania celej energetickej medzery v hustote stavov by mohol byť popísateľný v rámci formalizmu, ktorý dokáže zahrnúť efekt viacnásobného rozptylu elektrónu na nečistotách s rôznymi hodnotami náhodného potenciálu.

V experimentoch, ktoré sa snažíme vysvetliť sa navyše ukazuje, že parameter usporiadania $\bar{\Delta}$ je priestorovo homogénny. To však v kombinácii s meniacou sa interakčnou konštantou naznačuje, že sa treba sústrediť na hľadanie popisu v rámci režimu vysokej koncentrácie NP rozptylových nečistôt, pretože rozptyly pri nízkej koncentrácii by spoločne s meniacou sa hodnotou náhodného potenciálu viedli k priestorovo nehomogénmu rozloženiu $\bar{\Delta}$.

CPA

Ukazuje sa, že vhodný jazyk na popis jednočasticových vlastností pod vplyvom rozptylových procesov v nečistých systémoch s vysokou koncentráciou sa dá nájsť v rámci priblíženia CPA⁵ [12, 13, 14]. Hlavnú úlohu v rámci tohto priblíženia zohráva predstava efektívneho média, ktoré je popísané v rámci Nambu-Gorkovho formalizmu Greenovou funkciou⁶:

$$\hat{G}_M^{-1} = \hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma},$$

kde $\hat{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega_n) = i\omega_n\tau_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3$ zodpovedá Greenovej funkcii v čistom systéme a $\hat{\Sigma}_n = -i\Gamma_n\tau_0 + \Phi_n\tau_1 + \chi_n\tau_3$ označuje lokálnu (t.j. od vlnového vektora nezávislú), translačne invariantnú self-energiu generovanú nečistotami a párujúcimi interakciami. Oba členy vyjadrujeme na imaginárnej osi v jazyku matsubarovských premenných, číslovaných indexom n a symboly τ_i zodpovedajú Pauliho maticiam⁷.

Následne, v rámci CPA hľadáme jednotlivé zložky self-energie tak, aby sme pomocou nej čo najlepšie popísali rozptylové procesy na náhodne rozmiestnených nečistotách. Ukáže sa, že v jej prítomnosti elektrón interaguje so zmenšeným zbytkovým potenciálom $\hat{V} - \hat{\Sigma}$. Samotnú self-energiu volíme takým spôsobom, aby čo najlepšie popisovala rozptyly na náhodnom potenciáli. Optimálny výber sa dosiahne tak, že žiadame, aby diagonálna zložka T-matice popisujúcej rozptyl na zbytkovom potenciáli bola v priemere (stredovaná cez rozptyl) nulová, teda $\langle \hat{T} \rangle = 0$. S odvolaním sa na dodatky k nášmu článku [H1], uvádzame výslednú rovnicu, ktorú treba v rámci všeobecného formalizmu CPA riešiť:

$$\langle \hat{T} \rangle = \left\langle (\hat{V} - \hat{\Sigma}) \left[\mathbf{1} - \hat{G}_{loc}(\hat{V} - \hat{\Sigma}) \right]^{-1} \right\rangle = 0, \quad (4)$$

kde $\hat{G}_{loc} = (\hat{G}_M)_{ii}$ označuje diagonálnu časť (v priestorových súradniciach) Greenovej funkcie efektívneho média a $\langle \ \rangle$ označuje stredovanie cez rozptylový potenciál.

Keďže⁸ v našom prípade budeme s CPA formalizmom pracovať v supravodivom stave, rozptylový potenciál:

$$\hat{V} = \bar{\Delta}\tau_1 + V\tau_3 + U\tau_0, \quad (5)$$

obsahuje nie len polia popisujúce interakcie so ZP rozptylovými (U) a NP rozptylovými⁹

⁵Formalizmu CPA venujeme podrobnejšiu pozornosť v dodatkoch ku článku [H1].

⁶V dodatku B je v rámci teórie lineárnej odozvy zavedená Greenova funkcia prostredníctvom Kubovej formuly ako funkcia odozvy uvažovanej fyzikálnej veličiny na slabú poruchu.

⁷Viac o Nambu-Gorkovovom formalizme sa dá dočítať v dodatku A.

⁸V tejto a nasledujúcej podkapitole si dovoľíme okrem výsledkov uviesť aj pár detailov (v minimálnom množstve), ktoré by zvedavému čitateľovi pri troške trpezlivosti mali stačiť na reprodukovanie našich najdôležitejších výsledkov. Naším cieľom je tak čitateľovi poskytnúť nie len "vôňu navareného jedla", ale taktiež "autentický pohľad do kuchyne". Čitateľ, ktorý ide výhradne po výsledkoch, môže spokojne prejsť k výsledkom pre funkciu energetickej medzery $\Delta(\omega)$ a renormalizácie vlnovej funkcie $Z(\omega)$ vo forme (13).

⁹V skutočnosti by sme pre správne zahrnutie NP rozptylov mali zaviesť prímiesné magnetky a väzbu

(V) nečistotami, ale taktiež BCS párovanie zahrnuté v $\bar{\Delta}$. Dodajme taktiež, že náhodné polia U a V majú v našich úvahách charakter bieleho šumu (ich hodnoty v rôznych bodoch mriežky sú nekorelované) a sú popísané spojitými, navzájom nezávislými rozdeleniami $P_s(U)$ a $P_m(V)$.

Sústredme sa priamo na nami odvodenú, výslednú, komplexnú rovnicu CPA formalizmu v supravodivom stave. Za predpokladu prítomnosti oboch typov rozptylových procesov pre reálne neznáme Γ_n a Φ_n , zavedené v definícii self-energie (v priebehu zjednodušovania rovníc sa dá nahliadnuť že $\chi_n = 0$) získavame:

$$\left\langle \frac{z_n + \delta_n - \Lambda_n}{(z_n + \delta_n - \Lambda_n)(z_n^* + \delta_n + \Lambda_n) + \mu^2} \right\rangle_{\mu, \lambda} = z_n, \quad (6)$$

Upozorníme, že v rovnici (6) sme zaviedli bezrozmerné náhodné potenciály $\mu = \pi N_0 U$, $\lambda = \pi N_0 V$ a namiesto Φ_n a Γ_n sme zaviedli pomocné premenné:

$$\begin{aligned} z_n = x_n + iy_n &= \frac{\Phi_n + i(\omega_n + \Gamma_n)}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \Phi_n^2}}, \\ \gamma_n = \pi N_0 \Gamma_n, \quad \Lambda_n = \lambda + i\gamma_n, \quad \delta_n &= \pi N_0 (\bar{\Delta} - \Phi_n). \end{aligned} \quad (7)$$

Pripomeňme, že $\langle \cdot \rangle_{\mu, \lambda}$ značí stredovanie cez párne, v našom prípade priestorovo nekorelované funkcie $P_s(U)$ a $P_m(V)$, zodpovedajúce spojitým rozdeleniam rozptylových potenciálov pre NP (alebo aj magnetické) a ZP (alebo aj skalárne) nečistoty.

Hoci je komplexná rovnica vo forme (6) spoločne s (7) pripravená pre numerické self-konzistenté riešenie, v tejto práci sa budeme zaoberať jej analytickým riešením pre normálnu a anomálnu self-energiu: Γ_n a Φ_n . Alternatívne budeme používať aj prirodzenejšie premenné energetickej medzery Δ_n a renormalizácie vlnovej funkcie Z_n :

$$\Delta_n = \Phi_n / Z_n, \quad Z_n = 1 + \Gamma_n / \omega_n. \quad (8)$$

Dynesov supravodič

V tejto časti sa pozrieme priamo na najdôležitejší výsledok z článku [H1], ktorý sa týka riešenia CPA rovníc zo vzťahu (6) v prípade, ak pre spojité rozdelenie nečistôt, vedúcich k NP rozptylom budeme uvažovať¹⁰:

$$P_m(V) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{V^2 + \Gamma^2}, \quad (9)$$

na ne. V našom priblížení si však vystačíme s priestorovo závislým magnetickým polom, polarizovaným len v jednom smere.

¹⁰Analýzu numerického riešenia CPA rovníc v prípade, keď uvažujeme iné typy rozdelení uvádzame v dodatku D.

podobne ako v Lloydovom modeli [15]. Voľba $P_s(U)$ môže byť pritom úplne ľubovoľná. Keďže úlohou tohto dokumentu má byť hlavne prezentácia našich hlavných výsledkov a ich zaradenie do širšieho kontextu v štúdiu špinavých supravodičov, ohľadom (málo podstatných) technikalít sa odvoláme na články, alebo na dodatky k dizertačnej práci. Sústreďme sa teraz len na Lloydov model pre magnetické nečistoty a preintegrujme v CPA rovnici (6) cez λ , dostaneme:

$$\left\langle \frac{\zeta_n}{\mu^2 + |\zeta_n|^2} \right\rangle_\mu = z_n, \quad (10)$$

kde sme zaviedli premenné: $\zeta_n = x_n + \delta_n + i(y_n + \lambda_0 - \gamma_n)$ a $\lambda_0 = \pi N_0 \Gamma$. Pripomeňme, že podmienky spomínanej integrácie sú rozobrané v článku [H1]. Pre nás je momentálne dôležité, že v rovnici (10) sa môžeme prostredníctvom porovnania modulov a fáz komplexných čísel na pravej a ľavej strane dopracovať k analytickému riešeniu pre Δ_n , resp. Z_n . Porovnanie amplitúd vedie k:

$$\int d\mu P_s(\mu) \frac{|\zeta|}{\mu^2 + |\zeta|^2} = 1, \quad (11)$$

kde môžeme uvažovať $\zeta_n = \zeta$, pretože pravá strana je od n nezávislá. Z porovnania fáz dostávame priamo vzťah:

$$\Delta_n = \frac{\omega_n \bar{\Delta}}{\omega_n + \Gamma}. \quad (12)$$

Pre úplnosť budeme výsledné vzťahy prostredníctvom zámény $i\omega_n \rightarrow \omega + i0$ formulovať priamo na reálnej osi v jazyku $\Delta(\omega)$ a $Z(\omega)$:

$$\Delta(\omega) = \bar{\Delta} / \left(1 + \frac{i\Gamma}{\omega}\right), \quad Z(\omega) = \left(1 + \frac{i\Gamma}{\omega}\right) \left(1 + \frac{i\Gamma_s}{\Omega(\omega)}\right), \quad (13)$$

kde:

$$\Gamma_s = (1 - |\zeta|)/\pi N_0, \quad \Omega(\omega) = \sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}. \quad (14)$$

Pre ilustráciu Γ_s je potrebná voľba konkrétneho rozdelenia $P_s(U)$. Využitím (11) je jednoduché ukázať, že v prípade voľby lorentzovského rozdelenia pre skalárne nečistoty, zodpovedá Γ_s akurát jeho šírke.

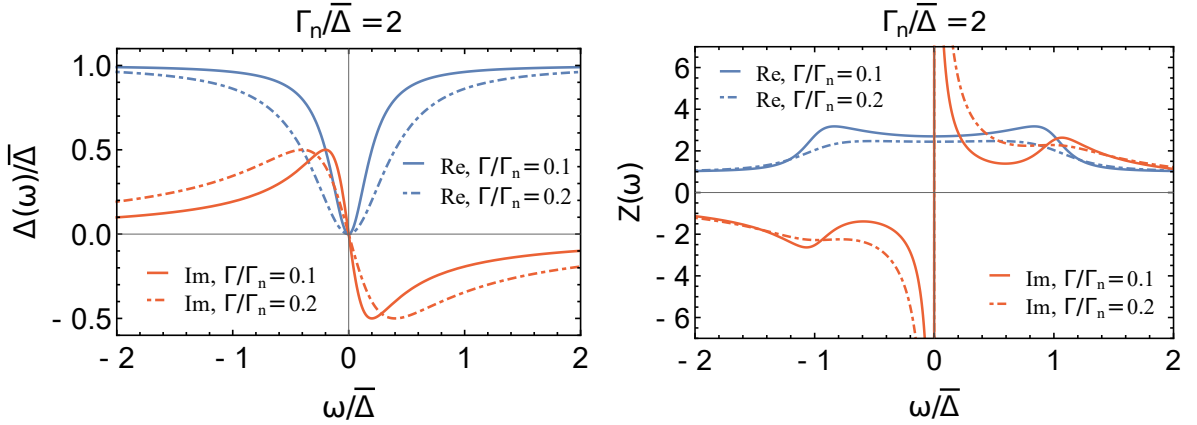
Ako môžeme vidieť, vzťah pre funkciu energetickej medzery $\Delta(\omega)$ z (13) je totožný s (3) a v kombinácii s hustotou stavov (2) vedie na tvar tzv. Dynesovej formuly [6]:

$$N(\omega) = N_0 \operatorname{Re} \left[\frac{\omega + i\Gamma}{\sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}} \right], \quad (15)$$

kde Γ zodpovedá roptylovej konštante, merajúcej pravdepodobnosť rozptylu elektrónu

na NP nečistote. V tomto balení má teda Γ jednoznačne definovaný charakter, zodpovedajúci vplyvu magnetických nečistôt.

Pre úplnosť znázorníme výsledok (13), kódujúci úplnú informáciu o jednočasticových vlastnostiach elektrónov v supravodivom stave rozptyľujúcich sa na ZP a NP nečistotách aj graficky prostredníctvom obr. 7. Okrem očakávaného limitného správania $\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} \Delta(\omega) = \bar{\Delta}$ a $\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} Z(\omega) = 1$ si môžeme všimnúť aj to, že pre ľubovoľne malú rozptyľovú konštantu Γ je $\lim_{\omega \rightarrow 0} \Delta(\omega) = 0$. Upozorníme, že takéto správanie $\Delta(\omega)$ je nevyhnutné pre to, aby hustota tunelových stavov (15) nadobúdala na Fermiho energii konečnú hodnotu.



Obr. 7: Príklad reálnej a imaginárnej časti $\Delta(\omega)$ a $Z(\omega)$ znázorňujúci ich správanie uvažujúc konečnú hodnotu Γ a Γ_s . Upozorníme, že $\Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$ reprezentuje celkovú rozptyľovú konštantu v normálnom stave.

Zaujímavý je taktiež pohľad na náš výsledok z (13), z pohľadu jednotlivých príspevkov k self-energii:

$$\begin{aligned} \Phi(\omega) &= Z(\omega)\Delta(\omega), & \Gamma(\omega) &= i\omega(1 - Z(\omega)), \\ &= \bar{\Delta} \left(1 + \frac{i\Gamma_s}{\Omega(\omega)} \right), & &= \Gamma + \Gamma_s \frac{\omega + i\Gamma}{\Omega(\omega)}. \end{aligned} \quad (16)$$

V prípade normálneho stavu môžeme z (16) pozorovať, že $\Gamma(\omega) = \Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$ prirodzene nie je nulová, avšak NP a ZP nečistoty v nej zohrávajú úplne rovnocennú úlohu, presne podľa očakávaní.

Ak sa na (16) pozrieme v supravodivom prípade, môžeme zbadáť rozdiel, akým vchádza do hry Γ a Γ_s . Ak by sme uvažovali (treba povedať, že z pohľadu experimentu zrejme dosť neštandardný) prípad, v ktorom $\Gamma_s = 0$, obe časti self-energie by boli čisté konštanty. Možno teda povedať, že vplyv nečistôt vedúcich k ZP rozptyľom sa prejaví práve frekvenčnou závislosťou self-energie. Konkrétna závislosť je už samozrejme diktovaná oboma typmi nečistôt spoločne s vplyvom supravodivosti.

Keďže máme k dispozícii ako $\Delta(\omega)$ tak aj $Z(\omega)$, môžeme skompletizovať náš popis

jednočasticových vlastností Dynesovho supravodiča. Ukazuje sa, že Greenova funkcia, ktorá ho popisuje, sa dá v elegantnom balení Nambu-Gorkovho formalizmu zapísať ako matica 2×2 nasledujúcim spôsobom [H3]:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} \not{\partial} \ln \left[\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon(\omega)^2 \right], \quad \epsilon(\omega) = \sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2} + i\Gamma_s. \quad (17)$$

kde $\not{\partial} = \tau_0 \frac{\partial}{\partial \omega} - \tau_1 \frac{\partial}{\partial \Delta} - \tau_3 \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}$ a symboly τ_i označujú Pauliho matice. V (17) sme predstavili funkciu $\epsilon(\omega)$, ktorá sa pre Dynesov supravodič líši od čistého BCS prípadu minimálnym spôsobom: vplyv ZP procesov je zahrnutý jednoduchou zámenou $\epsilon(\omega) \rightarrow \epsilon(\omega) + i\Gamma_s$, zatiaľ čo NP procesy sa prejavujú posunom frekvencií: $\omega \rightarrow \omega + i\Gamma$, podobne ako v Lloydovom modeli v normálnom stave.

Štruktúra (17) ukazuje, že na teóriu Dynesových supravodičov sa dá v tomto balení pozeráť aj fenomenologicky (bez technicky dlhého riešenia CPA rovníc), ako na veľmi prirodzené a minimalistické rozšírenie BCS teórie.

Microscopic interpretation of the Dynes formula for the tunneling density of states

František Herman and Richard Hlubina

Department of Experimental Physics, Comenius University, Mlynská Dolina F2, 842 48 Bratislava, Slovakia

(Received 6 June 2016; revised manuscript received 16 August 2016; published 14 October 2016)

Excellent fits of the tunneling density of states in disordered superconductors can be often achieved making use of the phenomenological Dynes formula. However, no consistent derivation of this formula has been available so far. The Dynes formula can be interpreted by the simplest causal frequency-dependent gap function $\Delta(\omega)$ with a vanishing gap at the Fermi level. Here we show, within the coherent potential approximation, that precisely such a gap function describes superconductors with a Lorentzian distribution of pair-breaking fields and arbitrary potential disorder. We predict spectral and thermodynamic properties of such superconductors.

DOI: 10.1103/PhysRevB.94.144508

I. INTRODUCTION

The tunneling density of states $N(\omega)$ is a basic characteristic of the single-particle properties of superconductors. The knowledge of $N(\omega)$ has played a major role in identification of the pairing mechanism in conventional superconductors, and with a similar aim $N(\omega)$ is often also studied in modern superconductors [1]. On the other hand, $N(\omega)$ is also used as a diagnostic tool enabling us to discover the existence of pair-breaking processes in superconductors and to quantify their extent [2]. Such studies are important from the basic physics point of view, for instance in the context of the still not completely understood superconductor-insulator transitions [3,4], but also from the point of view of applied physics, since in many electronic applications of superconductors such pair-breaking processes are to be avoided [5].

The presence of pair-breaking processes shows up in the tunneling experiment as a finite density of states within the ideal superconducting gap $\bar{\Delta}$. Long ago, a simple phenomenological formula has been proposed for superconductors with such processes [6],

$$N(\omega) = N_0 \text{Re} \left[\frac{\omega + i\Gamma}{\sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}} \right], \quad (1)$$

which is now known as the Dynes formula. The parameter Γ in this formula quantifies the effect of the pair-breaking processes, and N_0 is the normal-state density of states at the Fermi level.

In order to demonstrate the quality of fits which can be achieved making use of Eq. (1), in Fig. 1 we reproduce the recently measured low-temperature tunneling data on a series of MoC films with varying thickness [4], together with their fits to the Dynes formula. Similarly perfect agreement between experimental data for disordered superconductors and the Dynes formula has in fact been observed quite frequently, see, e.g., Refs. [7,8], indicating that Eq. (1) should be caused by a generic mechanism.

The only mechanism leading to the Dynes formula which has been suggested so far postulates that its appearance in tunneling experiments is caused by inelasticity of the tunneling process [9]. However, this mechanism can not explain the systematic changes of $N(\omega)$ observed in Fig. 1, which must have a truly intrinsic origin. The aim of this paper therefore is

to propose a generic and intrinsic microscopic interpretation of the Dynes formula.

II. GAP FUNCTION

Let us start by noting that, within the Eliashberg theory, $N(\omega)$ is completely determined, once the gap function $\Delta(\omega)$ is known:

$$N(\omega) = N_0 \text{Re} \left[\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right]. \quad (2)$$

According to Eq. (1), $N(\omega)$ is finite at the Fermi level and this requires that $\Delta(\omega)$ vanishes as $\omega \rightarrow 0$. The gap function $\Delta(\omega)$ should also be causal, i.e., analytic in the upper half plane, and it should approach $\bar{\Delta}$ in the high-energy limit. It is known [10] that the simplest function with these properties,

$$\Delta(\omega) = \frac{\omega \bar{\Delta}}{\omega + i\Gamma}, \quad (3)$$

does lead to the Dynes formula, when inserted into Eq. (2). Therefore our task in the rest of this paper is to find a microscopic explanation of Eq. (3).

It is worth pointing out that Mikhailovsky *et al.* [10] did find a mechanism leading to Eq. (3). In fact, by a careful analysis of the Eliashberg equations they have shown that Eq. (3) applies even in a clean system, since the electron-phonon scattering has also a pair-breaking component at finite temperatures T . However, the mechanism of Mikhailovsky *et al.* predicts that Γ scales with T according to $\Gamma \propto T^3$, and therefore it is not of direct relevance to the experiments of Refs. [4,7,8] and the like, where the parameter Γ is only weakly T dependent and does not vanish in the low-temperature limit.

The explanation of Eq. (3) should be therefore sought in the presence of elastic pair-breaking processes, such as scattering on magnetic impurities [11] and/or fluctuating order parameter [12]. However, the latter possibility seems to be ruled out by the spatial homogeneity of the tunneling spectra observed in Ref. [4]. Moreover, a fluctuating order parameter is expected to produce appreciable change of $N(\omega)$ only for $|\omega| \approx \bar{\Delta}$ [12]. Therefore in this paper we will concentrate only on the effect of magnetic impurities.

It should be pointed out that, when the magnetic impurities are treated in the Born approximation [11], the functional form Eq. (3) does arise, but only in the limit $\Gamma \gg \bar{\Delta}$, which is not

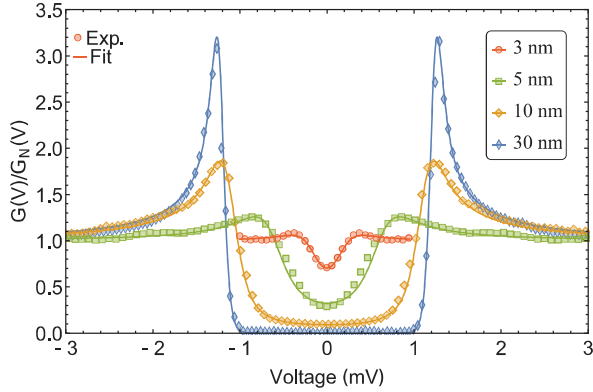


FIG. 1. Normalized tunneling conductance of thin MoC films with varying thickness at $T \approx 500$ mK, from Ref. [4], with fits to the thermally smeared Dynes formula. For further details see Appendix F.

of direct relevance to the data in Fig. 1. Subsequent theoretical work which went beyond the Born approximation concentrated on the limit of dilute magnetic impurities. Within the T-matrix approximation, which should be essentially exact in the dilute impurity limit, Shiba has found magnetic impurity-induced bound states inside the energy gap in the absence of additional potential disorder [13], and the precise energy of such bound states was found to depend on the coupling strength to the impurities. Furthermore, finite concentration of magnetic impurities was shown to lead to the formation of impurity bands centered at the bound-state energies, see Fig. 2. Provided the magnetic impurities are dilute, later it was shown that the presence of additional strong potential disorder does not change these results [14], and very recently it has been argued that even going beyond mean-field theory leads to only marginal changes of Shiba's results [15].

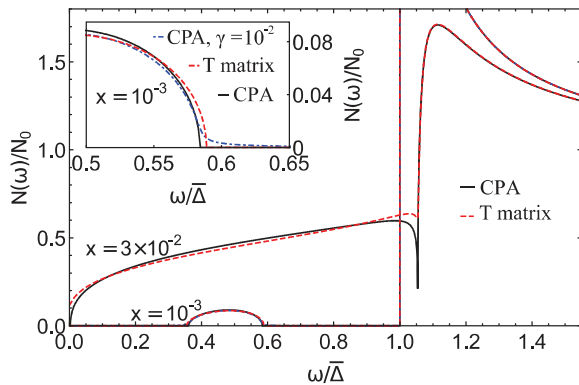


FIG. 2. $N(\omega)$ for a superconductor with dilute pair-breaking impurities with $\lambda_0 = 0.6$ and $\pi N_0 \bar{\Delta} = 0.05$. Results for two impurity concentrations are shown, $x = 0.001$ and $x = 0.03$. The inset shows that, within CPA, the hard spectral edge of the impurity band softens if we replace the delta functions in Eq. (6) by Lorentzians with widths γV_0 .

It seems to be clear then that, in order to reproduce Eq. (1) in the physically relevant case $\Gamma \lesssim \bar{\Delta}$, one has to allow for spatially varying coupling strengths to impurities, but in such a way which leads to a spatially uniform gap function. This forces us to allow for a dense distribution of impurities, and therefore we have to abandon the previously used techniques [13–15]. In this paper we have chosen to make use of the coherent potential approximation (CPA), which is well known to provide a successful description of single-particle properties in disordered systems [16–18].

III. CPA EQUATIONS

Within CPA we look for an averaged Nambu-Gorkov Green's function \hat{G}_M defined by $\hat{G}_M^{-1} = \hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}$, where $\hat{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega_n) = i\omega_n \tau_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_3$ is the bare Green's function and $\hat{\Sigma}_n = -i\Gamma_n \tau_0 + \Phi_n \tau_1 + \chi_n \tau_3$ is a local translationally invariant self-energy generated by disorder and pairing interactions. We work in imaginary time formalism, the index n denotes the Matsubara frequency, and τ_i are the Pauli matrices.

For the impurity potential we take

$$\hat{V} = \bar{\Delta} \tau_1 + U \tau_3 + V \tau_0.$$

The first term is the spatially homogeneous pairing interaction; the second term is a fluctuating potential which is usually large in samples described by Eq. (1), and the last term is a much weaker classical pair-breaking field, polarized along a fixed direction in spin space [19]. We assume that the fields U and V are distributed according to independent and spatially uncorrelated even functions $P_s(U)$ and $P_m(V)$.

In CPA the self-energy $\hat{\Sigma}$ is chosen so that, on average, electrons described by \hat{G}_M do not scatter on the random potential \hat{V} . As shown in Appendix A, this leads to the following self-consistent equation for the self-energy,

$$\langle (\hat{V} - \hat{\Sigma})[\mathbf{1} - \hat{G}_{\text{loc}}(\hat{V} - \hat{\Sigma})]^{-1} \rangle_{U,V} = 0, \quad (4)$$

where the angular brackets denote averaging with respect to U, V and $\hat{G}_{\text{loc}} = (\hat{G}_M)_{ii}$ is the diagonal component (in coordinate space) of \hat{G}_M .

For a particle-hole symmetric system, the defining Eq. (4) of CPA is compatible with $\chi_n = 0$, see Appendix B. In what follows we use dimensionless pair-conserving and pair-breaking fields $\mu = \pi N_0 U$ and $\lambda = \pi N_0 V$, respectively. For convenience, we also make use of the dimensionless quantities $\gamma_n = \pi N_0 \Gamma_n$, $\Lambda_n = \lambda + i\gamma_n$, and $\delta_n = \pi N_0 (\bar{\Delta} - \Phi_n)$, as well as of the auxiliary variables

$$z_n = x_n + iy_n = \frac{\Phi_n + i(\omega_n + \Gamma_n)}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \Phi_n^2}},$$

which satisfy the identity $|z_n|^2 = 1$. In terms of these variables, Eq. (4) can be rewritten as a single complex equation, see Appendix B,

$$\left\langle \frac{z_n + \delta_n - \Lambda_n}{(z_n + \delta_n - \Lambda_n)(z_n^* + \delta_n + \Lambda_n) + \mu^2} \right\rangle_{\mu, \lambda} = z_n. \quad (5)$$

By solving Eq. (5), we can find the normal and anomalous self-energies Γ_n and Φ_n , or, alternatively, the wave-function renormalization $Z_n = 1 + \Gamma_n/\omega_n$ and the gap function $\Delta_n = \Phi_n/Z_n$.

Dilute gas of identical magnetic impurities

In order to proceed, we need to specify the probability distributions $P_s(U)$ and $P_m(V)$. We will start by considering the well studied example with vanishing potential disorder and

$$P_m(V) = (1-x)\delta(V) + \frac{x}{2}[\delta(V-V_0) + \delta(V+V_0)], \quad (6)$$

which describes a set of magnetic impurities with magnetic field $\pm V_0$ and concentration x . Making use of this distribution in Eq. (5) and assuming that $x \ll 1$, to first order in the impurity concentration we find

$$Z_n = 1 + \frac{\Gamma_0(1+\lambda_0^2)\sqrt{\omega_n^2 + \Delta_n^2}}{(1+\lambda_0^2)^2\omega_n^2 + (1-\lambda_0^2)^2\Delta_n^2},$$

$$\bar{\Delta} = \left[1 + 2\Gamma_0 \frac{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta_n^2}}{(1+\lambda_0^2)^2\omega_n^2 + (1-\lambda_0^2)^2\Delta_n^2} \right] \Delta_n,$$

where $\Gamma_0 = x\pi N_0 V_0^2$ and $\lambda_0 = \pi N_0 V_0$. These are the well-known self-consistent equations of the T-matrix approximation [13], which shows that CPA becomes exact in the low-density limit.

In Fig. 2 we compare $N(\omega)$ for a superconductor with a dilute gas of pair-breaking impurities, calculated within the T-matrix approximation and the full CPA. Both approximations result in a qualitatively similar density of states. As expected, the agreement between the two approximations improves as the impurity concentration x decreases. Somewhat surprisingly, CPA predicts systematically narrower impurity bands.

IV. THE DYNES SUPERCONDUCTORS

Now we turn to the main result of this paper. In order to take into account the spatial distribution of coupling strengths to magnetic impurities, instead of Eq. (6) we consider the so-called Lloyd model [20],

$$P_m(V) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{V^2 + \Gamma^2},$$

with a continuous spread of impurity strengths ranging up to $\sim \Gamma$. We emphasize that we don't need to make any further assumptions about $P_s(U)$.

Let us for definiteness consider $\omega_n > 0$ and assume that $y_n > \gamma_n > 0$. Inserting $P_m(V)$ into Eq. (5), we notice that averaging with respect to λ can be readily performed in the complex plane of λ , leading to

$$\left\langle \frac{\zeta_n}{|\zeta_n|^2 + \mu^2} \right\rangle_\mu = z_n, \quad (7)$$

where we have introduced $\zeta_n = (x_n + \delta_n) + i(y_n + \lambda_0 - \gamma_n)$ with $\lambda_0 = \pi N_0 \Gamma$.

Comparing the phases of both sides of Eq. (7) leads to

$$\Delta_n = \frac{\omega_n \bar{\Delta}}{\omega_n + \Gamma}.$$

After analytic continuation to the real axis this result reduces to Eq. (3) meaning that, within CPA, the Lorentzian distribution $P_m(V)$ of pair-breaking fields generates precisely that frequency-dependent gap function $\Delta(\omega)$ which reproduces the Dynes tunneling density of states Eq. (1). Moreover, the Dynes

parameter Γ is given directly by the width of the Lorentzian $P_m(V)$. Note that in the absence of pair breaking, i.e., for $\Gamma = 0$, CPA predicts $\Delta(\omega) = \bar{\Delta}$, which is consistent with the Anderson theorem.

Comparing the amplitudes of both sides of Eq. (7) we find that $|\zeta_n| = F$ is independent of frequency and the constant F is fixed by $\int d\mu P_s(\mu)F/(\mu^2 + F^2) = 1$. The self-energy Γ_n can be determined from $|\zeta_n| = F$. After analytic continuation to the real axis the wave-function renormalization $Z(\omega) = 1 + i\Gamma(\omega)/\omega$ reads

$$Z(\omega) = \left(1 + \frac{i\Gamma_s}{\Omega} \right) \left(1 + \frac{i\Gamma}{\omega} \right), \quad (8)$$

where $\Gamma_s = (1-F)/\pi N_0$ is the pair-conserving scattering rate and $\Omega = [(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2]^{1/2}$. The function $Z(\omega)$ is seen to be a product of two factors. The first factor, due to pair-conserving scattering, reproduces the Born approximation [21], albeit with a generalized Γ_s . The second factor, due to pair-breaking processes, has the same form as found previously for inelastic processes at finite temperatures [10]. Strongly disordered samples which we are interested in are described by $\Gamma \lesssim \bar{\Delta} \ll \Gamma_s$.

The criterion for applicability of our results, $y_n > \gamma_n$, is satisfied for $F > g = \pi N_0(\Gamma^2 + \bar{\Delta}^2)^{1/2}$. If for $P_s(U)$ we take, as an order-of-magnitude estimate, a box distribution of width $2U_0$, we find $F = \pi N_0 U_0 / \tan(\pi N_0 U_0)$. On the other hand, for samples with $\Gamma \lesssim \bar{\Delta}$ we have $g \ll 1$. From here it follows that $F > g$ holds provided that $U_0 \lesssim 1/(2N_0)$, i.e., up to large potential disorder. In Appendix C we argue that the existence of a critical value of U_0 is an artifact of the CPA approximation.

We emphasize that our microscopics goes beyond the phenomenology of Eq. (1) by predicting *both* of the Eliashberg functions, $\Delta(\omega)$ and $Z(\omega)$. The resulting retarded electron Green's function reads

$$\hat{G}_M(\mathbf{k}, \omega) = \frac{(1 + i\Gamma_s/\Omega)[(\omega + i\Gamma)\tau_0 + \bar{\Delta}\tau_1] + \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3}{(\Omega + i\Gamma_s)^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}. \quad (9)$$

Note that Eq. (9) is the simplest consistent generalization of the BCS Green's function which takes into account both the pair-conserving and the pair-breaking scattering processes with rates Γ_s and Γ , respectively. Superconductors described by Eq. (9) will be called Dynes superconductors in what follows.

A. Thermodynamics

Next we consider the thermodynamic properties of the Dynes superconductors. To this end, we realize that the off-diagonal part $\bar{\Delta}$ of the potential \hat{V} has to come from a phonon-induced anomalous self-energy. As shown in detail in Appendix D, within the BCS approximation with dimensionless coupling constant $\lambda \ll 1$ and cutoff frequency Ω , the self-consistent equation for the Dynes superconductors reads as

$$\bar{\Delta} = \lambda\pi T \sum_{\omega_n=-\Omega}^{\Omega} \frac{\bar{\Delta}}{\sqrt{(|\omega_n| + \Gamma)^2 + \bar{\Delta}^2}}. \quad (10)$$

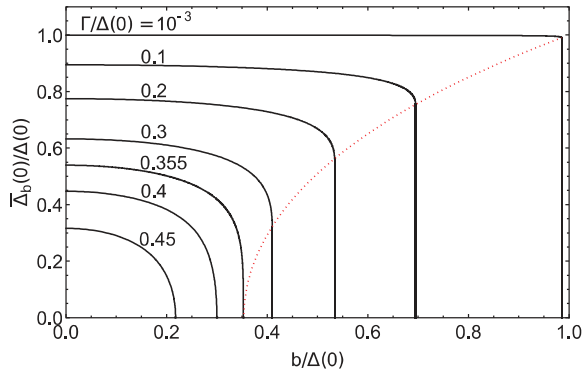


FIG. 3. The order parameter at $T = 0$ in a magnetic field b , $\bar{\Delta}_b(0)$, as a function of b for several Γ . First-order transitions for small Γ are shown by the dotted line.

Making use of Eq. (10), we can calculate the temperature dependence $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}(T)$ as a function of the parameter Γ . We find that the critical temperature of a dirty Dynes superconductor \bar{T}_c is governed by the same equation as in the Abrikosov-Gorkov theory, $\psi(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{x}) - \psi(\frac{1}{2}) = \ln(\frac{1}{x})$, where $\psi(x)$ is the digamma function, $\alpha = \Gamma/(2\pi T_c)$, $x = \bar{T}_c/T_c$, and T_c is the critical temperature of the clean system. This is because, as already mentioned, close to the critical temperature, Eq. (3) applies to superconductors with pair breaking even in the Born approximation.

Below T_c it is convenient to normalize $\bar{\Delta}(T)$ in terms of $\Delta(0)$, the zero-temperature gap of the clean system. At $T = 0$ we find $\bar{\Delta}(0) = \sqrt{\Delta(0)[\Delta(0) - 2\Gamma]}$, therefore the critical disorder strength for complete disappearance of superconductivity is $\Gamma_c = \Delta(0)/2$. The $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}(T)$ curves for varying Γ are essentially BCS-like, as shown in detail in Appendix D. The ratio $\bar{\Delta}(0)/\bar{T}_c$ increases by a factor \mathcal{R} with respect to the clean-system value $\Delta(0)/T_c$, and \mathcal{R} slightly grows with Γ . For $\Gamma \rightarrow \Gamma_c$ we find $\mathcal{R}(\Gamma_c) \approx 1.45$, which is however much less than $\mathcal{R}(\Gamma_c) \approx 2.52$ within the Abrikosov-Gorkov theory.

B. Effect of external magnetic field

Finally we study the density of states of a Dynes superconductor in an external magnetic field B . We assume that the superconductor is sufficiently dirty, so that the suppression of $\bar{\Delta}$ by B can be roughly estimated by keeping only the Zeeman coupling, as explained in Appendix E. In this approximation the effect of B is fully described by simply changing the bare electron Green's function to $\hat{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega_n) = (i\omega_n - b)\tau_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3$ with $b = \mu_B B$. One can check that the CPA expressions remain valid, if we make the substitution $\omega_n \rightarrow \omega_n + ib$. In particular, Eq. (10) is replaced by the following self-consistent equation,

$$\bar{\Delta} = 2\lambda\pi T \sum_{\omega_n > 0} \text{Re} \left[\frac{\bar{\Delta}}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma + ib)^2 + \bar{\Delta}^2}} \right]. \quad (11)$$

As was to be expected, the theory with only Zeeman coupling, Eq. (11), predicts a first-order transition at small Γ , but, as shown in Fig. 3, the transition becomes continuous for $\Gamma >$

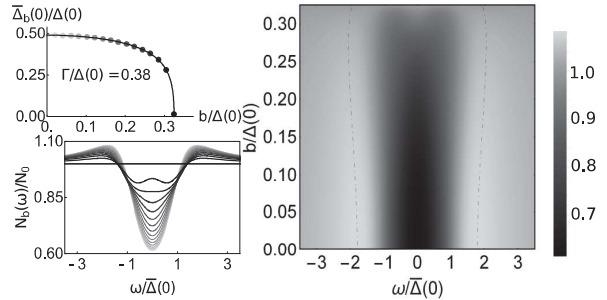


FIG. 4. Right panel: map of $N_b(\omega)$ at $T = 0$ in the (ω, b) plane for a Dynes superconductor with $\Gamma/\Delta(0) = 0.38$. The dash-dotted curve marks the positions of the maxima of $N_b(\omega)$ at fixed b . The lower left panel shows $N_b(\omega)$ for several values of b . The self-consistent values of $\bar{\Delta}_b(0)$ for the same b values are plotted in the upper left panel.

$\Gamma_c \approx 0.355\Delta(0)$, as one would expect in the full theory with orbital effects included.

In Appendix E we argue furthermore that, sufficiently far away from the vortex cores, the density of states in a finite magnetic field $N_b(\omega)$ can be described by considering only the Zeeman coupling, and this leads to $N_b(\omega) = \sum_{\pm} N(\omega \pm b)/2$. In Fig. 4 we plot the evolution of $N_b(\omega)$ with b for a Dynes superconductor with $\Gamma/\Delta(0) = 0.38$. Due to the Zeeman coupling, the peak-to-peak distance of the density of states exhibits only small changes with b , up to the critical field b_c . This means that gap filling rather than gap closing with increasing b can be observed in dirty Dynes superconductors. Note, however, that the order parameter $\bar{\Delta}_b(0)$ does behave in a standard way and vanishes at b_c , see the left panel of Fig. 4. Very recently, similar behavior of $N(\omega)$ in magnetic fields has been observed experimentally [22].

V. CONCLUSIONS

We have identified a class of gapless superconductors, the Dynes superconductors, which are distinguished by a sufficiently broad distribution of pair-breaking fields. The Dynes superconductors are described by two scattering rates, Γ_s and Γ , for pair-conserving and pair-breaking processes, respectively. The Green function of a canonical Dynes superconductor is given by Eq. (9). We have shown that this functional form follows from the CPA equations with a Lorentzian distribution of pair-breaking fields and arbitrary potential disorder. The Dynes superconductors are always gapless from T_c all the way down to the lowest temperatures, and their thermodynamic properties differ from predictions of the Abrikosov-Gorkov theory.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank P. Szabó for sending us the data presented in Fig. 1, and P. Markoš, P. Samuely, and M. Grajcar for discussions. This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contract No. APVV-0605-14 and by the Agency VEGA under Contract No. 1/0904/15.

APPENDIX A: COHERENT POTENTIAL APPROXIMATION

For convenience we present a short sketch of the derivation of Eq. (4) from the main text. Let \hat{G} be the full Green's function of the disordered system (i.e., a matrix whose indices describe the lattice sites and the Nambu components) and let \hat{G}_0 be the bare Green's function of the clean system. Then \hat{G} satisfies the matrix equation

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}, \quad (\text{A1})$$

which corresponds to repeated scattering of the bare electrons (described by \hat{G}_0) by the random potential \hat{V} . Equivalently, Eq. (A1) can be written in terms of the T matrix \hat{T}_0 in the form $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{T}_0 \hat{G}_0$. Comparing these two expressions for \hat{G} , one finds easily that

$$\hat{T}_0 = \hat{V}(\mathbf{1} - \hat{G}_0 \hat{V})^{-1}. \quad (\text{A2})$$

In CPA we look for an optimal averaged Nambu-Gorkov Green's function \hat{G}_M describing the disordered medium. Let us express this effective Green's function in terms of the self-energy by the Dyson equation

$$\hat{G}_M^{-1} = \hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}. \quad (\text{A3})$$

From similar considerations which led to Eq. (A1) it follows that the full Green's function of the disordered system \hat{G} satisfies the matrix equation

$$\hat{G} = \hat{G}_M + \hat{G}_M(\hat{V} - \hat{\Sigma})\hat{G}, \quad (\text{A4})$$

which shows that electrons described by the effective Green's function \hat{G}_M interact with a reduced potential $\hat{V} - \hat{\Sigma}$.

In order to fix the optimal self-energy $\hat{\Sigma}$, let us rewrite Eq. (A4) for the full Green's function \hat{G} in terms of the T matrix of the effective medium \hat{T} by $\hat{G} = \hat{G}_M + \hat{G}_M \hat{T} \hat{G}_M$. A calculation completely analogous to that leading to Eq. (A2) leads then to an expression for the T matrix of the effective medium:

$$\hat{T} = (\hat{V} - \hat{\Sigma})[\mathbf{1} - \hat{G}_M(\hat{V} - \hat{\Sigma})]^{-1}. \quad (\text{A5})$$

Note that Eq. (A5) differs from Eq. (A2) by simply replacing \hat{V} by $\hat{V} - \hat{\Sigma}$ and \hat{G}_0 by \hat{G}_M , i.e., \hat{T} describes residual scattering on disorder, not taken into account in the effective medium description. Two points are to be noted: (i) \hat{T} for a given sample depends on the choice of the random potential, and (ii) \hat{T} is a matrix in the coordinate space.

Now it is natural to choose the effective medium so that, after averaging over disorder, the residual scattering is minimized, $\langle \hat{T} \rangle = 0$. Within CPA one requires that only the site-diagonal components of the T matrix vanish. This leads to the self-consistent equation [17]

$$\langle (\hat{V} - \hat{\Sigma})[\mathbf{1} - \hat{G}_{\text{loc}}(\hat{V} - \hat{\Sigma})]^{-1} \rangle = 0,$$

where $\hat{G}_{\text{loc}} = (\hat{G}_M)_{ii}$ is the diagonal component (in coordinate space) of \hat{G}_M . This is Eq. (4) from the main text.

APPENDIX B: DERIVATION OF EQ. (5)

Let us take for the self-energy the ansatz $\hat{\Sigma} = -i\Gamma_n\tau_0 + \Phi_n\tau_1 + \chi_n\tau_3$ from the main text, and making use of Eq. (A3)

let us calculate the averaged Green's function $\hat{G}_M(\mathbf{k}, \omega_n)$. We find

$$\hat{G}_M(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{i(\omega_n + \Gamma_n)\tau_0 + \Phi_n\tau_1 + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi_n)\tau_3}{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \Phi_n^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi_n)^2}. \quad (\text{B1})$$

The local Green's function $\hat{G}_{\text{loc}}(\omega_n)$ can be found by Fourier transforming the function $\hat{G}_M(\mathbf{k}, \omega_n)$ from momentum (\mathbf{k}) to real (\mathbf{r}) space and by taking $\mathbf{r} = 0$. Replacing the momentum summation by energy integration and assuming a constant density of states N_0 in the vicinity of the Fermi level, a standard calculation leads to

$$\hat{G}_{\text{loc}}(\omega_n) = -\pi N_0 \frac{i(\omega_n + \Gamma_n)\tau_0 + \phi_n\tau_1}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \phi_n^2}}. \quad (\text{B2})$$

Note that, as usual, the component of \hat{G}_{loc} proportional to the Pauli matrix τ_3 vanishes. This is a consequence of the assumed particle-hole symmetry of the problem.

Evaluating the matrix inverse entering Eq. (4) is straightforward, since $\hat{G}_{\text{loc}}, \hat{V}$, and $\hat{\Sigma}$ are matrices 2×2 . Making use of the explicit form of the potential $\hat{V} = \bar{\Delta}\tau_1 + U\tau_3 + V\tau_0$ from the main text we find

$$[\tau_0 - \hat{G}_{\text{loc}}(\hat{V} - \hat{\Sigma})]^{-1} = \frac{a_n\tau_0 + ib_n\tau_1 + ic_n\tau_2 + id_n\tau_3}{a_n^2 + b_n^2 + c_n^2 + d_n^2}, \quad (\text{B3})$$

where we have introduced auxiliary variables

$$a_n = 1 + \pi N_0 \frac{i(\omega_n + \Gamma_n)(V + i\Gamma_n) + \phi_n(\bar{\Delta} - \phi_n)}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \phi_n^2}},$$

$$b_n = \pi N_0 \frac{i\phi_n(V + i\Gamma_n) - (\omega_n + \Gamma_n)(\bar{\Delta} - \phi_n)}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \phi_n^2}},$$

$$c_n = \pi N_0 \frac{\phi_n(U - \chi_n)}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \phi_n^2}},$$

$$d_n = \pi N_0 \frac{(\omega_n + \Gamma_n)(\chi_n - U)}{\sqrt{(\omega_n + \Gamma_n)^2 + \phi_n^2}}.$$

Inserting the result Eq. (B3) into Eq. (4), we obtain four equations, which follow from requiring that the coefficients in front of the Pauli matrices τ_i with $i = 0, \dots, 3$ vanish:

$$\left\langle \frac{(V + i\Gamma_n)a_n + i(\bar{\Delta} - \phi_n)b_n + i(U - \chi_n)d_n}{a_n^2 + b_n^2 + c_n^2 + d_n^2} \right\rangle = 0, \quad (\text{B4})$$

$$\left\langle \frac{i(V + i\Gamma_n)b_n + (\bar{\Delta} - \phi_n)a_n + (U - \chi_n)c_n}{a_n^2 + b_n^2 + c_n^2 + d_n^2} \right\rangle = 0, \quad (\text{B5})$$

$$\left\langle \frac{i(V + i\Gamma_n)c_n + (\bar{\Delta} - \phi_n)d_n - (U - \chi_n)b_n}{a_n^2 + b_n^2 + c_n^2 + d_n^2} \right\rangle = 0, \quad (\text{B6})$$

$$\left\langle \frac{i(V + i\Gamma_n)d_n - (\bar{\Delta} - \phi_n)c_n + (U - \chi_n)a_n}{a_n^2 + b_n^2 + c_n^2 + d_n^2} \right\rangle = 0. \quad (\text{B7})$$

If one makes use of the explicit form of the auxiliary variables a_n, b_n, c_n , and d_n , the last two equations (B6) and (B7) can be easily solved. In fact, Eq. (B6) is trivially satisfied, and Eq. (B7) can be written as

$$\left\langle \frac{U - \chi_n}{a_n^2 + b_n^2 + [\pi N_0(U - \chi_n)]^2} \right\rangle = 0.$$

Note that the variables a_n and b_n do not include the scalar potential U . But since the distribution function $P(U)$ is supposed to be even, one checks easily that Eq. (B7) is solved by requiring $\chi_n = 0$.

Finally, if we take the sum and the difference of Eqs. (B4) and (B5) and if we make use of the result $\chi_n = 0$, we obtain another set of two equations. They can be written down in a simple form by using the dimensionless variables μ , Λ_n, δ_n , and z_n defined in the main text:

$$\left\langle \frac{(\delta_n + \Lambda_n)(1 + z_n^*(\delta_n - \Lambda_n)) + z_n^* \mu^2}{(1 + z_n^*(\delta_n - \Lambda_n))(1 + z_n(\delta_n + \Lambda_n)) + \mu^2} \right\rangle = 0,$$

$$\left\langle \frac{(\delta_n - \Lambda_n)(1 + z_n(\delta_n + \Lambda_n)) + z_n \mu^2}{(1 + z_n^*(\delta_n - \Lambda_n))(1 + z_n(\delta_n + \Lambda_n)) + \mu^2} \right\rangle = 0.$$

Assuming that ϕ_n and Γ_n are purely real, we can easily see that they reduce to just one equation after complex conjugation and substitution $V \rightarrow -V$ in one of them. After some trivial algebra we are therefore left with just one complex integral CPA equation in the form of Eq. (5) from the main text.

APPENDIX C: CPA IN THE NORMAL STATE

In the normal state our model for disorder implies that electrons with spin σ experience a random potential $W = U + \sigma V$ with distribution functions

$$P_\sigma(W) = \int dU \int dV P_s(U) P_m(V) \delta(U + \sigma V - W). \quad (\text{C1})$$

Note that since $P_m(V)$ is even, we have $P_\uparrow(W) = P_\downarrow(W) \equiv P(W)$. In the upper half-plane $\omega_n > 0$, Eq. (4) from the main text is solved for this distribution function by a frequency-independent self-energy $\Sigma_n = -i\Gamma_N$, where $\Gamma_N = (1 - F_N)/(\pi N_0)$ and the constant F_N is given by

$$1 = \left\langle \frac{F_N}{F_N^2 + (\pi N_0 W)^2} \right\rangle_W. \quad (\text{C2})$$

Note that Eq. (C2) does not have a solution for sufficiently broad distributions $P(W)$. This is an artifact of the CPA, as can be shown readily, if we take for $P_s(U)$ and $P_m(V)$ Lorentzians with widths Γ_s and Γ , respectively. In fact, in that case also $P(W)$ is a Lorentzian with width $\Gamma + \Gamma_s$ and Eq. (C2) implies that $1 - F_N = \pi N_0(\Gamma + \Gamma_s)$, or, in other words, the normal-state self-energy is given by the width of $P(W)$, $\Gamma_N = \Gamma + \Gamma_s$. However, since Eq. (C2) clearly requires that $F_N > 0$, the CPA solution is valid only for $\pi N_0 \Gamma_N < 1$.

On the other hand, as shown by Lloyd [20], the normal-state model with a Lorentzian distribution $P(W)$ is exactly solvable for all values of Γ_N , thus the criterion $\pi N_0 \Gamma_N < 1$ can not have any physical meaning and it must be an artifact of the CPA. It should be pointed out, however, that in its region of validity, the CPA does reproduce the exact self-energy of the Lloyd model [20].

APPENDIX D: THERMODYNAMICS OF THE DYNES SUPERCONDUCTORS

Let us assume that the pairing in the Dynes superconductors is driven by a local phonon-mediated electron-electron interaction U_{ph} which is present up to a finite frequency cutoff

Ω . Then, at the mean-field level, the off-diagonal part of the potential \hat{V} is determined by the self-consistent equation

$$\bar{\Delta} = U_{\text{ph}} \langle \psi_\uparrow(\mathbf{r}) \psi_\downarrow(\mathbf{r}) \rangle, \quad (\text{D1})$$

where $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ are the annihilation operators for electrons at site \mathbf{r} . After Fourier transformation to momentum space with annihilation operators $c_{\mathbf{k}\sigma}$, this equation can be written as

$$\bar{\Delta} = \frac{U_{\text{ph}}}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle = -\frac{U_{\text{ph}}}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_M^{12}(\mathbf{k}, \tau = 0^+), \quad (\text{D2})$$

where N is the number of lattice sites and \hat{G}_M^{12} is the off-diagonal component of the averaged Green's function. Performing the temporal Fourier transformation of the Green's function and making use of the explicit form of \hat{G}_M , Eq. (B1), together with the result $\chi_n = 0$, Eq. (D2) can be written as

$$\bar{\Delta} = U_{\text{ph}} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_m} \frac{Z_m \Delta_m}{Z_m^2 (\omega_m^2 + \Delta_m^2) + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}. \quad (\text{D3})$$

Let us note that the momentum summation in Eq. (D3) can be replaced by energy integration, which in turn can be performed explicitly. Imposing furthermore the frequency cutoff Ω , this leads to the result

$$\bar{\Delta} = \lambda \pi T \sum_{\omega_m = -\Omega}^{\Omega} \frac{\Delta_m}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta_m^2}}, \quad (\text{D4})$$

where $\lambda = N_0 U_{\text{ph}}$ is a dimensionless coupling constant. Note that the wave-function renormalization Z_m drops out from the right-hand side. If in Eq. (D4) we make use of the frequency dependence of the gap function of a Dynes superconductor, valid for both signs of ω_n ,

$$\Delta_m = \frac{|\omega_m|}{|\omega_m| + \Gamma} \bar{\Delta},$$

we finally end up with the self-consistent Eq. (10) from the main text. It is worth pointing out that Eq. (10) from the main text does not contain the pair-conserving scattering rate Γ_s , and this is consistent with the Anderson theorem.

In Fig. 5 we show the temperature dependence of the ideal gaps $\bar{\Delta}(T)$ of Dynes superconductors for various pair-breaking parameters Γ , which are seen to be essentially BCS-like for all admissible values of Γ .

APPENDIX E: EFFECT OF FINITE EXTERNAL MAGNETIC FIELD

External magnetic field interacts with electrons via two different mechanisms: via the Zeeman coupling and by minimal coupling between the electron's momentum and the vector potential, which for brevity will be called orbital coupling. In order to compare the relative importance of the Zeeman and orbital couplings, we will estimate the critical fields, i.e., those fields which lead to a complete destruction of superconductivity, for both mechanisms taken separately. Let us start by considering the orbital coupling. In a dirty type-II superconductor such as MoC, the upper critical field H_{c2} can be estimated as $\mu_0 H_{c2} \sim \Phi_0 / (\xi_0 \ell)$, where Φ_0 is the flux quantum, $\xi_0 \sim \hbar v_F / \Delta$ is the coherence length, and ℓ is the mean free path. On the other hand, due to the Zeeman coupling, the

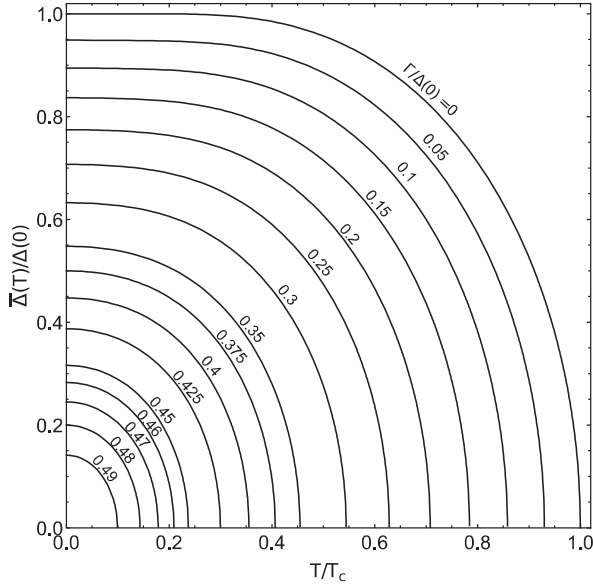


FIG. 5. Numerically determined ideal gaps $\bar{\Delta}(T)$ of Dynes superconductors for various pair-breaking parameters Γ for fixed $\lambda \ll 1$ and Ω . The gaps are measured in units of $\Delta(0)$, which is the gap of the clean system at $T = 0$. Temperature is displayed in units of T_c , which is the critical temperature of the clean system.

Cooper pairing will be destroyed by the Pauli depairing field H_P , which can be estimated as $\mu_0 H_P \sim \Delta/\mu_B$, where μ_B is the Bohr magneton [23]. Comparing the two estimates we find $H_P/H_{c2} \sim k_F \ell$, which shows that in materials which are close to the metal-insulator transition, the Zeeman and orbital couplings are of the same order of magnitude. This suggests that the suppression of $\bar{\Delta}$ with magnetic field in such samples should be described qualitatively correctly by keeping only the Zeeman coupling, of course only at sufficiently large Γ , where the transition is continuous. This approximation has been used in the main text in Figs. 3 and 4.

However, since the Zeeman and orbital couplings are of comparable magnitude, it is legitimate to ask whether it is sufficient to keep only the Zeeman coupling in calculating the effect of the magnetic field on the density of states $N_b(\omega)$. To answer this question, let us remember that, in a wide field range, type-II superconductors exhibit the vortex state. If the density of states is to be measured sufficiently far away from the vortex cores, as is assumed in this work, then the orbital effect of the magnetic field can be taken into account by the Doppler shift, which is proportional to the local momentum of the supercurrent flow \mathbf{q} in the point where the density of states is being measured [24]. This changes the bare electron Green's function in the presence of magnetic field to

$$\hat{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega_n) = (i\omega_n - b - \delta_{\mathbf{k}})\tau_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3,$$

where b is the Zeeman energy and $\delta_{\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{q}$ is the Doppler shift. Note that both pair-breaking fields b and $\delta_{\mathbf{k}}$ enter the Green's function in the same way, the only difference being that $\delta_{\mathbf{k}}$ depends on the direction of \mathbf{k} , while b is direction independent.

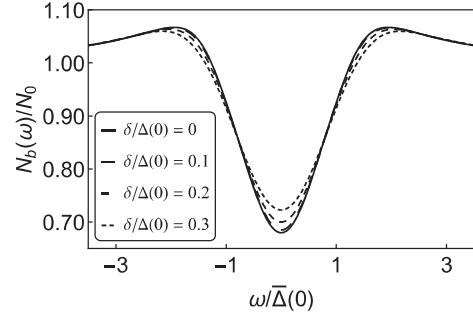


FIG. 6. Density of states $N_b(\omega)$ of a Dynes superconductor with $\Gamma/\Delta(0) = 0.38$ and Zeeman coupling $b/\Delta(0) = 0.16$, when the gap is reduced to $\bar{\Delta}_b(0)/\Delta(0) = 0.46$ (see Fig. 4 of the main text). Note that the effect of the orbital coupling δ is very mild up to large values $\delta \sim 2b$. Moreover, the peak-to-peak distance of $N_b(\omega)$ exhibits further increase due to orbital effects.

In the presence of the Doppler shift, the density of states of a 3D superconductor changes to

$$N_b(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{\pm} \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta N(\omega \pm b - v_F q \cos \theta), \quad (\text{E1})$$

which shows that the Doppler shift and the Zeeman coupling modify the density of states in a similar fashion.

Finally, we need to fix the magnitude of $\delta = v_F q$. Obviously, δ is position dependent, but it is easy to see that on the boundaries of the flux-lattice cells, δ has to vanish by symmetry. This means that the results presented in Fig. 4 of the main text are directly applicable at such boundaries [25]. Moreover, Fig. 6 shows that the orbital effects on $N_b(\omega)$ are small with respect to the effect of the Zeeman coupling up to large values of δ , which shows that keeping only the Zeeman coupling in estimating $N_b(\omega)$ should be a good approximation in a quite broad range of positions away from the vortex centers.

APPENDIX F: REMARKS ON THE EXPERIMENT OF SZABÓ *et al.*

The differential tunneling conductance at a finite voltage V between a featureless normal metal and a superconductor with density of states $N(\omega)$ is at finite temperatures given by

$$G(V) \propto \int d\omega N(\omega + eV) \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right), \quad (\text{F1})$$

where $f(\omega)$ is the Fermi-Dirac distribution. Note that in the zero-temperature limit $-\partial f/\partial \omega$ reduces to a delta-function and $G(V)$ becomes directly proportional to $N(eV)$. The fits shown in Fig. 1 of the main text were done making use of Eq. (F1) with $f(\omega)$ taken at the finite experimental temperature, and the density of states $N(\omega)$ was described by the Dynes formula. Fitting parameters $\bar{\Delta}$ and Γ which have been used in those fits are shown in Table I.

Note that with decreasing film thickness d , the pair-breaking parameter Γ increases (the slight nonmonotonicity of the $\Gamma(d)$ dependence will be discussed later), while the ideal superconducting gap $\bar{\Delta}$ decreases. Let us first discuss the

TABLE I. Fitting parameters $\bar{\Delta}$ and Γ which have been used in Fig. 1 of the main text for films with varying thickness d .

$d(\text{nm})$	3	5	10	30
$\bar{\Delta}(\text{meV})$	0.19	0.63	1.12	1.22
$\Gamma(\text{meV})$	0.16	0.21	0.1	10^{-3}

d dependence of Γ . If our interpretation of the Dynes formula in terms of the Lorentzian distribution of pair-breaking fields is applicable to the data of Szabó *et al.* [4], then the width of the distribution $P_m(V)$ has to increase with decreasing d . This will obviously happen if the effective concentration of the pair breakers grows with decreasing d . One possible scenario of how this could happen is to assume that the pair breakers are located in the vicinity of the interface between the film and the substrate.

Next we discuss the thickness dependence of $\bar{\Delta}$. Since Γ in the thickest sample is negligible and since $T \ll \bar{\Delta}$, we will assume that the $T = 0$ gap of a system without pair breakers, $\Delta(0)$, is equal to the value of $\bar{\Delta}$ for $d = 30$ nm, in other words $\Delta(0) = 1.22$ meV. Switching on a finite pair-breaking Γ should lead then to a decrease of $\bar{\Delta}(0)$ described by $\bar{\Delta}(0) = \sqrt{\Delta(0)[\Delta(0) - 2\Gamma]}$, see main text. This prediction is shown in Fig. 7, together with the experimental data taken from Table I. Here we have assumed that the $T = 0$ values $\bar{\Delta}(0)$ can be approximated by the measured values of $\bar{\Delta}$. This should be a good approximation, except perhaps for the thinnest sample, whose T_c is roughly only two times larger than the experimental temperature.

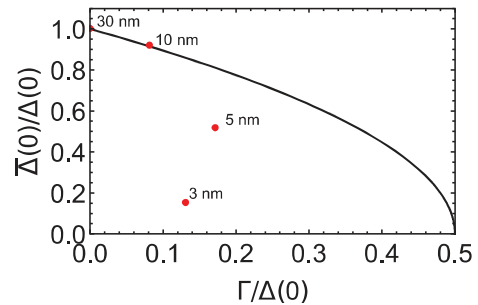


FIG. 7. Theoretical prediction for the evolution of the ideal superconducting gap $\bar{\Delta}(0)$ with the pair-breaking parameter Γ of a Dynes superconductor. Experimental data are shown as red dots.

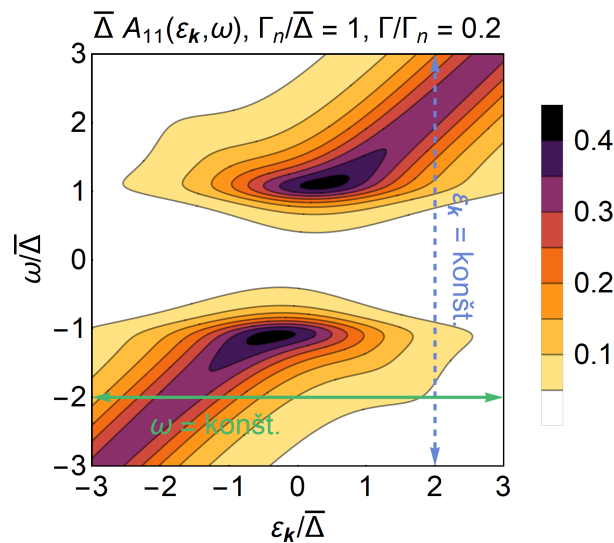
Figure 7 shows that the initial decrease of $\bar{\Delta}(0)$ with increasing Γ is captured well by our theory. However, the agreement between theory and experiment breaks down for the two thinnest films. This signals that different physical phenomena, not included in our theory, start to play role in such very thin films. We have learned recently that there are indications that in those films, which are close to the Ioffe-Regel limit, the normal-state density of states might exhibit the Altshuler-Aronov singularity [26]. If this were true, then the normal-state conductance $G_N(V)$ would not be constant and, in the most naive approach, different $G(V)/G_N(V)$ curves would have to be fitted by the Dynes formula. It is plausible that also the nonmonotonic behavior of $\Gamma(d)$ might be caused by the same physics.

-
- [1] Ø. Fischer *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 353 (2007).
[2] G. C. Ménard *et al.*, *Nat. Phys.* **11**, 1013 (2015).
[3] V. F. Gantmakher and V. T. Dolgoplov, *Phys. Usp.* **53**, 1 (2010).
[4] P. Szabó, T. Samuely, V. Hašková, J. Kačmarčík, M. Žemlička, M. Grajcar, J. G. Rodrigo, and P. Samuely, *Phys. Rev. B* **93**, 014505 (2016).
[5] C. Wang *et al.*, *Nat. Commun.* **5**, 5836 (2014).
[6] R. C. Dynes, V. Narayanamurti, and J. P. Garno, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 1509 (1978); in Eq. (1) the square root has to be taken so that its imaginary part is positive.
[7] A. E. White, R. C. Dynes, and J. P. Garno, *Phys. Rev. B* **33**, 3549(R) (1986).
[8] D. Sherman *et al.*, *Nat. Phys.* **11**, 188 (2015).
[9] J. P. Pekola, V. F. Maisi, S. Kafanov, N. Chekurov, A. Kemppinen, Y. A. Pashkin, O.-P. Saira, M. Möttönen, and J. S. Tsai, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 026803 (2010).
[10] A. A. Mikhailovsky *et al.*, *Solid State Commun.* **80**, 511 (1991).
[11] A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, *Sov. Phys. JETP* **12**, 1243 (1961).
[12] M. V. Feigel'man and M. A. Skvortsov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 147002 (2012).
[13] H. Shiba, *Prog. Theor. Phys.* **40**, 435 (1968).
[14] F. M. Marchetti and B. D. Simons, *J. Phys. A* **35**, 4201 (2002).
[15] Ya. V. Fominov and M. A. Skvortsov, *Phys. Rev. B* **93**, 144511 (2016).
[16] P. Soven, *Phys. Rev.* **156**, 809 (1967).
[17] B. Velický, S. Kirkpatrick, and H. Ehrenreich, *Phys. Rev.* **175**, 747 (1968).
[18] A. Weinkauff and J. Zittartz, *J. Low Temp. Phys.* **18**, 229 (1975).
[19] T. Bzdušek and R. Hlubina, *Philos. Mag.* **95**, 609 (2015).
[20] P. J. Lloyd, *J. Phys. C* **2**, 1717 (1969).
[21] L. Zhu, P. J. Hirschfeld, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **70**, 214503 (2004).
[22] P. Szabó *et al.* (unpublished).
[23] A. M. Clogston, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 266 (1962).
[24] E. Schachinger and J. P. Carbotte, *Phys. Rev. B* **62**, 592 (2000).
[25] Note that positions with $\delta = 0$ have to exist also for random distribution of flux lines.
[26] M. Grajcar (private communication).

Spektrálne vlastnosti Dynesových supravodičov

V poradí druhom článku [H2] sa venujeme experimentálnej predpovedi spektrálnych vlastností pre Dynesov supravodič. Článok je motivovaný nedávno publikovanou prácou [10], ktorá sa taktiež snaží prostredníctvom Eliašbergovho formalizmu fenomenologicky zakomponovať rozptyly pre dva typy nečistôt. V článku ukazujeme, že hoci spomínaná teória obsahuje aj zaujímavé vlastnosti (hustota stavov výjde taktiež vo forme Dynesovej formuly), je vnútorne nekonzistentná, nakoľko vo všeobecnom prípade porušuje jedno zo sumačných pravidiel.

Súčasťou článku [H2] je grafická analýza rezov spektrálnych funkcií pre Dynesov supravodič, uvažujúc fixované hodnoty $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Na druhej strane, v tom istom článku odvodíme aj formulu pre rezy spektrálnych funkcií všeobecného Eliašbergovho supravodiča v prípade fixovanej veličiny ω . Je preto prirodzené pozrieť sa na to, ako vyzerá elektrónová spektrálna funkcia v priestore $(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega)$ a vytvoriť si tak predstavu o vplyve nečistôt na ich tvar v smere jednotlivých rezov. Na obr. 8 preto prezentujeme elektrónovú spektrálnu funkciu v jazyku spomínaných premenných.

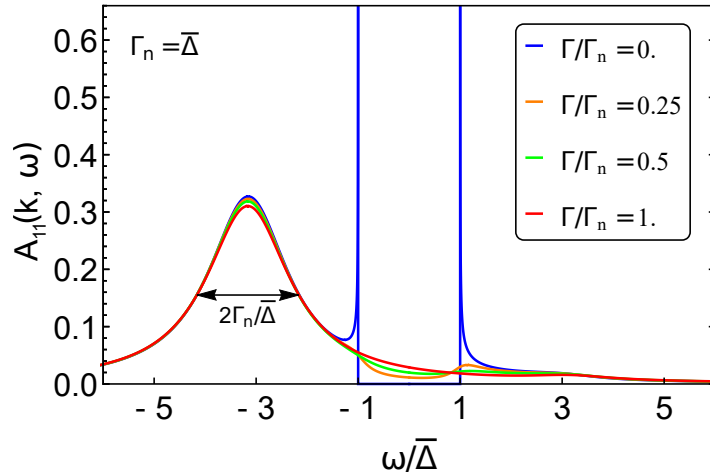


Obr. 8: Elektrónová spektrálna funkcia pre Dynesov supravodič s oboma typmi rozptylových procesov. Zreteľne vidíme rozmazanie delta funkčných oblastí v porovnaní s prípadom čistého BCS supravodiča.

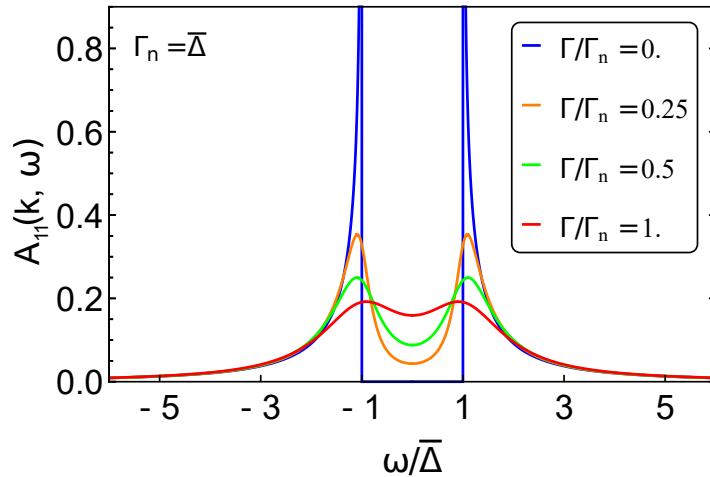
Upozorníme, že všeobecnú teóriu, ktorá čitateľa prevedie od definície Greenovej funkcie, cez jej spektrálnu reprezentáciu až samotným sumačným pravidlám uvádzame v dodatku C. Keďže však v tomto prípade náročnosť technikalít nedosahuje takú vysokú úroveň, ako výpočty v predošlej kapitole, prejdeme priamo k výsledkom pre spektrálne funkcie Dynesovho supravodiča. Ich tvar sa dá vyťažiť priamo z (17) pre Greenovu funkciu vo forme:

$$A_{11}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\hat{G}_{11}(\mathbf{k}, \omega) \right]. \quad (18)$$

Ďalej, na obr. 9 a 10 prezentujeme rezy pre elektrónové spektrálne funkcie Dynesovho supravodiča.



Obr. 9: Spektrálne funkcie $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ pre elektrón vnútri Fermiho mora v Dynesovom supravodiči s $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -3\Delta$. Hodnota celkovej rozptylovej konštanty v normálnom stave: $\Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$ je rovnaká ako na obr. 8. Krivky sa líšia hodnotou konštanty Γ zodpovedajúcej NP rozptylom, zatiaľ čo Γ_n je konšt.

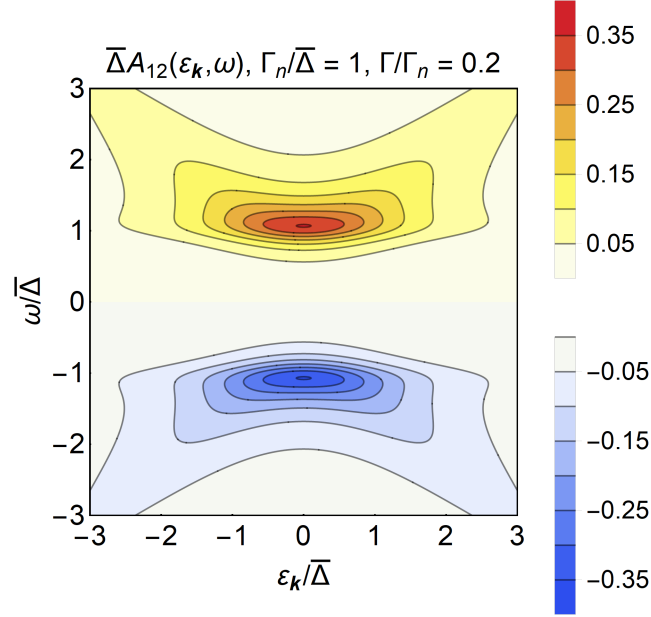


Obr. 10: Spektrálne funkcie $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ pre elektrón na Fermiho ploche v Dynesovom supravodiči s $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$. Hodnoty rozptylových konštant sú rovnaké ako na obr. 9.

Podobnú analýzu môžeme aplikovať taktiež aj pre anomálne spektrálne funkcie, definované vzťahom:

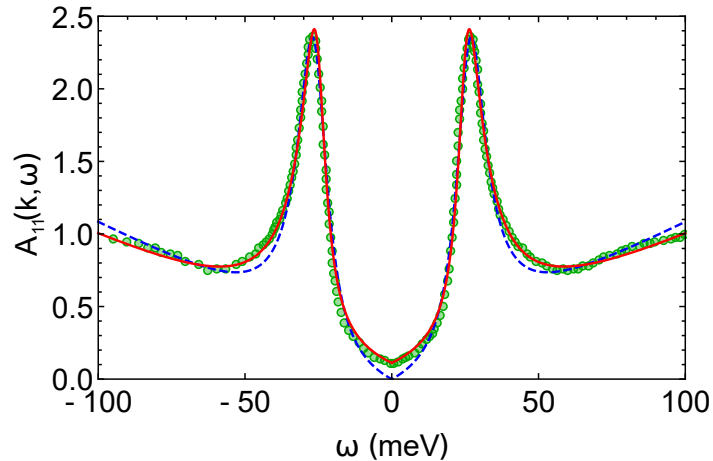
$$A_{12}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\hat{G}_{12}(\mathbf{k}, \omega) \right]. \quad (19)$$

V rámci tejto práce si však vystačíme s obr. 11, kde prezentujeme vrstevnicový plot anomálnej spektrálnej funkcie v priestore $(\omega, \varepsilon_{\mathbf{k}})$.



Obr. 11: Anomálna spektrálna funkcia pre Dynesov supravodič s oboma typmi rozptylových procesov.

V článku [H2] ďalej rozoberáme formálne vlastnosti spektrálnych funkcií pre model Dynesovho supravodiča, ako aj ich analytický tvar v prípade meniacej sa hybnosti \mathbf{k} pri fixovanej energii ω . Prezentujeme explicitný dôkaz sumačných pravidiel, ako aj dôkaz kladnej definitnosti funkcie $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$.

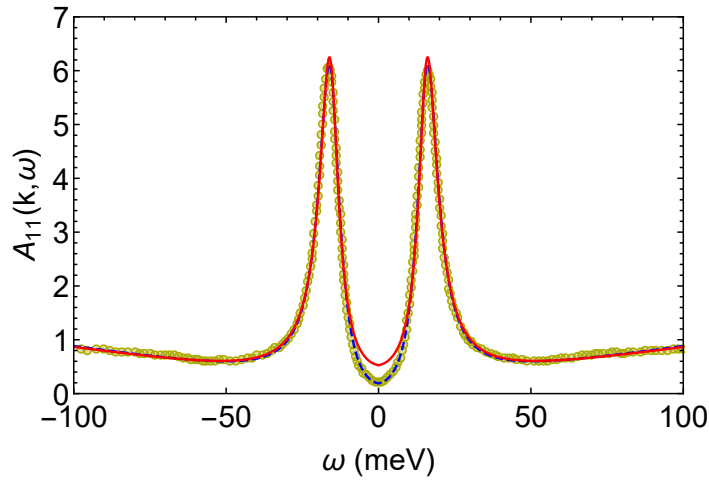


Obr. 12: Experimentálne pozorované, nízko-teplotné, symetrizované spektrálne funkcie na Fermiho ploche publikované v [10] pre optimálne dopované vzorku Bi 2212 pri uhle $\phi = 24^\circ$. V obrázku taktiež prezentujeme fity metódou najmenších štvorcov v intervale $(-100, 100)$ meV okolo Fermiho plochy s použitím spektrálnej funkcie pre Dynesov supravodič (18) (červená krivka) a s použitím teórie uvedenej v [10] (modrá krivka). Konkrétne hodnoty fitujúcich parametrov sú uvedené v článku [H2].

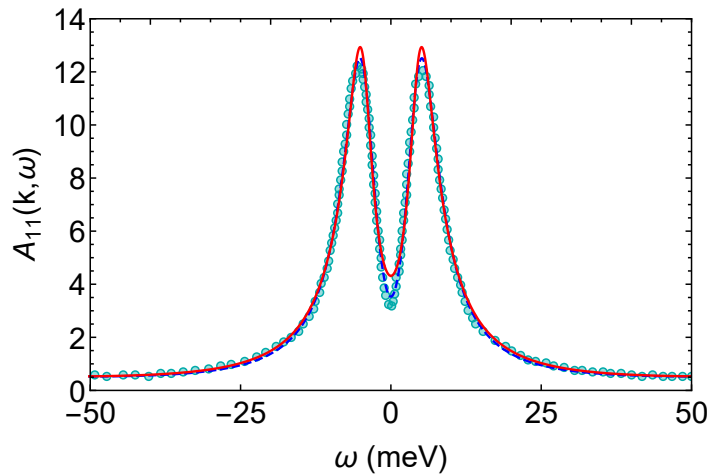
Súčasťou [H2] je taktiež porovnanie experimentálnych výsledkov pre spektrálne funkcie merané metódou ARPES [16] na kuprátoch pri nízkej teplote v tzv. nodálnej oblasti (oblasť s dobre určiteľnou hodnotou energetickej medzery). Výsledok nášho fitu prezentujeme na obr. 12, spoločne s fitom pomocou teórie použitej v [10].

Výsledok ukazuje, že pre rovnaký počet parametrov sme pre hodnotu $\phi = 24^\circ$ schopní dosiahnuť fity s minimálne rovnakou kvalitou ako autori v spomínanej publikácii.

V rámci tejto práce doplníme výsledok zobrazený na obr. 12 fitmi zobrazenými na obr. 13 a 14, v ktorých uvažujeme iné hodnoty uhla ϕ . Výsledné fity prezentujeme spoločne so zistenými hodnotami fitačných parametrov.



Obr. 13: Spektrálne funkcie na Fermiho ploche publikované v [10] pre optimálne dopovanú vzorku Bi 2212 pri uhle $\phi = 13.5^\circ$. Ostatné parametre obrázku sú totožné s obr. 12. Konkrétne hodnoty fitujúcich parametrov sú: a) pre teóriu navrhnutú v [10] (modrá krivka) ($\Delta = 16$, $\Gamma = 1$, $\Gamma_s = 7.3$, $\Lambda = 136$) meV, zatiaľ čo pre teóriu navrhnutú v [H2] (červená krivka) ($\Delta = 15$, $\Gamma = 3.2$, $\Gamma_s = 4.6$, $\Lambda = 141$) meV.



Obr. 14: Spektrálne funkcie na Fermiho ploche publikované v [10] pre optimálne dopovanú vzorku Bi 2212 pri uhle $\phi = 4.4^\circ$. Ostatné parametre obrázku sú totožné s obr. 12 a 13. Konkrétne hodnoty fitujúcich parametrov sú: a) pre teóriu navrhnutú v [10] (modrá krivka) ($\Delta = 4.9$, $\Gamma = 1.3$, $\Gamma_s = 5.6$, $\Lambda = 200$) meV, zatiaľ čo pre teóriu navrhnutú v [H2] (červená krivka) ($\Delta = 4.4$, $\Gamma = 2.2$, $\Gamma_s = 4$, $\Lambda = 210$) meV.

Ako môžeme vidieť na obr. 13 alebo/a obr. 14, pre menšie hodnoty uhla ϕ je kvalitatívna zhoda fitu, pre spektrálnu funkciu vo forme Dynesovho supravodiča stále prítomná, avšak v porovnaní s teóriou uvažovanou autormi článku [10] sa javí byť horšia.

Na druhej strane treba vziať do úvahy jej vnútornú konzistenciu, spoločne s faktom, že v pôvodnom balení nie je teória Dynesových supravodičov odvodená pre prípad HTC supravodičov. Tento fakt môže mať za následok, že niektoré detaily jej unikajú, zatiaľ čo "podstatu veci" popisuje správne.

Na záver sa podme pozrieť na analytické vlastnosti spektrálnych funkcií v limitných prípadoch. Ukazuje sa, že analýzou vzťahov uvedených v [H2] sa dajú nahliadnúť jednoduché, ale pritom celkom zaujímavé vlastnosti spektrálnych funkcií Dynesovho supravodiča v prípade vypnutých NP resp. ZP rozptylových procesov. I keď sa samozrejme jedná viac menej o akademickú úlohu vyšetrovania limitných prípadov, vďaka pomerne elegantnej štruktúre výsledných vzťahov sme sa rozhodli tieto prípady zahrnúť do hlavného textu práce.

V prípade, keď uvažujeme rezy spektrálnych funkcií pre $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \text{konšt.}$ s absentujúcimi ZP rozptylovými procesmi ($\Gamma_s = 0$), výjde spektrálna funkcia v tvare:

$$A_{11}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \delta_{\Gamma}(\omega - E_{\mathbf{k}}) + \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \delta_{\Gamma}(\omega + E_{\mathbf{k}}) \right], \quad (20)$$

kde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \bar{\Delta}^2}$. Vidíme, že v tejto forme má spektrálna funkcia rovnaké koherenčné faktory ako v prípade čistého BCS supravodiča. Tieto koherenčné faktory však nie sú násobené delta funkciami (akoby tomu bolo v BCS prípade), ale lorentziánmi $\delta_{\Gamma}(\omega \pm E_{\mathbf{k}})$ so šírkou Γ a so stredom v $\omega = \pm E_{\mathbf{k}}$.

Čitateľa zrejme neprekvapí, že rovnakú vlastnosť môžeme zbadáť aj v energetickom rozdelení anomálnej spektrálnej funkcie $A_{12}(\mathbf{k}, \omega)$, ktorá pre uvažovaný prípad ($\Gamma_s = 0$) nadobúda tvar:

$$A_{12}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\bar{\Delta}}{2E_{\mathbf{k}}} \left[\delta_{\Gamma}(\omega - E_{\mathbf{k}}) - \delta_{\Gamma}(\omega + E_{\mathbf{k}}) \right]. \quad (21)$$

Ak sa pre zmenu sústredíme na prípad vypnutých NP rozptylov pri vyšetrovaní rezov s fixovanou hodnotou ω , narazíme v prípade elektrónovej spektrálnej funkcie na štruktúru:

$$A_{11}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} \text{pre } |\omega| < \bar{\Delta} : & 0, \\ \text{pre } |\omega| > \bar{\Delta} : & \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\omega}{\tilde{\Omega}}\right) \delta_{\Gamma_s}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\Omega}) - \left(1 - \frac{\omega}{\tilde{\Omega}}\right) \delta_{\Gamma_s}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \tilde{\Omega}) \right], \end{cases} \quad (22)$$

kde $\tilde{\Omega} = \sqrt{\omega^2 - \bar{\Delta}^2}$. Ako vidíme, vnútri energetickej medzery je spektrálna funkcia bez prítomnosti NP rozptylových nečistôt nulová, zatiaľ čo mimo nej má spektrálna funkcia znova podobnú štruktúru ako v BCS teorii. Namiesto delta funkcií v nej však vystupujú lorentziány, tentokrát so šírkou Γ_s .

V článku [H2] sa samozrejme venujeme všeobecnejšiemu prípadu uvažujúc oba druhy rozptylových procesov a formula (C2) predstavuje všeobecný tvar elektrónovej spektrálnej funkcie $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ v smere hybnostného rozdelenia (uvažujúc $\omega = \text{konšt.}$).

Pre úplnosť má zmysel sa pozrieť taktiež na anomálnu spektrálnu funkciu, teda $A_{12}(\mathbf{k}, \omega)$. V analógii so vzťahom (C2) z článku [H2] sa táto funkcia dá vyjadriť v tvare:

$$A_{12}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Phi''}{2\tilde{\Gamma}} \left[\delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\Omega}) + \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \tilde{\Omega}) \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\Phi'}{\tilde{\Omega}} - \frac{\Phi''}{\tilde{\Gamma}} \right] \frac{4\pi\tilde{\Omega}^2}{\tilde{\Gamma}} \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\Omega}) \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \tilde{\Omega}), \quad (23)$$

kde $\Phi = \Phi' + i\Phi''$. Sústreďme sa teraz opäť na špeciálny prípad, kedy budeme uvažovať vypnuté NP rozptylové procesy, teda $\Gamma = 0$. V takom prípade:

$$A_{12}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} \text{pre } |\omega| < \bar{\Delta} : & 0, \\ \text{pre } |\omega| > \bar{\Delta} : & \frac{\bar{\Delta}}{2\tilde{\Omega}} \left[\delta_{\Gamma_s}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\Omega}) + \delta_{\Gamma_s}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \tilde{\Omega}) \right], \end{cases} \quad (24)$$

kde máme opäť možnosť nahliadnúť rovnakú vlastnosť ako v prípade vzťahu 22.

Consistent two-lifetime model for spectral functions of superconductors

František Herman and Richard Hlubina

Department of Experimental Physics, Comenius University, Mlynská Dolina F2, 842 48 Bratislava, Slovakia

(Received 16 January 2017; published 21 March 2017)

Recently it has been found that models with at least two lifetimes have to be considered when analyzing the angle-resolved photoemission data in the nodal region of the cuprates [Kondo *et al.*, *Nat. Commun.* **6**, 7699 (2015)]. In this paper we compare two such models. First we show that the phenomenological model used by Kondo *et al.* violates the sum rule for the occupation number. Next we consider the recently proposed model of the so-called Dynes superconductors, wherein the two lifetimes measure the strengths of pair-conserving and pair-breaking processes. We demonstrate that the model of the Dynes superconductors is fully consistent with known exact results, and we study in detail the resulting spectral functions. Finally, we show that the spectral functions in the nodal region of the cuprates can be fitted well by the model of the Dynes superconductors.

DOI: [10.1103/PhysRevB.95.094514](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.094514)

I. INTRODUCTION

Recent experimental progress in angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) [1] enables not only to determine the position of features in the electron spectral function, but also to study more subtle issues, such as the spectral line shapes. At least for the conventional low-temperature superconductors, there does exist a theoretical technique which can address such issues—namely, the Eliashberg theory [2], which allows for strong coupling between the electrons and the bosonic collective modes. However, it is not obvious whether this type of theory is applicable to the cuprates. Moreover, even conventional superconductors may possess complicated phonon spectra, and/or they can exhibit substantial elastic scattering [3], both of which complicate the Eliashberg analysis. For all these reasons, it is desirable to have a simple and generic theory which does take finite quasiparticle lifetimes in superconductors into account.

Let us start by noting that spectral functions of a BCS superconductor in the presence of elastic pair-conserving scattering can be found even in textbooks [2,4]. However, it is well known that the density of states (or the so-called tomographic density of states in the case of anisotropic superconductors [5]) implied by such spectral functions exhibits a full spectral gap consistent with the Anderson theorem. On the other hand, experimentally, the gap is quite often only partial [3,5], and the tunneling density of states is better described by the phenomenological Dynes formula [6,7]. This means then that, in order to take the nontrivial density of states into account, also a second type of scattering process—which is not subject to the Anderson theorem—has to be considered. Two-lifetime phenomenology of precisely this type has in fact been applied quite recently [8] with the aim to parametrize the high-resolution ARPES data in the nodal region of the cuprates.

The goals of this paper are twofold. First, in Sec. II we demonstrate that the model used in Ref. [8] can be cast into a form consistent with the generalized Eliashberg theory and that it exhibits several attractive features. However, we also show that the resulting 2×2 Nambu-Gor'kov propagator violates the sum rule for the occupation number and therefore the model used in Ref. [8] should be discarded.

Our second goal is to demonstrate that, nevertheless, a fully consistent two-lifetime phenomenology for superconductors

does exist. To this end, we consider the recently proposed model of the so-called Dynes superconductors [9], wherein the two-lifetime phenomenology results as a consequence of taking into account both the pair-conserving and the pair-breaking scattering processes. In Sec. III we present detailed predictions for the spectral functions of the Dynes superconductors, and we explicitly demonstrate the applicability of this approach to the low-temperature ARPES data in the nodal region of the cuprates. Furthermore, in the appendices we show that the model of the Dynes superconductors is fully consistent with known exact results, and we present explicit formulas for the momentum distribution functions [10] within the Eliashberg theory. Finally, in Sec. IV we present our conclusions.

II. THE MODEL USED BY KONDO *ET AL.*

Following previous theoretical suggestions [11,12], the authors of Ref. [8] fit their high-resolution ARPES data in the nodal region of optimally doped and overdoped Bi2212 samples to spectral functions derived from the phenomenological self-energy,

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = -i\Gamma_1 + \frac{-\Delta^2}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_0}, \quad (1)$$

and they interpret the scattering rates Γ_1 and Γ_0 as the single-particle and pair scattering rates, respectively. We will comment on these identifications later.

In order to demonstrate the physical meaning of the phenomenological self-energy Eq. (1), let us first note that it implies that the electron Green's function in the superconducting state can be written in the form

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{(\omega + i\gamma) + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\gamma')}{(\omega + i\gamma)^2 - (\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\gamma')^2 - \Delta^2}, \quad (2)$$

where we have introduced $\gamma = (\Gamma_0 + \Gamma_1)/2$ and $\gamma' = (\Gamma_0 - \Gamma_1)/2$. According to Ref. [8], throughout the superconducting phase, $\gamma' < 0$. With increasing temperature, $|\gamma'|$ decreases, and it vanishes at the critical temperature.

The main observation of this section is that Eq. (2) should form the upper left component of the general 2×2 Nambu-

Gor'kov Green's function for a superconductor,

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega Z(\mathbf{k}, \omega)\tau_0 + [\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi(\mathbf{k}, \omega)]\tau_3 + \phi(\mathbf{k}, \omega)\tau_1}{[\omega Z(\mathbf{k}, \omega)]^2 - [\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi(\mathbf{k}, \omega)]^2 - \phi(\mathbf{k}, \omega)^2}, \quad (3)$$

where τ_i 's are the Pauli matrices, $Z(\mathbf{k}, \omega)$ is the wave-function renormalization, and $\phi(\mathbf{k}, \omega)$ is the anomalous self-energy. The function $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ describes the renormalization of the single-particle spectrum, and it vanishes in a particle-hole symmetric theory; that is why it usually is neglected. For the sake of completeness, let us mention that the matrix τ_2 does not enter Eq. (3) because we work in a gauge with a real order parameter.

Since in the high-frequency limit the functions χ , ϕ , and $\omega(Z - 1)$ should stay at most constant, Eq. (2) in this limit can uniquely be interpreted in terms of the general expression Eq. (3) with

$$Z(\omega) = 1 + i\gamma/\omega, \quad \chi(\omega) = i\gamma', \quad \phi(\omega) = \bar{\Delta}, \quad (4)$$

where we have chosen a real anomalous self-energy ϕ . One readily checks that Eq. (4) reproduces Eq. (2) for all frequencies. The finite value of χ is unusual but seems to be attractive since the cuprates being doped Mott insulators might be expected to break the particle-hole symmetry. Note also that all three functions Z , χ , and ϕ do not depend on \mathbf{k} , which is the standard behavior.

It is well known that the 2×2 formalism leads to a redundant description and therefore the Green's function has to satisfy additional constraints. These constraints are most clearly visible in the Matsubara formalism, therefore let us reformulate Eq. (3) on the imaginary axis, allowing explicitly only for frequency-dependent functions $Z_n = Z(i\omega_n)$, $\chi_n = \chi(i\omega_n)$, and $\phi_n = \phi(i\omega_n)$,

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{i\omega_n Z_n \tau_0 + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi_n)\tau_3 + \phi_n \tau_1}{(\omega_n Z_n)^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi_n)^2 + \phi_n^2}. \quad (5)$$

Due to the redundancy of the 2×2 formalism, singlet superconductors have to exhibit the following symmetry:

$$G_{22}(\mathbf{k}, \omega_n) = -G_{11}(\mathbf{k}, -\omega_n). \quad (6)$$

Note that the functions Eq. (4) read as $Z_n = 1 + i\gamma/|\omega_n|$, $\chi_n = i\gamma'$, and $\phi_n = \bar{\Delta}$ on the imaginary axis. It is easy to see that when these expressions are plugged into Eq. (5), the Green's function does satisfy Eq. (6).

An additional attractive feature of the phenomenology Eq. (4) is that it leads (also for finite values of γ') to the Dynes formula for the tunneling density of states,

$$N(\omega) = N_0 \text{Re} \left[\frac{\omega + i\gamma}{\sqrt{(\omega + i\gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}} \right], \quad (7)$$

in agreement with the experimental findings of Ref. [5]. The square root has to be taken so that its imaginary part is positive and we keep this convention throughout this paper. In Eq. (7) N_0 denotes the normal-state density of states. Note that, although the particle-hole symmetry is broken due to $\chi \neq 0$, $N(\omega)$ is an even function of ω .

The broken particle-hole symmetry is clearly visible already in the normal state with $\bar{\Delta} = 0$ in which case,

$$G_{11}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_1}, \quad G_{22}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_0}. \quad (8)$$

These results show that Γ_0 and Γ_1 should not be interpreted as pair and single-particle scattering rates as has been done in Ref. [8] but rather as the scattering rates for the holes and for the electrons, respectively.

Unfortunately, Eqs. (8) turn out to be mutually inconsistent but in a quite subtle way. In order to show this, let us introduce the spectral functions $A_{ii}(\mathbf{k}, \omega)$ with $i = 1, 2$, corresponding to the Green's functions $G_{ii}(\mathbf{k}, \omega)$. Applying standard procedures, the following exact sum rules can be established:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{1 + e^{-\omega/T}} A_{11}(\mathbf{k}, \omega) = \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle = 1 - n_{\mathbf{k}\uparrow},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{1 + e^{-\omega/T}} A_{22}(\mathbf{k}, \omega) = \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle = n_{-\mathbf{k}\downarrow}.$$

But in a singlet superconductor we have $n_{\mathbf{k}\uparrow} = n_{-\mathbf{k}\downarrow}$, and therefore the following exact relation should hold:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{1 + e^{-\omega/T}} [A_{11}(\mathbf{k}, \omega) + A_{22}(\mathbf{k}, \omega)] = 1. \quad (9)$$

Making use of Eqs. (8) at $T = 0$, the integrals on the left-hand side can be taken easily, and the results are

$$\int_0^{\infty} d\omega A_{11}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\Gamma_1} \right),$$

$$\int_0^{\infty} d\omega A_{22}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\Gamma_0} \right).$$

It can readily be seen that, if $\Gamma_0 \neq \Gamma_1$, the sum rule (9) is violated by these results.

One might have the impression that the particle-hole asymmetry which causes the sum rule violation is an artifact of our generalization of the Green's function (2) to the matrix form (3). That this is not the case can be seen by plotting the spectral function directly for Eq. (2), see Fig. 1, which clearly shows that the electronlike and holelike branches exhibit different scattering rates.

We conclude that the phenomenology (4) is internally consistent only if $\Gamma_0 = \Gamma_1 = \gamma$ in which case $\gamma' = 0$. But then the Green's function (3) has a simple two-pole structure

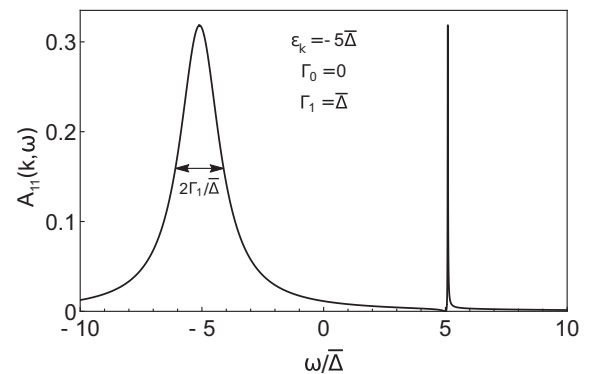


FIG. 1. Spectral function $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ of an electron inside the Fermi sea according to the model (2). The widths of the electronlike branch at $\omega \approx -E_{\mathbf{k}}$ and of the holelike branch at $\omega \approx E_{\mathbf{k}}$, where $E_{\mathbf{k}}$ is the quasiparticle energy Eq. (10), essentially are determined by Γ_1 and Γ_0 , respectively.

with poles at $\omega = \pm E_{\mathbf{k}} - i\gamma$ where

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \bar{\Delta}^2}, \quad (10)$$

implying that the spectral function is a sum of two Lorentzians. However, the authors of Ref. [8] stress that the experimentally observed line shapes are asymmetric. This means then that the phenomenology (4) is not applicable to the nodal spectral functions of the cuprates.

III. DYNES SUPERCONDUCTORS

Very recently, a consistent two-lifetime phenomenology for superconductors has been derived within the coherent potential approximation assuming a Lorentzian distribution of pair-breaking fields and an arbitrary distribution of pair-conserving disorder [9]. If we denote the pair-breaking and pair-conserving scattering rates as Γ and Γ_s , respectively, then the result of Ref. [9] for the Nambu-Gor'kov Green's function of the disordered superconductor can be written as

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{(1 + i\Gamma_s/\Omega)[(\omega + i\Gamma)\tau_0 + \bar{\Delta}\tau_1] + \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3}{(\Omega + i\Gamma_s)^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}, \quad (11)$$

where

$$\Omega(\omega) = \sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}. \quad (12)$$

Some useful properties of the function $\Omega(\omega)$ are described in Appendix A. The tunneling density of states implied by the Green's function Eq. (11) is described by the Dynes formula Eq. (7) with $\gamma = \Gamma$, and that is why superconductors described by Eq. (11) have been called Dynes superconductors in Ref. [9]. In this paper we will keep this term.

It is worth pointing out that, in the absence of pair-breaking processes, Eq. (11) reproduces the textbook results for pair-conserving scattering, see, e.g., Refs. [2,4]. On the other hand, in the opposite limit $\Gamma_s = 0$ when only pair-breaking processes are present, Eq. (11) coincides with the phenomenology (4) in the physically consistent case with $\Gamma_0 = \Gamma_1 = \Gamma$. Moreover, in the normal state with $\bar{\Delta} = 0$ the Green's function Eq. (11) becomes diagonal, and its matrix elements are

$$G_{11}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n}, \quad G_{22}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n}, \quad (13)$$

where $\Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$ is the total scattering rate, which involves both pair-breaking as well as pair-conserving scattering processes. Note that Eq. (13) does not exhibit the pathologies implied by Eq. (8).

One checks readily that the Green's function Eq. (11) is analytic in the upper half-plane of complex frequencies as required by causality and that $\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) \propto \tau_0/\omega$ for $|\omega| \rightarrow \infty$. In Appendix B, we present an explicit proof that Eq. (11) satisfies the well-known sum rules for the zero-order moments of the electron spectral function, in particular, also the sum rule Eq. (9). Moreover, in Appendix D, we prove that the electron and hole spectral functions are positive definite as required by general considerations.

In view of these observations, we believe that Eq. (11) represents the simplest internally consistent Green's function for a superconductor with simultaneously present pair-breaking and pair-conserving scattering processes. This generic BCS-like Green's function is parametrized by three energy scales: scattering rates Γ and Γ_s as well as by the gap parameter $\bar{\Delta}$. In what follows we present a detailed analysis of its spectral properties.

Spectral functions of the Dynes superconductor for an electron with momentum \mathbf{k} fixed to lie inside the Fermi sea are shown in Fig. 2. The BCS quasiparticle peaks at $\omega \approx \pm E_{\mathbf{k}}$ are seen to be broadened by the total scattering rate Γ_n , irrespective of the ratio between pair-breaking and pair-conserving scattering processes. The relative importance of the two types of processes becomes important only in the vicinity of the chemical potential. For $\Gamma = 0$ a full spectral gap appears for $|\omega| < \bar{\Delta}$, in agreement with the Anderson theorem, and additional peaks appear in the spectral function at $\omega = \pm\bar{\Delta}$. After switching on a finite pair-breaking rate $\Gamma \neq 0$, the spectral gap starts to fill in, and at the same time, the peaks at $\omega = \pm\bar{\Delta}$ get smeared away. Finally, when $\Gamma = \Gamma_n$ and the pair-conserving processes disappear completely, the spectral function is given by a sum of two Lorentzians centered at $\omega = \pm E_{\mathbf{k}}$.

Spectral functions for an electron directly at the Fermi surface $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$ are somewhat different, and they are shown in Fig. 3. The difference is caused by the fact that the quasiparticle energies $\pm E_{\mathbf{k}}$ in this case coincide with $\pm\bar{\Delta}$. Therefore only two peaks are present in the spectral function, in contrast to the general case with four peaks. However, the rest of the phenomenology can simply be related to the case of $\varepsilon_{\mathbf{k}} \neq 0$:

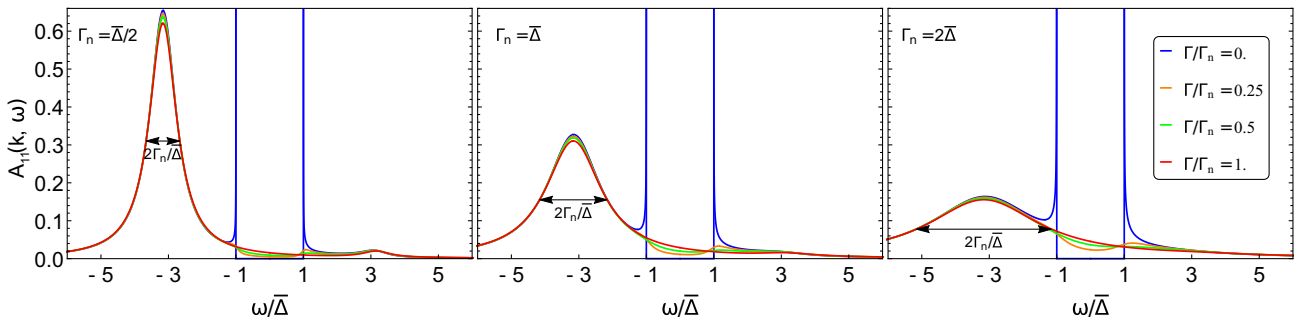


FIG. 2. Spectral functions $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ of the Dynes superconductor for an electron inside the Fermi sea with $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -3\bar{\Delta}$. The total scattering rate $\Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$ increases from the left to the right panel. The curves in each panel differ by the strength of the pair-breaking scattering rate Γ , whereas Γ_n is kept fixed. The color coding is the same in all panels.

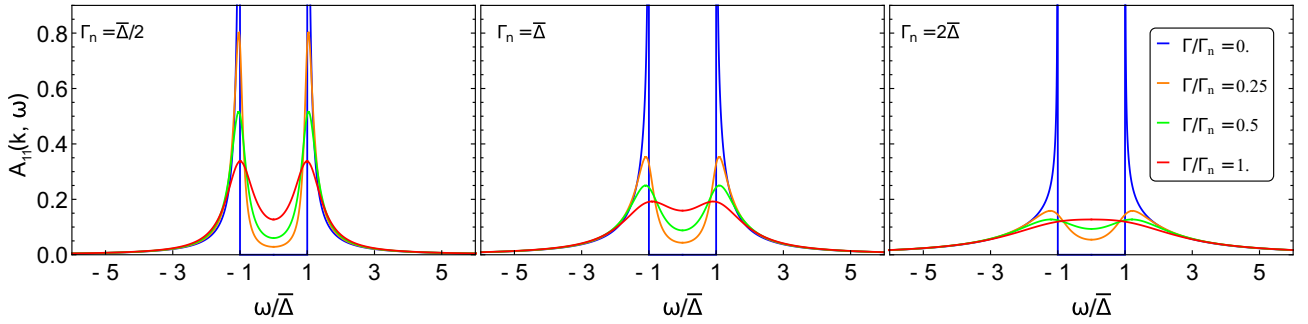


FIG. 3. Spectral functions $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ of the Dynes superconductor for an electron directly at the Fermi surface $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$. The total scattering rate $\Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$ increases from the left to the right panel. The curves in each panel differ by the strength of the pair-breaking scattering rate Γ , whereas Γ_n is kept fixed. The color coding is the same in all panels.

The high-energy form of the spectral functions is controlled exclusively by the total scattering rate Γ_n , whereas finite pair breaking fills in the spectral gap and smears the peaks at $\omega = \pm\Delta$.

In Appendix C we complement the discussion of electron spectral functions by studying the so-called momentum distribution functions [10]. In addition to presenting explicit formulas valid for any Eliashberg-type superconductor with only frequency-dependent functions $Z(\omega)$ and $\phi(\omega)$, we also show that, by making use of the momentum distribution functions, one can determine the total scattering rate Γ_n of a Dynes superconductor in an alternative way.

In Fig. 4 we demonstrate that Eq. (11) can fit the experimentally observed symmetrized spectral functions in the nodal region of the cuprates with at least comparable quality as Eq. (1). The number of fitting parameters is the same for both fits: two scattering rates, the gap $\bar{\Delta}$, and the energy scale Λ which determines the phenomenological background $|\omega|/\Lambda^2$. This type of background description has been used in all fits presented in Ref. [8]. We have determined the fitting parameters by the standard least-squares technique in the interval from -100 to 100 meV; their values are $\bar{\Delta} = 25$, $\Gamma = 3.7$, $\Gamma_s = 16$, and $\Lambda = 103$ meV for the fit using Eq. (11).

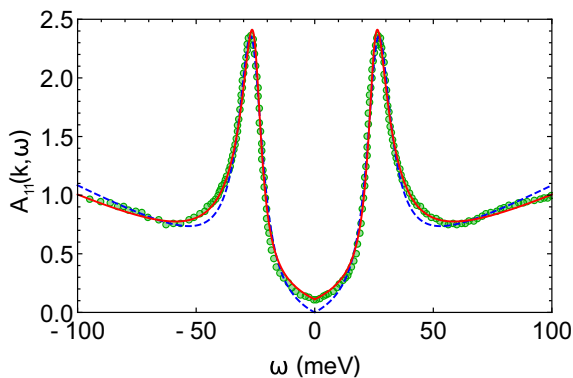


FIG. 4. Experimentally observed low-temperature symmetrized spectral functions at the Fermi level reported in Ref. [8] for optimally doped Bi2212 at angle $\phi = 24^\circ$. Also shown are least-squares fits in the region from -100 to $+100$ meV around the Fermi level which make use of Eq. (11) (red solid line) and of Eq. (1) (blue dashed line). The values of the fitting parameters are shown in the main text.

On the other hand, we have found $\bar{\Delta} = 27$, $\Gamma_0 = 0$, $\Gamma_1 = 12$, and $\Lambda = 87$ meV for the fit using Eq. (1).

Both fits find roughly the same value of the gap $\bar{\Delta}$ and of the background parameter Λ , but the scattering rates turn out to be quite different. In view of the latter observation it seems to be worthwhile to repeat the analysis of Ref. [8] but with the ansatz Eq. (11) for the electron Green's function. It remains to be seen whether this type of analysis can also be applied at temperatures above T_c and what is the resulting temperature dependence of the scattering rates Γ and Γ_s .

The small value of the pair-breaking rate Γ with respect to the large pair-conserving rate Γ_s implied by Fig. 4 is consistent with the observation that the concept of the tomographic density of states is useful in the analysis of the ARPES data [5,13]. Since in an anisotropic superconductor large-angle scattering is pair breaking, the smallness of Γ implies that the dominant scattering processes (at least in the nodal region and at low temperatures) have to be of the forward-scattering type.

The importance of forward-scattering processes in the nodal region has also been confirmed recently by an analysis of the momentum distribution curves [14]. As for the microscopic origin of the forward scattering, it has been argued that it can be caused by elastic scattering on disorder located outside the CuO_2 planes [15]. Other explanations include scattering on (quasi-) static long-range fluctuations, perhaps due to competing order, or scattering on low-energy long-wavelength emergent gauge fields [16]. These different scenarios can be distinguished by different dependences on temperature and/or Fermi-surface location, and further experimental work is needed to discriminate between them.

IV. CONCLUSIONS

To summarize, we have shown that the phenomenological self-energy Eq. (1), which has been proposed theoretically in Refs. [11,12] and applied recently in Ref. [8], is internally consistent only in the case when $\Gamma_0 = \Gamma_1$; in this case the electron spectral function in the superconducting state is a sum of two Lorentzians.

The simplest consistent genuine two-lifetime Green's function of a superconductor is given by Eq. (11). This model depends on two scattering rates: the pair-breaking scattering rate Γ and the pair-conserving scattering rate Γ_s . The Green's function Eq. (11) implies that the density of states

is described by the Dynes formula Eq. (7) with $\gamma = \Gamma$ and the electron spectral functions exhibit more structure than might be expected naively, see Figs. 2 and 3.

The Green's function Eq. (11) is analytic in the upper half-plane, it has the correct large-frequency asymptotics, its diagonal spectral functions are positive definite, and it satisfies the exact sum rules Eqs. (9) and (B3). Moreover, in the three limiting cases of $\Gamma = 0$, $\Gamma_s = 0$, or $\bar{\Delta} = 0$, it reduces to the well-known results. Therefore, although Eq. (11) has originally been derived only for a special distribution of pair-breaking fields within the coherent potential approximation, we believe that it represents a *generic* two-lifetime Green's function of a superconductor.

Our results provide a (in principle) straightforward recipe for extracting the scattering rates Γ and $\Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$ from experimental data: The pair-breaking scattering rate Γ is best determined from the tunneling (or, in anisotropic superconductors, tomographic [5]) density of states, whereas the total scattering rate Γ_n may be extracted from the widths of the quasiparticle peaks in spectral functions, see Fig. 2. Alternatively, as shown in Appendix C, the scattering rate Γ_n can be determined from the width of the momentum distribution functions, and it enters the analysis of optical conductivity [17].

Obviously, the description of superconductors making use of Eq. (11) can be quantitatively correct only at energies smaller than the typical boson energies of the studied system. At higher energies, application of a full-fledged Eliashberg-type theory [2]—but extended so as to allow for processes leading to Eq. (11) at low energies—is unavoidable. For completeness, in Appendix C we have described a procedure which, starting from the assumption of only frequency-dependent Eliashberg functions $Z(\omega)$ and $\Delta(\omega)$, allows for their complete determination from ARPES data by combining two approaches: the momentum distribution technique and the tomographic density of states.

Finally, in Fig. 4 we have demonstrated that the low-temperature ARPES data in the nodal region of the cuprates can be fitted well using Eq. (11). Our results confirm previous claims about the importance of forward-scattering processes in this region, but identification of their physical origin will require further detailed angle- and temperature-dependent studies.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contracts No. APVV-0605-14 and No. APVV-15-0496 and by the Agency VEGA under Contract No. 1/0904/15.

APPENDIX A: PROPERTIES OF THE FUNCTION $\Omega(\omega)$

Let us decompose the function $\Omega(\omega)$ defined by Eq. (12) into its real and imaginary parts $\Omega = \Omega_1 + i\Omega_2$. One finds readily that $\Omega_{1,2}$ should satisfy the relations,

$$\Omega_1\Omega_2 = \omega\Gamma, \quad \Omega_1^2 - \Omega_2^2 = v^2, \quad (\text{A1})$$

where $v^2 = \omega^2 - \bar{\Delta}^2 - \Gamma^2$. Our sign convention leads then to the following explicit expressions for $\Omega_{1,2}$:

$$\Omega_1(\omega) = \text{sgn}(\omega)\sqrt{[\sqrt{v^4 + 4\omega^2\Gamma^2} + v^2]/2},$$

$$\Omega_2(\omega) = \sqrt{[\sqrt{v^4 + 4\omega^2\Gamma^2} - v^2]/2}.$$

Note that $\Omega_1(\omega)$ is an odd function of ω , whereas $\Omega_2(\omega)$ is positive definite and even. A straightforward calculation shows that for $\omega > 0$ the following inequalities are valid:

$$\Omega_1 \leq \omega, \quad \Omega_2 \geq \Gamma. \quad (\text{A2})$$

These inequalities will be used in Appendix D.

It is worth pointing out that the function $\Omega_1(\omega)$ characterizing the Dynes superconductor is in principle directly measurable in low-temperature tunneling experiments. In fact, it is well known that in such experiments the derivative of the current-voltage characteristics dI/dV is proportional to the tunneling density of states $N(\omega)$ with $\omega = eV$. But since $N(\omega) \propto d\Omega_1/d\omega$, the function $\Omega_1(\omega)$ is proportional to the measured function $I = I(V)$.

APPENDIX B: SUM RULES FOR THE DYNES SUPERCONDUCTORS

In this appendix we prove that Eq. (11) satisfies the sum rules for the zero-order moments of the electron spectral function. To this end, let us introduce an auxiliary complex function $F(\omega)$ of the real frequency ω ,

$$F(\omega) = \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - [\Omega(\omega) + i\Gamma_s]^2.$$

Note that the function $F(\omega)$ also depends on the momentum \mathbf{k} but for the sake of simplicity this dependence will not be displayed explicitly.

Let us furthermore define the function,

$$H(\omega) = \ln F(\omega) = \ln |F(\omega)| + i\varphi(\omega).$$

In the second equality we have represented the complex function $F(\omega) = |F(\omega)| \exp\{i\varphi(\omega)\}$ in terms of its amplitude $|F(\omega)|$ and phase $\varphi(\omega)$ constrained to the interval $(-\pi, \pi)$. A plot of the real and imaginary parts of the function $H(\omega)$ is

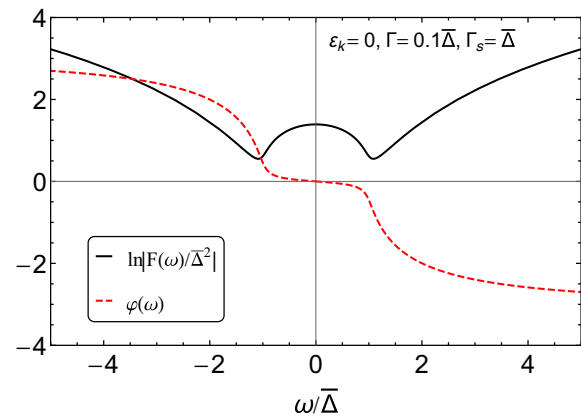


FIG. 5. Real and imaginary parts of the function $H(\omega)$.

shown in Fig. 5. Note that the phase $\varphi(\omega)$ is an odd function of frequency and its asymptotic values are $\varphi(\pm\infty) = \mp\pi$.

Making use of the function $H(\omega)$, the Nambu-Gor'kov Green's function (11) can be written in the following elegant form:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial H}{\partial \omega} \tau_0 - \frac{\partial H}{\partial \Delta} \tau_1 - \frac{\partial H}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tau_3 \right]. \quad (\text{B1})$$

From here follows the following explicit expression for the Nambu-Gor'kov spectral function, defined as usual by $\hat{A}(\mathbf{k}, \omega) = -\pi^{-1} \text{Im} \hat{G}(\mathbf{k}, \omega)$:

$$\hat{A}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \left[-\frac{\partial \varphi}{\partial \omega} \tau_0 + \frac{\partial \varphi}{\partial \Delta} \tau_1 + \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tau_3 \right]. \quad (\text{B2})$$

Equation (B2) forms the starting point of our discussion of the sum rules.

Using the oddness of the function $\varphi(\omega)$ and of its asymptotic values, one finds readily that Eq. (B2) implies the matrix equation,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{A}(\mathbf{k}, \omega) = \tau_0, \quad (\text{B3})$$

in perfect agreement with the well-known exact sum rule for the zero-order moment of the spectral function.

Next we prove that Eq. (B2) satisfies the exact sum rule Eq. (9). Since $\text{Tr} \hat{A}(\mathbf{k}, \omega) = -\pi^{-1} \partial \varphi / \partial \omega$, we have to prove that

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{1 + e^{-\omega/T}} \frac{\partial \varphi}{\partial \omega} = -\pi.$$

By calculating the integral on the left-hand side by parts, our task reduces to proving the equality,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{4T \cosh^2(\omega/2T)} \varphi(\omega) = 0.$$

But since $\varphi(\omega)$ is odd, this last equality is trivially satisfied. Thus we have proven that the Dynes superconductors satisfy Eq. (9).

For the sake of completeness, let us note that the full matrix form of the sum rule Eq. (9) reads

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{1 + e^{-\omega/T}} \hat{A}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} 1 - n_{\mathbf{k}} & b_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} & n_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (\text{B4})$$

where $n_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}\uparrow} = n_{-\mathbf{k}\downarrow}$, $b_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle$, and the thermodynamic expectation values $n_{\mathbf{k}}$ and $b_{\mathbf{k}}$ are given by

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} - \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{\omega}{2T},$$

$$b_{\mathbf{k}} = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\partial \varphi}{\partial \Delta} \tanh \frac{\omega}{2T}.$$

It should be pointed out that sum rules for higher-order moments of the spectral function which generalize Eqs. (B3) and (B4) can also be derived but their right-hand sides depend on the Hamiltonian of the problem. Such sum rules therefore do not provide useful checks of the phenomenological Green's function Eq. (11).

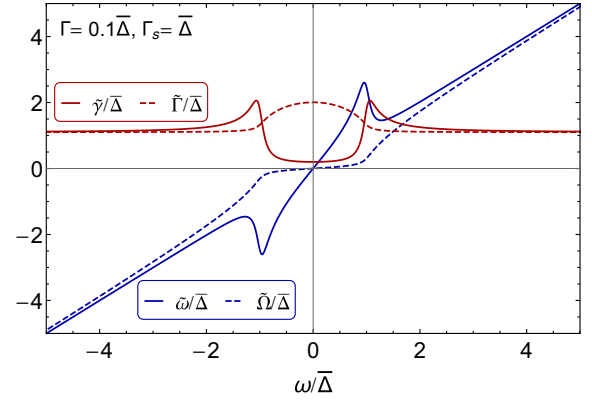


FIG. 6. Functions $\tilde{\omega}(\omega)$, $\tilde{\gamma}(\omega)$, $\tilde{\Omega}(\omega)$, and $\tilde{\Gamma}(\omega)$ for a Dynes superconductor.

APPENDIX C: MOMENTUM DISTRIBUTION FUNCTIONS IN THE ELIASHBERG THEORY

We have already noted that, within the Eliashberg theory, the functions $Z(\omega)$ and $\phi(\omega)$ usually depend only on frequency ω and are independent of the momentum \mathbf{k} . Quite some time ago, it has been pointed out that in such cases it is useful to study the spectral function $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ for fixed frequency ω as a function of the bare electron energy $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, the so-called momentum distribution function [10]. To simplify the formulas, in this appendix we will replace $A_{11}(\mathbf{k}, \omega)$ by $A(\varepsilon, \omega)$.

Instead of the two complex functions $Z(\omega)$ and $\phi(\omega)$, let us introduce the following four real functions of frequency $\tilde{\omega}(\omega)$, $\tilde{\gamma}(\omega)$, $\tilde{\Omega}(\omega)$, and $\tilde{\Gamma}(\omega)$:

$$\begin{aligned} \omega Z &= \tilde{\omega} + i\tilde{\gamma}, \\ \sqrt{(\omega Z)^2 - \phi^2} &= \tilde{\Omega} + i\tilde{\Gamma}. \end{aligned} \quad (\text{C1})$$

To illustrate their symmetries and typical form, in Fig. 6 we plot the functions $\tilde{\omega}(\omega)$, $\tilde{\gamma}(\omega)$, $\tilde{\Omega}(\omega)$, and $\tilde{\Gamma}(\omega)$ for a Dynes superconductor.

After a tedious but straightforward calculation, the spectral function of a general Eliashberg superconductor can be written as

$$\begin{aligned} A(\varepsilon, \omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\Gamma}} + 1 \right] \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon - \tilde{\Omega}) + \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\Gamma}} - 1 \right] \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon + \tilde{\Omega}) \\ &+ \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\Omega}} - \frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\Gamma}} \right] \frac{4\pi \tilde{\Omega}^2}{\tilde{\Gamma}} \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon - \tilde{\Omega}) \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon + \tilde{\Omega}), \end{aligned} \quad (\text{C2})$$

where we have introduced the notation,

$$\delta_{\tilde{\Gamma}}(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\tilde{\Gamma}}{x^2 + \tilde{\Gamma}^2}$$

for a Lorentzian with width $\tilde{\Gamma}$. According to Eq. (C2), the spectral function $A(\varepsilon, \omega)$ when viewed as a function of energy ε at fixed frequency ω consists of three terms. The first two terms are Lorentzians, whereas the third term is a product of two Lorentzians.

When the measured momentum distribution functions are fitted by Eq. (C2), $\tilde{\Omega}$ can be determined from the positions of the Lorentzians, and $\tilde{\Gamma}$ is given by their widths. Finally,

from the relative weights of the three terms in Eq. (C2), one can determine the ratios $\tilde{\gamma}/\tilde{\Gamma}$ and $\tilde{\omega}/\tilde{\Omega}$. With all four functions $\tilde{\omega}(\omega)$, $\tilde{\gamma}(\omega)$, $\tilde{\Omega}(\omega)$, and $\tilde{\Gamma}(\omega)$ known, one obtains full information about the superconducting state. This idea has been used in an impressive set of recent papers, see Ref. [18] and references therein.

One should note, however, that in order to determine all four parameters $\tilde{\omega}$, $\tilde{\gamma}$, $\tilde{\Omega}$, and $\tilde{\Gamma}$, it is necessary to resolve all three terms in Eq. (C2) together with their relative weights. But at sufficiently large frequencies, we should expect that $\tilde{\Gamma} \ll |\tilde{\Omega}|$, see Fig. 6. In this case the following approximate equality is valid:

$$\frac{4\pi\tilde{\Omega}^2}{\tilde{\Gamma}}\delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon - \tilde{\Omega})\delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon + \tilde{\Omega}) \approx \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon - \tilde{\Omega}) + \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon + \tilde{\Omega}),$$

which means that the product of two Lorentzians cannot be distinguished from their sum. Inserting this equality into Eq. (C2), one finds readily that the spectral function $A(\varepsilon, \omega)$ is given by a sum of only two Lorentzians,

$$A(\varepsilon, \omega) \approx \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\Omega}} + 1 \right] \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon - \tilde{\Omega}) + \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\Omega}} - 1 \right] \delta_{\tilde{\Gamma}}(\varepsilon + \tilde{\Omega}).$$

But if this is the case, then from fits to the momentum distribution function, one can determine only $\tilde{\Omega}$, $\tilde{\Gamma}$, and $\tilde{\omega}$ but not $\tilde{\gamma}$. In other words, we do not have access to the pairing function $\phi^2(\omega) = (\tilde{\omega} + i\tilde{\gamma})^2 - (\tilde{\Omega} + i\tilde{\Gamma})^2$ in this frequency limit.

There is yet another reason why fits to the momentum distribution function can provide reliable estimates of the Eliashberg parameters only for $|\omega| \lesssim \bar{\Delta}$: Namely, this technique requires that both ratios $\tilde{\gamma}/\tilde{\Gamma}$ and $\tilde{\omega}/\tilde{\Omega}$ are sufficiently different from 1 so that the weights of the second and third terms in Eq. (C2) can be determined precisely. But Fig. 6 clearly shows that this criterion is satisfied only for $|\omega| \lesssim \bar{\Delta}$.

Does this mean that the Eliashberg problem of finding the functions $Z(\omega)$ and $\Delta(\omega)$ cannot be solved in the frequency range of $\bar{\Delta} \lesssim |\omega|$? The answer is no: It has been pointed out recently [18,19] that, by applying the powerful inversion technique developed in Ref. [20], it is possible to extract the complex gap function $\Delta(\omega) = \phi(\omega)/Z(\omega)$ from the measured tomographic density of states. When this knowledge is combined with the momentum distribution technique—which allows for a relatively straightforward determination of $\tilde{\Omega}$ and $\tilde{\Gamma}$ in the limit $\bar{\Delta} \lesssim |\omega|$ with one Lorentzian only—making use of the expression,

$$Z(\omega) = \frac{\tilde{\Omega} + i\tilde{\Gamma}}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}}$$

one also can determine the second Eliashberg function $Z(\omega)$, thereby solving the Eliashberg problem [18].

Finally, let us note that the momentum distribution functions can also be useful in the special case of the Dynes superconductors described by Eq. (11). In fact, since in the frequency range of $\bar{\Delta} \lesssim |\omega|$ the width of the observable Lorentzian in the momentum distribution function of a Dynes superconductor is $\tilde{\Gamma} \approx \Gamma_n$, this gives us an independent procedure for measuring the total scattering rate $\Gamma_n = \Gamma + \Gamma_s$.

APPENDIX D: PROOF OF THE INEQUALITIES

$A_{ii}(\mathbf{k}, \omega) \geq 0$ FOR THE DYNES SUPERCONDUCTORS

In this appendix we will prove that the diagonal spectral functions $A_{ii}(\mathbf{k}, \omega)$ of the Dynes superconductors are positive definite as required by general considerations.

To this end, let us first note that the diagonal components of the Nambu-Gor'kov Green's function within the Eliashberg theory read as

$$G_{ii}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\tilde{\omega} + i\tilde{\gamma} \pm \varepsilon_{\mathbf{k}}}{(\tilde{\Omega} + i\tilde{\Gamma})^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}.$$

Since $A_{ii}(\mathbf{k}, \omega) = -\pi^{-1} \text{Im} G_{ii}(\mathbf{k}, \omega)$, from here it follows that the requirement $A_{ii}(\mathbf{k}, \omega) \geq 0$ is equivalent to

$$2\tilde{\Omega}\tilde{\Gamma}\tilde{\omega} - \tilde{\gamma}(\tilde{\Omega}^2 - \tilde{\Gamma}^2) \geq -\tilde{\gamma}\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 \mp 2\tilde{\Omega}\tilde{\Gamma}\varepsilon_{\mathbf{k}},$$

which has to hold for all $\varepsilon_{\mathbf{k}}$'s and ω 's. Maximizing the expression on the right-hand side with respect to $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, this requirement can be rewritten as

$$\frac{\tilde{\gamma}^2\tilde{\Gamma}^2}{\tilde{\gamma}^2 + \tilde{\Gamma}^2} + \tilde{\omega}\tilde{\Omega} \frac{2\tilde{\gamma}\tilde{\Gamma}}{\tilde{\gamma}^2 + \tilde{\Gamma}^2} \geq \tilde{\Omega}^2,$$

which has to be valid for all frequencies ω . Since the first term on the left-hand side is obviously positive, it follows that it is sufficient to show that:

$$\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\Omega}} \geq \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\Gamma}} + \frac{\tilde{\Gamma}}{\tilde{\gamma}} \right).$$

In order to prove this latter inequality, we will prove the following two simpler inequalities:

$$\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\Omega}} \geq \frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\Gamma}}, \quad \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\Omega}} \geq \frac{\tilde{\Gamma}}{\tilde{\gamma}}. \quad (\text{D1})$$

In view of the symmetries illustrated by Fig. 6, one checks easily that it is sufficient to prove that these inequalities hold for $\omega > 0$.

So far, our discussion was valid for any Eliashberg superconductor. Now we specialize for the Dynes superconductors. Making use of Eqs. (C1) and (11) one finds easily that in this case the quantities $\tilde{\omega}$, $\tilde{\Omega}$, $\tilde{\Gamma}$, and $\tilde{\gamma}$ can be written in terms of the functions Ω_1 and Ω_2 introduced in Appendix A as

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega} &= \Omega_1, \\ \tilde{\Gamma} &= \Omega_2 + \Gamma_s, \\ \tilde{\omega} &= \omega + \Gamma_s \frac{\omega\Omega_2 - \Gamma\Omega_1}{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}, \\ \tilde{\gamma} &= \Gamma + \Gamma_s \frac{\omega\Omega_1 + \Gamma\Omega_2}{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}. \end{aligned}$$

Let us note in passing that these expressions justify the results plotted in Fig. 6.

Next we plug the expressions for $\tilde{\omega}$, $\tilde{\Omega}$, $\tilde{\Gamma}$, and $\tilde{\gamma}$ into Eqs. (D1). If one makes use of the equalities Eqs. (A1) and of the inequalities Eqs. (A2), after some straightforward algebra one can check that the inequalities Eqs. (D1) are satisfied. This completes the proof that, for the Dynes superconductors, the inequalities $A_{ii}(\mathbf{k}, \omega) \geq 0$ are valid.

- [1] M. Hashimoto *et al.*, *Nat. Phys.* **10**, 483 (2014).
- [2] F. Marsiglio and J. P. Carbotte, in *Superconductivity*, edited by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Springer, Berlin, 2008), Vol. I, p. 73.
- [3] P. Szabó, T. Samuely, V. Hašková, J. Kačmarčík, M. Žemlička, M. Grajcar, J. G. Rodrigo, and P. Samuely, *Phys. Rev. B* **93**, 014505 (2016).
- [4] L. Zhu, P. J. Hirschfeld, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **70**, 214503 (2004).
- [5] T. J. Reber *et al.*, *Nat. Phys.* **8**, 606 (2012).
- [6] R. C. Dynes, V. Narayanamurti, and J. P. Garno, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 1509 (1978).
- [7] A. E. White, R. C. Dynes, and J. P. Garno, *Phys. Rev. B* **33**, 3549(R) (1986).
- [8] T. Kondo *et al.*, *Nat. Commun.* **6**, 7699 (2015).
- [9] F. Herman and R. Hlubina, *Phys. Rev. B* **94**, 144508 (2016).
- [10] J. C. Campuzano, M. R. Norman, and M. Randeria, in *The Physics of Superconductors*, edited by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Springer, New York, 2004), Vol. II, pp. 167–273.
- [11] M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding, and J. C. Campuzano, *Phys. Rev. B* **57**, R11093(R) (1998).
- [12] A. V. Chubukov, M. R. Norman, A. J. Millis, and E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **76**, 180501(R) (2007).
- [13] T. J. Reber *et al.*, [arXiv:1508.06252](https://arxiv.org/abs/1508.06252).
- [14] S. H. Hong, J. M. Bok, W. Zhang, J. He, X. J. Zhou, C. M. Varma, and H.-Y. Choi, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 057001 (2014).
- [15] E. Abrahams and C. Varma, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **97**, 5714 (2000).
- [16] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
- [17] F. Herman and R. Hlubina (unpublished).
- [18] J. M. Bok *et al.*, *Sci. Adv.* **2**, e1501329 (2016).
- [19] T. Bzdušek and R. Hlubina, *Philos. Mag.* **95**, 609 (2015).
- [20] A. A. Galkin, A. I. D'yachenko, and V. M. Svistunov, *Sov. Phys. JETP* **39**, 1115 (1974).

Elektromagnetické vlastnosti Dynesových supravodičov

Motivovaní výsledkami v prvej a druhej časti tohto dokumentu sa dostávame k jeho ďalšej kapitole, a síce k dvojčasticovým vlastnostiam Dynesových supravodičov. Vzhľadom na to, že sa jedná o technicky najzložitejšiu časť, ambíciu prezentovať technické detaily opäť presunieme do článku [H3], resp. do dodatkov k dizertačnej práci a budeme sa venovať len výsledkom.

Najdôležitejší výsledok tejto časti tvorí vzťah pre vodivosť, pri ktorom využívame formalizmus pôvodne zavedený v [18], mierne upravený využitím [19]. Pripomeňme, že spomínaný výpočet stojí na *Kubovej formule* odvodenej v rámci teórie lineárnej odozvy v dodatku B. Následne sa v rámci formalizmu Feynmanových diagramov ukáže, že pre výpočet vodivosti treba spočítať tzv. *bublinový diagram* [21]. Tomuto výpočtu je venovaný dodatok F.

Zdôraznime, že spomínaný výsledok uvedený v článku [H3] má všetky limity v súlade s očakávaniami a navyše je vyjadrený v podobe numericky riešiteľného integrálu pre akékoľvek hodnoty parametrov $\bar{\Delta}$, Γ , a Γ_s . Ukáže sa, že výsledný vzťah sa dá vyjadriť v tvare¹¹:

$$\sigma(\omega) = \pi D \delta(\omega) + \sigma_{reg}(\omega), \quad (25)$$

kde prvý člen vyjadruje singulárny príspevok kondenzátu k frekvenčne závislej vodivosti. Jeho tvar sa dá vyjadriť pomocou pomocných veličín:

$$n(\omega) = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta(\omega)^2}}, \quad p(\omega) = \frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta(\omega)^2}}, \quad \epsilon(\omega) = Z(\omega) \sqrt{\omega^2 - \Delta(\omega)^2}. \quad (26)$$

Napríklad pre podiel častíc tvoriacich supravodivý kondenzát dostávame výsledok:

$$\frac{D}{D_0} = \frac{n_s}{n} = - \int_0^\infty dx \tanh\left(\frac{x}{2T}\right) \operatorname{Re} \left[\frac{p^2(x)}{\epsilon(x)} \right], \quad (27)$$

¹¹Je nutné povedať, že v celom výpočte je zanedbaný vplyv vertexových korekcií. Toto priblíženie sa však dá zdôvodniť pomocou voľby kalibrácie a bodovým charakterom rozptylových centier.

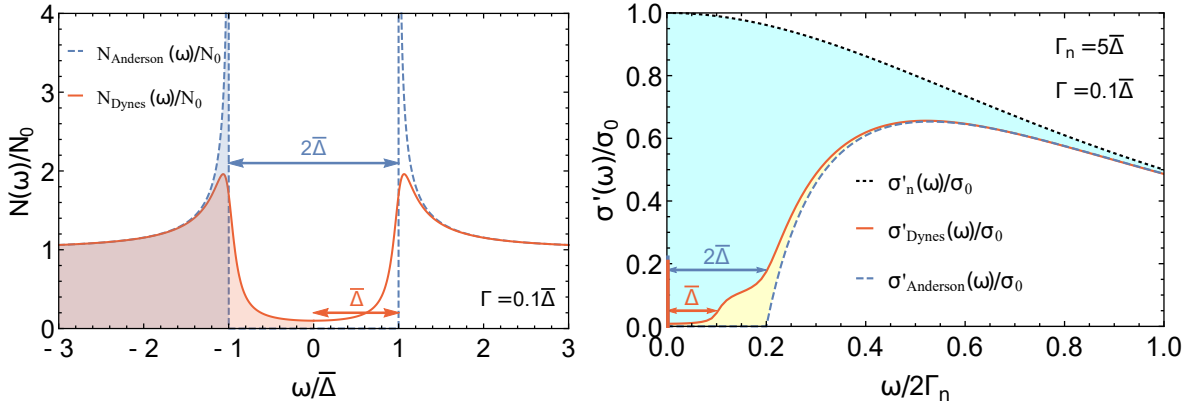
kde $D_0 = ne^2/m$ a n označuje koncentráciu elektrónov v normálnom stave. V článku [H3] ukazujeme, že v prípade $T = 0$ sa integrál v (27) dá pre Dynesov supravodič vyjadriť analyticky.

Prejdime ku krátkej analýze hlavných výsledkov druhej, regulárnej časti (28). Jej výsledný tvar zapíšeme kvôli priamočiarej interpretácii reálnej časti $\sigma'(\omega)$ len v tzv. špinavej limite (kde ak skúmame prípad $\Gamma_s \gg \omega$, platí $\epsilon(\omega) \approx i\Gamma_n$):

$$\begin{aligned}\sigma'_{reg}(\omega) &= \frac{\sigma_0}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dx [f(x) - f(x + \omega)] (n'(x)n'(x + \omega) + p'(x)p'(x + \omega)), \\ \sigma''_{reg}(\omega) &= -\frac{\sigma_0}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dx [1 - 2f(x + \omega)] (n''(x)n'(x + \omega) + p''(x)p'(x + \omega)),\end{aligned}\quad (28)$$

kde σ_0 zodpovedá vodivosti v normálnom stave. Všimnime si, že v tomto balení môže byť $\sigma'_{reg}(\omega)$ interpretovaná ako súčet príspevkov od normálnej hustoty stavov $n(x)$ a anomálnej hustoty stavov $p(x)$. Oba príspevky absorbujú elektromagnetické pole excitovaním z obsadených do neobsadených stavov, podobne ako v polovodičovom modeli.

Pre ilustráciu pripájame obr. 15, ktorý zodpovedá výpočtu vodivosti v prípade $T = 0$ a $\Gamma_n = 5\bar{\Delta}$, ktorý nezodpovedá ani čistej, ani špinavej limite. Poznamenajme, že napriek tomu, že pre samotný výpočet treba použiť všeobecné formuly uvedené v [H3], je analógia s polovodičovým modelom stále zreteľná.

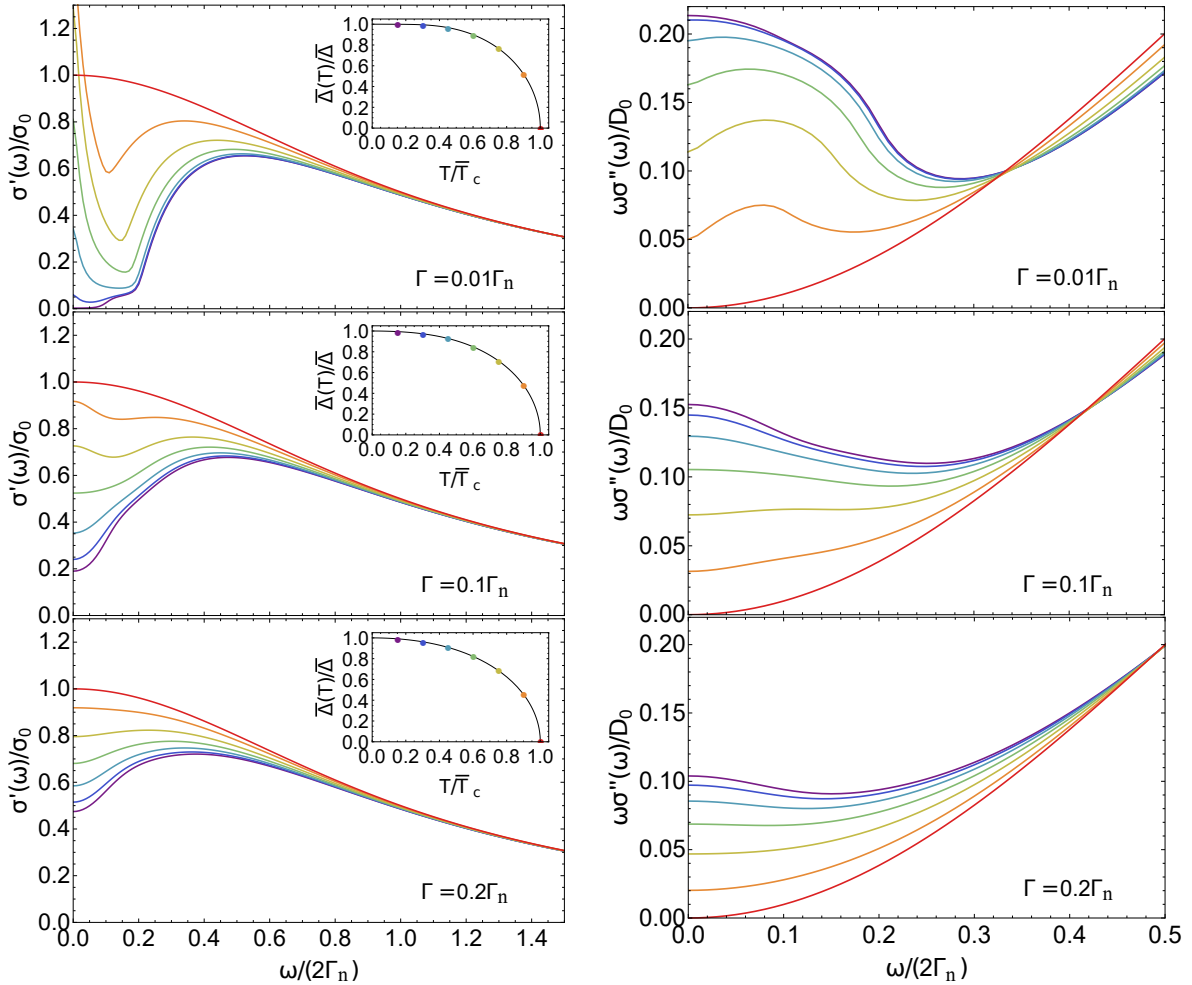


Obr. 15: Porovnanie kovového vodiča, Andersonovho ($\Gamma = 0$) a Dynesovho ($\Gamma = 0.02\Gamma_n$) supravodiča pri $T = 0$. Konštanta rozptylu v normálnom stave je: $\Gamma_n = 5\bar{\Delta}$ vo všetkých uvažovaných prípadoch. V ľavom paneli sú znázornené hustoty stavov pre Andersonov resp. Dynesov supravodič, normalizované na konštantnú hustotu stavov v normálnom stave N_0 . Farebne tieňované plochy označujú obsadené stavy. V pravom paneli sú znázornené reálne časti vodivosti kovového vodiča, Andersonovho a Dynesovho supravodiča. Farebne tieňované plochy znázorňujú váhu, ktorá sa kvôli zachovaniu sumačného pravidla priradí singularnej časti vodivosti. Tento príspevok je znázornený na frekvencii $\omega = 0$.

Prvý krát sa formuly v tvare (28) objavili vo fenomenologickej, uhádnutej podobe v [17]. V našom článku [H3] ich však získavame ako limitný prípad vodivosti v rámci teórie

lineárnej odozvy [18, 20, 21]. Naviac, náš všeobecný vzťah pre optickú vodivosť, prezentovaný v článku [H3], zahŕňa prípady aj mimo špinavej limity a je preto univerzálnejší ako vzťah (28).

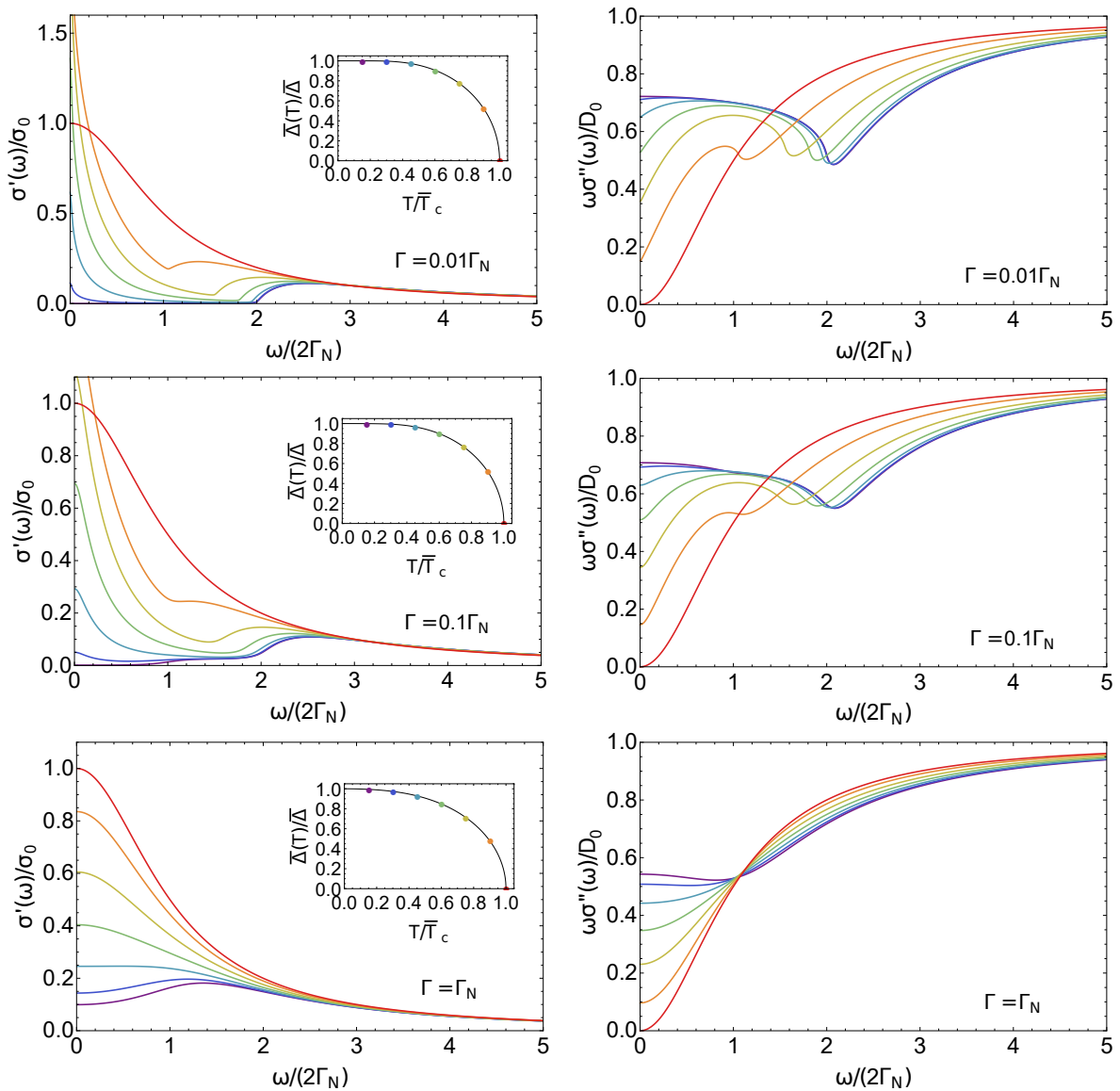
Na obr. 16 prezentujeme teplotnú závislosť optickej vodivosti pre Dynesov supravodič v prípadoch so zvyšujúcim sa pomerom Γ/Γ_n , charakterizujúcim rastúci vplyv nečistôt vedúcich k NP rozptylom. Všimnime si, že rastúci vplyv rozptylovej konštanty Γ sa prejavuje v zaplňaní spektroskopickkej oblasti $0 < \omega < 2\bar{\Delta}$ podobne, ako sa prejavuje vplyv rastúcej teploty. Zároveň môžeme so zvyšujúcou hodnotou Γ pozorovať pokles zlomku koncentrácie elektrónov v supravodivom kondenzáte n_s/n .



Obr. 16: Frekvenčná závislosť reálnej a imaginárnej časti vodivosti pre Dynesov supravodič s fixovanou konštantou rozptylu v normálnom stave $\Gamma_n = 5\bar{\Delta}$ a meniacou sa NP rozptylovou konštantou Γ . Závislosti $\bar{\Delta}(T)$ boli pre rôzne hodnoty Γ/Γ_n získané z výpočtov popísaných v [H1] a ich priebehy sú znázornené v insetoch. Všimnime si, že hodnoty pre $\omega\sigma''(\omega)$ v limite $\omega \rightarrow 0$ prezrádzajú priamo hodnotu zlomku supravodivej časti kondenzátu n_s/n .

Keďže formuly v [H3] môžu byť použité aj mimo špinavej limity, na obr. 17 prezentujeme aj výsledok v prípade menšej hodnoty rozptylovej konštanty v normálnom stave $\Gamma_n = 0.5\bar{\Delta}$. Pri porovnaní reálnych častí na obr. 16 a 17 vidíme jasne posunutý offset,

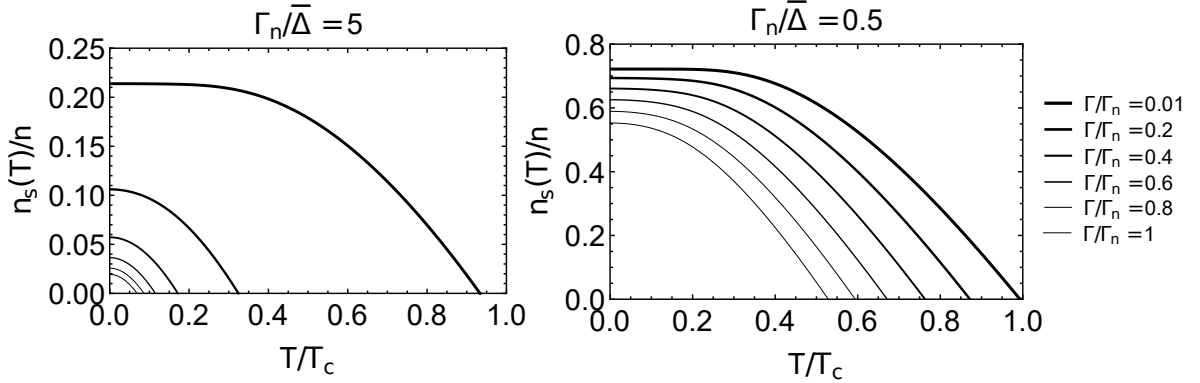
spôsobený menšou hodnotou Γ_n . Pri obrázkoch imaginárnej časti vodivosti, zobrazených na obr. 17 môžeme jasne vidieť prečo sa imaginárnu časť oplatí kresliť ako $\omega\sigma''(\omega)/D_0$. V normálnom stave totiž platí $\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega\sigma''_n(\omega)/D_0 = 1$, čo sa samozrejme prejaví v prípade $\omega \gg \bar{\Delta}$ aj v supravodivom stave. Keďže však $\sigma''(\omega)$ obsahuje v supravodivom stave aj Kramers-Kronigov obraz delta funkčnej časti reálnej vodivosti, bude platiť $\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega\sigma''_n(\omega)/D_0 = \text{konšt.}$ V prípade čistého supravodiča navyše v prípade nulovej teploty platí $\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega\sigma''(\omega)/D_0 = n_s/n = 1$ a vplyv nečistôt sa prejaví práve v potlačení tejto konštanty (zodpovedajúcej váhe delta funkčnej časti $\sigma'(\omega)$). Porovnaním imaginárnych častí zobrazených týmto spôsobom na obr. 16 a 17 vidíme, že v prípade kedy uvažujeme menší vplyv nečistôt je aj hodnota koncentrácie elektrónov v supravodivom kondenzáte bližšia jednej.



Obr. 17: Frekvenčná závislosť reálnej a imaginárnej časti vodivosti pre Dysonov supravodič s fixovanou konštantou rozptylu v normálnom stave $\Gamma_n = 0.5\bar{\Delta}$ a meniacou sa NP rozptylovou konštantou Γ . Ostatné vlastnosti uvedených plotov sú rovnaké ako na obr. 16.

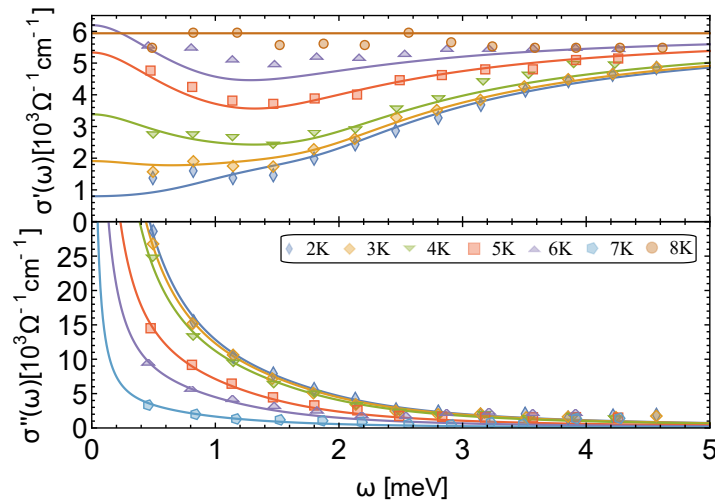
Súčasťou článku [H3] je taktiež analýza koncentrácie elektrónov v supravodivom kondenzáte pri nulovej teplote. Nakoľko v spomínanom článku sme nerozoberali teplotnú závislosť tejto veličiny, venujeme jej pár slov v tejto časti dizertačnej práce.

Výsledok numerického výpočtu uvažujúc dve rôzne hodnoty rozptylovej konštanty v normálnom stave je zobrazený na obr. 18. Ako môžeme vidieť, teplotná závislosť supravodivej časti koncentrácie elektrónov je kvalitatívne bez prekvapení.



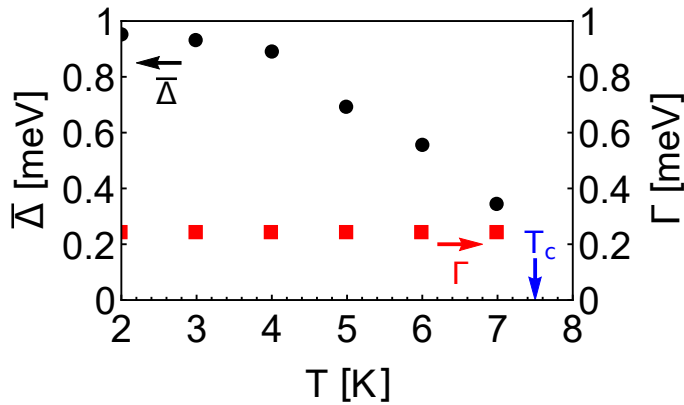
Obr. 18: Teplotná závislosť koncentrácie elektrónov v supravodivom kondenzáte pre rovnaké hodnoty rozptylových konštant v normálnom stave, aké boli použité v prípade obr. 16 a 17.

Nakoniec sa znova dostávame k súvisu našich výsledkov pre optickú vodivosť Dynesovho supravodiča s experimentom. Tentokrát prostredníctvom porovnania predpovede pre vodivosť supravodiča obsahujúceho NP nečistoty v špinavej limite vo forme (28) a dát prezentovaných v [22] pre 15.1 nm hrubú vzorku molybdén nitridu MoN. Autori spomínaného článku sa snažia vysvetliť veľkú mieru absorpcie meranej na tejto vzorke aj pri nízkej teplote v intervale spektroskopicky zakázaných stavov pomocou kombinácie Mattis-Bardeenovej teórie [23] a paralelného, normálneho vodivostného kanálu.



Obr. 19: Fity reálnej a imaginárnej časti optickej vodivosti použitím (28), pre 15.1 nm hrubú vzorku MoN supravodiča skúmaného v [22]. Pri teplote $T = 2\text{K}$, sú fity trojparametrické. Pri krivkách zodpovedajúcich väčším teplotám používame len jeden fitačný parameter $\bar{\Delta}(T)$.

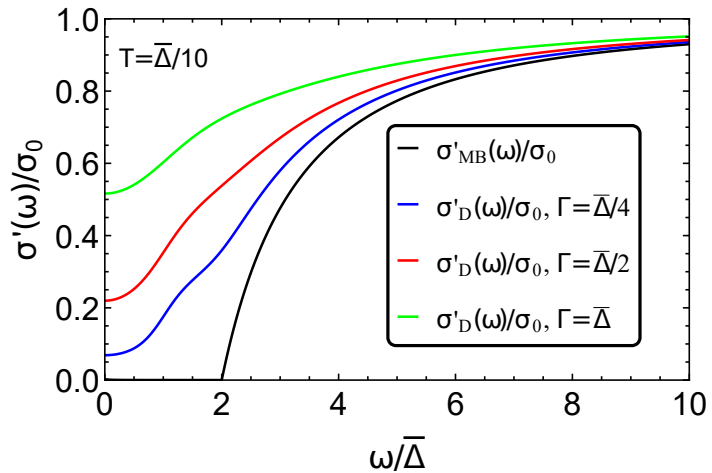
Náš pokus o vysvetlenie tohto experimentu spočíva na predpoklade prirodzenej prítomnosti nečistôt spôsobujúcich NP rozptyly, podobne ako v článkoch [3, 4, 5, 7, 8, 9]. Výsledné fity sú zobrazené aj s krátkym vysvetlením na obr. 19. Poznamenajme, že pri teplote $T = 2K$ pracujeme v trojparametrickom priestore uvažujúc: σ_0 , Γ a $\bar{\Delta}(T)$ ako fitačné parametre. V prípade vyšších teplôt už držíme σ_0 a Γ fixované, v súlade s ich teplotnou nezávislosťou v rámci teórie Dynesových supravodičov. Prostredníctvom metódy najmenších štvorcov následne hľadáme jediný voľný parameter $\bar{\Delta}(T)$ pre každú teplotu. Nájdené hodnoty $\bar{\Delta}(T)$ sú zobrazené na obr. 20.



Obr. 20: Hodnoty $\bar{\Delta}(T)$ dosiahnuté fitovaním experimentálnych dát zobrazených na obr. 19 prostredníctvom metódy najmenších štvorcov. Zobrazená je taktiež hodnota rozptylovej konštanty Γ , ktorá bola určená pri najnižšej teplote: $T = 2K$ a pri vyšších teplotách je v súlade s teóriou Dynesových supravodičov fixovaná na konštantnej hodnote.

V úplnom závere tejto časti sa pozrieme na naše ďalšie pokusy využitia teoretického modelu Dynesovho supravodiča v prípade vodivosti pre rôzne vzorky supravodičov obsahujúcich nečistoty. Nakolko (podľa nášho uváženia) získané závery z tejto časti predstavujú čiastkové výsledky, ktoré dotvárajú mozaiku študovanej problematiky, rozhodli sme sa ich zaradiť do dizertačnej práce.

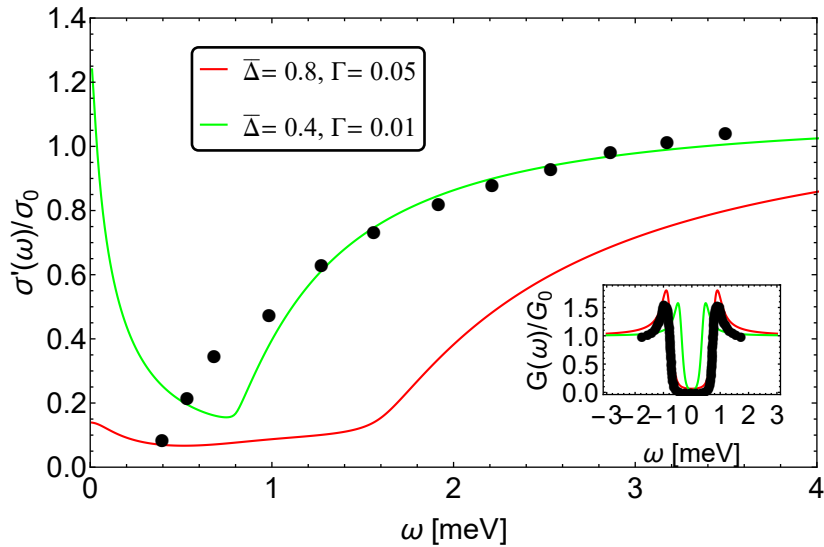
Oba pokusy sa týkajú vzorky znečisteného NbN supravodiča. V prvom prípade nás opäť raz budú zaujímať tenké filmy tohoto materiálu, študované v [24].



Obr. 21: Reálna časť optickej vodivosti v špinavej limite, vypočítaná použitím (28) v limite nízkych teplôt. Rôzne farby zodpovedajú rôznym hodnotám NP rozptylovej konštanty Γ .

Naším hlavným cieľom bolo pozrieť sa na to, či sme schopní dosiahnuť výsledky, ktoré sú systematicky vyššie (resp. dosahujú väčšiu hodnotu vodivosti) ako teoretická predpoveď pochádzajúca z Mattis-Bardeenovej teórie a to aj pre $\omega \geq 2\bar{\Delta}$. Presne takéto správanie bolo totiž pozorované v [24]. Ako môžeme vidieť na obr. 21, uvažovaním dostatočne vysokej hodnoty rozptylovej konštanty Γ (zodpovedajúcej NP rozptylovým procesom) sme naozaj schopní túto vlastnosť dosiahnuť. Problémom však je, že väčšia hodnota Γ prirodzene prenáša spektroskopickú váhu aj do stavov s $\omega \leq 2\bar{\Delta}$ (tzv. *ingapové stavy*). Keďže predpovedaná štruktúra vnútri supravodivo angažovaných stavov nezodpovedá tej experimentálne zistenej v [24], musíme túto analýzu uzavrieť s tvrdením, že NbN s najväčšou pravdepodobnosťou nie je Dynesov supravodič.

Tomuto záveru nasvedčuje aj porovnanie experimentálnych dát získaných na inej tenkej vzorke NbN supravodiča študovanej tentokrát v práci [25]. Autori práce uvádzajú svoje výsledky pre merania ako optickej, tak aj tunelovej vodivosti. Keďže v rámci teórie Dynesových supravodičov máme k dispozícii teoretickú predpoveď pre oba z týchto experimentov, je našou prirodzenou úlohou spraviť porovnanie. Výsledok takéhoto porovnania prezentujeme na obr. 22. Červené krivky pritom zodpovedajú voľbe parametrov, ktoré dokážu kvalitatívne popísať tunelovú vodivosť, zatiaľ čo zelené krivky využívajú parametre z fitov vodivosti.



Obr. 22: Fit reálnej časti optickej vodivosti použitím (28), pre vzorku NbN supravodiča skúmaného v [25]. V insete prezentujeme aj fit tunelovej vodivosti. Všetky parametre sú uvedené v jednotkách meV. Poznamenajme, že autori v [25] uvádzajú z neznámych dôvodov $\bar{T}_c = 4.3K$ v prípade merania tunelovej vodivosti normovanej na normálny stav $G(\omega)/G_0$ (meranej pri $T = 0.15\bar{T}_c$) a $\bar{T}_c = 4.2K$ pri meraniach optickej vodivosti (meranej pri $T = 0.4\bar{T}_c$). Rôzne hodnoty parametrov môžu nasvedčovať tomu, že rôzne merania boli robené na rôznych vzorkách.

Ako môžeme vidieť na obr. 22, v prípade tejto vzorky NbN supravodiča nie sme schopní s dostatočnou presnosťou popísať oba z uvažovaných experimentov. Ukazuje sa totiž, že

sme schopní kvalitatívne popísať buď hustotu stavov, alebo optickú vodivosť, avšak nie obe súčasne. Ak by sme tieto merania chápali ako merania na dvoch rôznych vzorkách (špekulatívna úvaha vplyvu substrátu na niektoré z meraní povedzme), potom by popis pomocou modelu Dynesovho supravodiča bol schopný kvalitatívne opísať hlavné obrysy meraných výsledkov pre tunelovú a optickú vodivosť súčasne.

Electromagnetic properties of impure superconductors with pair-breaking processes

František Herman and Richard Hlubina

Department of Experimental Physics, Comenius University, Mlynská Dolina F2, 842 48 Bratislava, Slovakia

Recently a generic model has been proposed for the single-particle properties of gapless superconductors with simultaneously present pair-conserving and pair-breaking impurity scattering (the so-called Dynes superconductors). Here we calculate the optical conductivity of the Dynes superconductors. Our approach is applicable for all disorder strengths from the clean up to the dirty limit and for all relative ratios of the two types of scattering, nevertheless the complexity of our description is equivalent to that of the widely used Mattis-Bardeen theory. We identify two optical fingerprints of the Dynes superconductors: (i) the presence of two absorption edges and (ii) a finite absorption at vanishing frequencies even at the lowest temperatures. We demonstrate that the recent anomalous optical data on thin MoN films can be reasonably fitted by our theory.

PACS numbers: 74.25.Gz, 74.62.En

I. INTRODUCTION

In the limit of low temperatures and low excitation energies, the single-particle properties as well as the two-particle response functions of metals are governed by elastic scattering on impurities. Provided that the effect of impurities can be described by classical fields, the normal-state properties are largely independent of the precise nature of those fields. However, once the metal becomes superconducting, a sharp distinction can be made between two types of impurity scattering: If the impurity potential is time reversal-invariant, the corresponding scattering does not destroy the pairing, and Anderson gave a very general argument that neither the thermodynamic properties, nor the tunneling density of states of the superconductor can change with respect to the clean case.¹ On the other hand, Abrikosov and Gor'kov have shown that, if the impurity potential does not respect time-reversal symmetry, then the corresponding scattering becomes pair breaking, thereby affecting both, the thermodynamics and the tunneling density of states of the superconductor.²

Surprisingly, experimentally it has been found that, quite often, the tunneling density of states of dirty superconductors $N(\omega)$ is described neither by the Anderson result, nor by the Abrikosov-Gor'kov theory, but rather by the following simple phenomenological Dynes formula:³⁻⁵

$$N(\omega) = N_0 \text{Re} \left[\frac{\omega + i\Gamma}{\sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}} \right], \quad (1)$$

where N_0 is the normal-state density of states, $\bar{\Delta}$ is the ideal gap of the dirty superconductor, and Γ describes its filling by in-gap states. The square root in Eq. (1) has to be taken so that its imaginary part is positive and we keep this convention throughout this paper. The microscopic origin of the Dynes formula had been unclear for a long time, but in a recent paper⁶ we have shown that the tunneling density of states described by Eq. (1) is realized in systems with pair-breaking classical disorder, provided that the pair-breaking potentials have a

Lorentzian distribution with width Γ ; we did not need to make any assumptions about the nature of the pair-conserving disorder.

More importantly, we have also found that the full 2×2 Nambu-Gor'kov Green's function of a Dynes superconductor with density of states Eq. (1) can be described by just three parameters: the ideal gap $\bar{\Delta}$ and the pair-conserving and pair-breaking scattering rates Γ_s and Γ , respectively. The final result for the Green's function can be written in the following elegant way⁷

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} \not{\partial} \ln [\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon(\omega)^2], \quad (2)$$

where $\not{\partial} = \tau_0 \frac{\partial}{\partial \omega} - \tau_1 \frac{\partial}{\partial \Delta} - \tau_3 \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}$ and τ_i are the Pauli matrices. In Eq. (2) we have also introduced the function

$$\epsilon(\omega) = \sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2} + i\Gamma_s. \quad (3)$$

Note that $\epsilon(\omega)$ of a Dynes superconductor differs from its value in a clean superconductor in a minimalistic way: pair-conserving processes are taken into account by the replacement $\epsilon(\omega) \rightarrow \epsilon(\omega) + i\Gamma_s$, whereas pair-breaking processes are described by the frequency shift $\omega \rightarrow \omega + i\Gamma$ implicit in Eq. (1).

In Ref. 7 we have pointed out that the Green function Eq. (2) is analytic in the upper half-plane and has the correct large-frequency asymptotics; therefore it satisfies the known exact sum rules. We have also proven that the diagonal components of the corresponding spectral function are positive-definite, as it should be. Moreover, in the three limiting cases of either $\Gamma = 0$, or $\Gamma_s = 0$, or $\bar{\Delta} = 0$, Eq. (2) reproduces the well-known results. In particular, for $\bar{\Delta} = 0$ Eq. (1) describes a normal metal with the total scattering rate

$$\Gamma_n = \Gamma_s + \Gamma. \quad (4)$$

Therefore, although the Green function Eq. (2) has been derived only for a special distribution of pair-breaking fields within the coherent potential approximation, we believe that it represents a generic Green function of the Dynes superconductors.

In order to support this point of view, in Ref. 7 we have compared the results of high-resolution angle resolved photoemission spectroscopy to the Dynes phenomenology, and we have found that Eq. (2) can fit the spectra of the cuprates⁸ with reasonable accuracy. This success has motivated us to investigate also the two-particle properties of the Dynes superconductors, and in this paper we will discuss the arguably most important of such properties, namely the optical conductivity $\sigma(\omega)$.

The specific problem which we will be interested in is the following. In the normal state, the optical properties are governed only by the total scattering rate Γ_n , but in the superconducting state the partition of Γ_n into its components Γ_s and Γ must obviously be of crucial importance, and different partitionings will lead to different functions $\sigma(\omega)$. Our goal in this paper will be to describe qualitative effects of such partitionings.

Electrodynamics of superconductors has been studied since the early days of the BCS theory, starting with the classic paper by Mattis and Bardeen which focused on the dirty limit with no pair-breaking scatterings.⁹ In an important paper that appeared relatively soon thereafter, Nam has developed a Green's function approach to the problem,¹⁰ which stimulated many subsequent works.¹¹⁻¹⁴ In a later publication, Nam himself used this approach in studying the effect of pair-breaking processes on $\sigma(\omega)$,¹¹ but he worked within the Abrikosov-Gor'kov theory which makes use of the Born approximation and is not directly relevant to the Dynes superconductors.

Basically the same approach as in Ref. 11 has been used in most of the published literature on the effects of pair breaking. As an example let us mention the recent combined tunneling and microwave study of TiN films:¹³ the data has been analyzed similarly as in Ref. 11 and the authors did find good agreement between theory and experiment in the low-disorder limit where the Born approximation might be expected to work. However, at the same time they have found strong discrepancy between the Abrikosov-Gor'kov theory and experiment in the highly disordered films. Yet another recent paper, technically equivalent to Ref. 11, is devoted to the study of the influence of pair breaking on the London penetration depth.¹⁵

It should be mentioned that two important recent papers^{16,17} treat electrodynamics of superconductors with magnetic impurities going beyond the Born approximation for magnetic scattering. Single-particle properties in these papers are described on the level of the Marchetti-Simons generalization of the Usadel equations,¹⁸ which reproduces Shiba's T-matrix result for the density of states.¹⁹ Unfortunately, although scattering on a single magnetic impurity is treated exactly within this approach, Refs. 16,17 can not be quantitatively correct in case of dense magnetic impurities, since they do not take multiple scattering on different impurities into account. This means then that Refs. 16,17 are applicable only to superconductors with not too large density of magnetic impurities, and therefore they can

not describe electrodynamics of the Dynes superconductors with a dense and broad distribution of pair-breaking fields.⁶

To the best of our knowledge, the Dynes phenomenology has been taken seriously only in the very recent paper Ref. 14, where Nam's dirty-limit formula for $\sigma(\omega)$ was evaluated assuming that the tunneling density of states is given by Eq. (1). However, since neither the gap function $\Delta(\omega)$, nor the full Green's function of a Dynes superconductor were known at that time, the authors of Ref. 14 could only speculate about the correct formula for $\sigma(\omega)$ in the dirty limit. Moreover, it was unclear how to obtain results for the Dynes superconductors away from the dirty limit. Both of these points will be addressed in this paper.

The outline of this paper is as follows. In Section 2 we briefly summarize Nam's results for the optical conductivity of a general Eliashberg superconductor, making use of a slightly modified notation with respect to the original paper Ref. 10. In Section 3 we apply Nam's analysis to the case of the Dynes superconductors described by Eq. (2). Our presentation concentrates on various qualitative aspects of the optical conductivity for all disorder strengths from the clean up to the dirty limit and for all relative ratios Γ/Γ_s . In Section 4 we analyze the recent anomalous optical data on thin MoN films²⁰ and we demonstrate that they can be reasonably fitted by the theory for the Dynes superconductors.

II. OPTICAL CONDUCTIVITY: GENERAL THEORY

We will assume that the Fermi surface is isotropic and the normal-state spectrum is quadratic with effective mass m . Under these assumptions also the optical conductivity $\sigma(\omega) = \sigma'(\omega) + i\sigma''(\omega)$ is isotropic and, within linear response theory, it can be written as^{10,21,22}

$$\sigma(\omega) = \frac{i}{\omega + i0^+} K(\omega), \quad (5)$$

where the current-current correlation function $K(\omega)$ on the imaginary (Matsubara) axis reads, neglecting the vertex corrections,

$$K(\omega_m) = D_0 + \frac{e^2 v_F^2}{3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \times T \sum_{\omega_l} \text{Tr} \left[\hat{G}(\mathbf{k}, \omega_l + \omega_m) \hat{G}(\mathbf{k}, \omega_l) \right]. \quad (6)$$

The first term corresponds to the constant diamagnetic contribution $D_0 = ne^2/m$ which depends only on the density of the electrons n , their mass m , and their charge e . The second term corresponds to the paramagnetic contribution which is affected by superconductivity as well as by the impurities. The momentum integration is taken over the entire Brillouin zone, T represents the temperature, and v_F is the Fermi velocity.

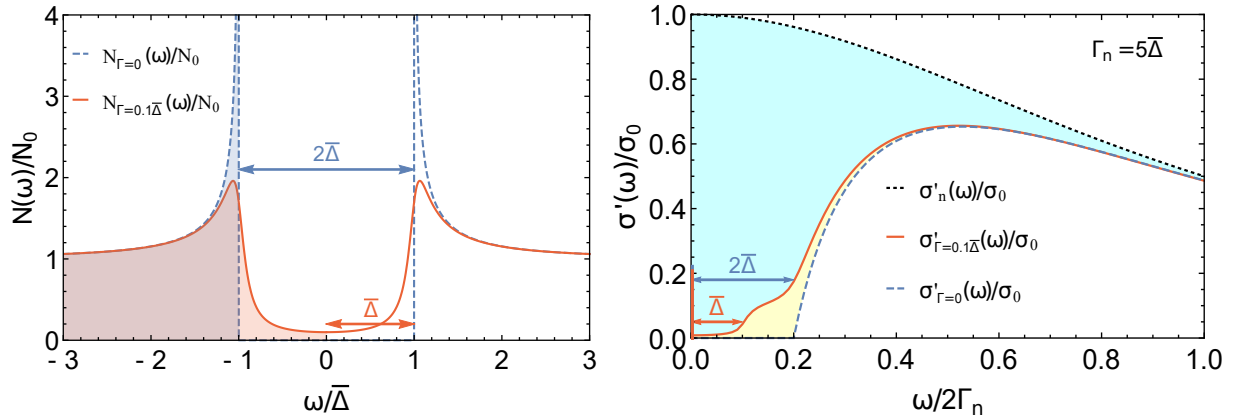


FIG. 1: Comparison, at $T = 0$, of a normal metal with two superconductors: a superconductor without pair-breaking processes ($\Gamma = 0$) and a Dynes superconductor ($\Gamma = 0.1\bar{\Delta}$). Left panel: density of states for both superconductors, normalized with respect to the constant normal-state density N_0 . Shaded areas denote the occupied states. Right panel: real part of the optical conductivity $\sigma'(\omega)$ for the normal metal and for both superconductors. The total scattering rate is $\Gamma_n = 5\bar{\Delta}$ in all cases. Shaded areas show the weight which is missing in order to satisfy the sum rule Eq. (12). The missing weight is carried by the singular contribution to Eq. (8); this contribution is schematically shown as a bar at $\omega = 0$.

A note about the vertex corrections is in place here. It is well known that, in general, in order to satisfy the Ward identities the vertex corrections should be present. However, in our case they do not appear, and the reasons are the same as in Refs. 10,16,17. First, in order to avoid the phase modulation of the superconducting order parameter,²³ we work in the transverse gauge. Second, since the impurity potential considered in Ref. 6 is point-like, also the normal-state vertex corrections to conductivity vanish in the CPA formalism.^{24,25}

Nam has noticed that, when evaluating Eq. (6) within the Eliashberg theory, it is advantageous to replace the Eliashberg functions $Z(\omega)$ and $\Delta(\omega)$ with three complex functions: energy function $\epsilon(\omega)$, density of states $n(\omega)$, and density of pairs $p(\omega)$ defined by

$$\begin{aligned}\epsilon(\omega) &= Z(\omega)\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}, \\ n(\omega) &= \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}}, \\ p(\omega) &= \frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}}.\end{aligned}$$

Note that $n^2(\omega) - p^2(\omega) = 1$ and there is some redundancy in this formulation. Taking into account that the square root is to be taken so that its imaginary part is positive, one can check readily the symmetry properties

$$\epsilon(-\omega) = -\epsilon^*(\omega), \quad n(-\omega) = n^*(\omega), \quad p(-\omega) = -p^*(\omega).$$

In terms of the functions $\epsilon(\omega)$, $n(\omega)$, and $p(\omega)$, the Nambu-Gor'kov Green's function of the Eliashberg superconductors can be written as

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} \left[\frac{n(\omega)\tau_0 + p(\omega)\tau_1 + \tau_3}{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{n(\omega)\tau_0 + p(\omega)\tau_1 - \tau_3}{\epsilon(\omega) + \epsilon_{\mathbf{k}}} \right]. \quad (7)$$

Making use of Eq. (7), Nam has succeeded to express the optical conductivity in terms of the functions $n(\omega)$, $p(\omega)$, and $\epsilon(\omega)$. His result can be written in the following, slightly modified form:

$$\sigma(\omega) = \pi D \delta(\omega) + \sigma_{\text{reg}}(\omega). \quad (8)$$

The first term describes the singular contribution of the condensate to frequency-dependent conductivity. Its magnitude can be written in terms of the superfluid density n_s as $D = n_s e^2 / m$ and is given by

$$\frac{D}{D_0} = \frac{n_s}{n} = - \int_0^\infty d\nu \tanh\left(\frac{\nu}{2T}\right) \text{Re} \left[\frac{p^2(\nu)}{\epsilon(\nu)} \right]. \quad (9)$$

In the non-superconducting state obviously $D = n_s = 0$.

The second term in Eq. (8) represents the non-singular part of the conductivity and is given by¹²

$$\sigma_{\text{reg}}(\omega) = \frac{iD_0}{\omega} \int_{-\infty}^\infty d\nu \tanh\left(\frac{\nu}{2T}\right) H(\nu + \omega, \nu), \quad (10)$$

where we have introduced an auxiliary complex function

$$\begin{aligned}H(x, y) &= \frac{1 + n(x)n^*(y) + p(x)p^*(y)}{2[\epsilon^*(y) - \epsilon(x)]}, \\ &+ \frac{1 - n(x)n(y) - p(x)p(y)}{2[\epsilon(y) + \epsilon(x)]}.\end{aligned} \quad (11)$$

The formulae Eqs. (8,9,10,11) are valid for any Eliashberg superconductor. It should be noted that for $\omega \rightarrow 0$, Eq. (10) predicts that $\sigma''_{\text{reg}}(\omega) \approx D/\omega$, which describes the inductive response of the condensate.

Before concluding this Section it is worth pointing out that Nam's theory satisfies the conductivity sum rule

$$\int_0^\infty d\omega \sigma'(\omega) = \frac{\pi}{2} D_0. \quad (12)$$

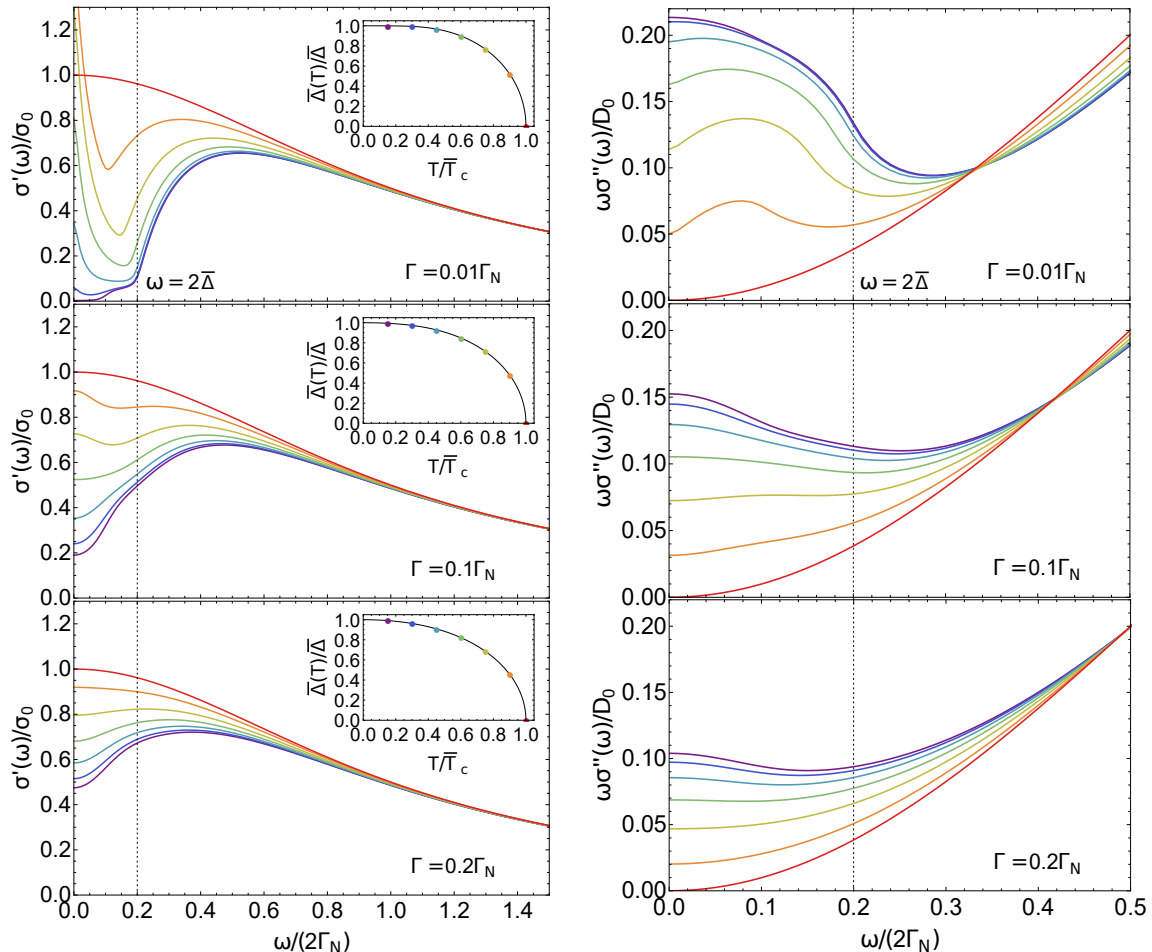


FIG. 2: Frequency dependence of the real and imaginary parts of the conductivity Eq. (10) for the Dyne superconductors with fixed total scattering rate $\Gamma_n = 5\bar{\Delta}$ and varying pair-breaking rates Γ . The temperature dependence of the gap, $\bar{\Delta}(T)$, was calculated using Eq. (15). The studied temperatures and the corresponding Γ -dependent values of $\bar{\Delta}(T)$ are presented in the insets. Note that, in all panels, the highest-temperature curves represent the normal state. The energy scale $2\bar{\Delta}$ is shown by the dotted lines. Let us point out that the values of $\omega\sigma''(\omega)/D_0$ at $\omega \rightarrow 0$ allow for a direct determination of the superfluid fraction n_s/n .

The proof of Eq. (12) makes use of two observations following from Eqs. (5,6): (i) the function $\sigma(\omega)$ satisfies the Kramers-Kronig relations, and (ii) the high-frequency limit of $\sigma''(\omega)$ is D_0/ω . Writing down the Kramers-Kronig relation for $\sigma''(\omega)$ at $\omega \rightarrow \infty$, one recognizes easily that we arrive at Eq. (12).

III. OPTICAL CONDUCTIVITY: DYNES SUPERCONDUCTORS

Now we apply the general expressions from the previous Section to the Dyne superconductors, for which the energy function $\epsilon(\omega)$ is given by Eq. (3). The gap function $\Delta(\omega)$ of the Dyne superconductors is also known:⁶

$$\Delta(\omega) = \frac{\omega}{\omega + i\Gamma} \bar{\Delta}, \quad (13)$$

and this implies that

$$n(\omega) = \frac{\omega + i\Gamma}{\sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}}, \quad p(\omega) = \frac{\bar{\Delta}}{\sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \bar{\Delta}^2}} \quad (14)$$

Typical frequency dependence of the real and imaginary parts of $n(\omega)$, $p(\omega)$, and $\epsilon(\omega)$ of a Dyne superconductor is shown in the Appendix. Equations (8,9,10,11) together with Eqs. (3,14) provide a complete description of the electromagnetic properties of the Dyne superconductors. Note that a single integration is required to determine the optical conductivity $\sigma(\omega)$, therefore the numerical cost is the same as in the widely used Mattis-Bardeen theory,⁹ which can be viewed as a special limit ($\Gamma = 0$ and $\Gamma_n \gg \bar{\Delta}$) of the present approach.

As shown in Ref. 6, the magnitude of the gap $\bar{\Delta}$ of a Dyne superconductor is controlled by the pair-breaking scattering rate Γ , and in the BCS model with coupling constant λ and cutoff frequency Ω it can be found by

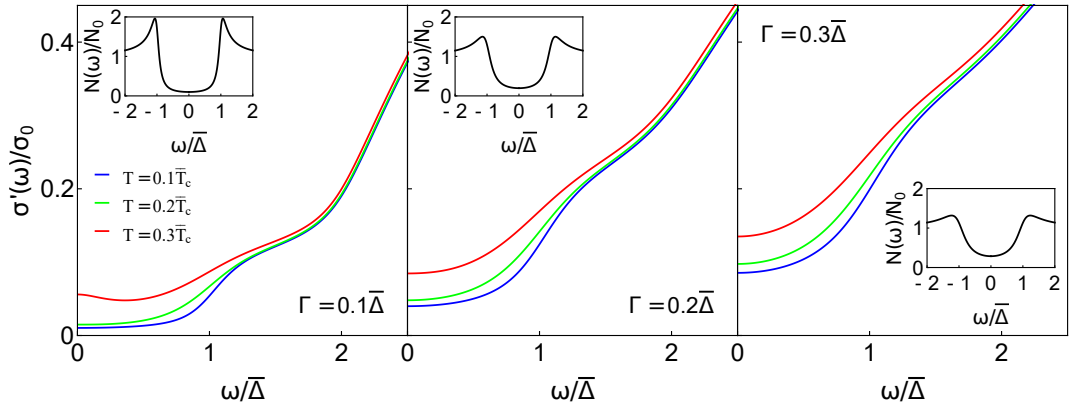


FIG. 3: Frequency dependence of the dirty-limit conductivity $\sigma'_{\text{reg}}(\omega)$, Eq. (17), at low frequencies. For each considered value of the pair-breaking rate Γ several temperatures are studied, and the corresponding Dynes density of states at $T = 0$ is shown in the inset. The absorption edge at $\omega = \bar{\Delta}$ is clearly visible for $\Gamma \lesssim 0.3\bar{\Delta}$ and $T \lesssim 0.3T_c$.

solving the self-consistent equation

$$\bar{\Delta}(T) = 2\lambda\pi T \sum_{\omega_n > 0}^{\Omega} \frac{\bar{\Delta}(T)}{\sqrt{(|\omega_n| + \Gamma)^2 + \bar{\Delta}^2(T)}}, \quad (15)$$

where the sum is taken over the Matsubara frequencies ω_n . Starting with Eq. (15), we use the following notation: $\bar{\Delta}(T)$ denotes the gap at temperature T , whereas the $T = 0$ value of the gap will be denoted simply as $\bar{\Delta}$. Moreover, the critical temperature of the dirty system will be called \bar{T}_c .

Before discussing the optical conductivity in the superconducting state, it is useful to start by analyzing the normal state $\bar{\Delta} = 0$. In this case we have $\epsilon(\omega) = \omega + i\Gamma_n$, $n(\omega) = 1$, and $p(\omega) = 0$, and therefore the normal-state optical conductivity of a Dynes superconductor is given by the simple Drude formula

$$\sigma_n(\omega) = \frac{D_0}{2\Gamma_n - i\omega}. \quad (16)$$

Note that the relative weight of pair-breaking and pair-conserving processes is irrelevant in the normal state and therefore $\sigma_n(\omega)$ depends only on the total scattering rate Γ_n . In what follows we will measure the conductivities in terms of $\sigma_0 = D_0/(2\Gamma_n)$, which is the normal-state conductivity at $\omega = 0$.

Our main goal is to study the change of the optical conductivity $\sigma(\omega)$ in the superconducting state at fixed Γ_n for varying ratios of pair-conserving and pair-breaking processes. In Fig. 1 we plot $\sigma'(\omega)$ of a moderately dirty Dynes superconductor with $\Gamma_n = 5\bar{\Delta}$ at temperature $T = 0$ for two values of the pair-breaking scattering rate Γ . In absence of pair-breaking, i.e. for $\Gamma = 0$, our results are consistent with the Mattis-Bardeen theory generalized so as to apply for arbitrary values of Γ_s :²⁶ for $\omega < 2\bar{\Delta}$, the conductivity vanishes, whereas for $\omega \gg \bar{\Delta}$ it approaches the normal-state value. Note that already very small amount of pair-breaking $\Gamma = 0.02\Gamma_n$ leads to dramatic changes of the low-frequency conductivity: even

at the lowest frequencies, $\sigma'_{\text{reg}}(\omega)$ is finite, and in addition to the step at $\omega = 2\bar{\Delta}$, optical conductivity also shows an additional step at $\omega = \bar{\Delta}$. Both of these results can be easily understood by inspecting the density of states of the Dynes superconductor, also shown in Fig. 1: similarly as in the normal metal, absorption at arbitrarily low frequencies is possible also in the Dynes superconductor, and the joint density of states increases at the two observed steps. Figure 2 shows that the filling in of the gap by pair-breaking processes quickly grows with Γ and that the effect of pair breaking processes is quite similar to that of raising the temperature. As a result, the missing weight below the $\sigma'_n(\omega)$ curve diminishes, resulting (due to the Ferrell-Glover-Tinkham sum rule²⁷) in quickly decreasing superfluid fraction n_s/n .

Dirty limit. The general formula Eq. (10) is somewhat difficult to interpret, but in the dirty limit, when $\Gamma_s \gg \bar{\Delta}, \Gamma$, it can be simplified considerably. In fact, if we restrict ourselves to frequencies $\omega \ll \Gamma_s$, the function $\epsilon(\omega)$ reduces to $\epsilon(\omega) \approx i\Gamma_n$, and in this case Eq. (10) reduces to the physically much more transparent formulas

$$\begin{aligned} \sigma'_{\text{reg}}(\omega) &= \frac{\sigma_0}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu [f(\nu) - f(\nu + \omega)] \\ &\quad \times [n'(\nu)n'(\nu + \omega) + p'(\nu)p'(\nu + \omega)], \\ \sigma''_{\text{reg}}(\omega) &= -\frac{\sigma_0}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu [1 - 2f(\nu)] \\ &\quad \times [n'(\nu)n''(\nu + \omega) + p'(\nu)p''(\nu + \omega)], \end{aligned} \quad (17)$$

where $f(\nu)$ is the Fermi-Dirac distribution function. Similar expressions have been guessed without proof also in Ref. 14. The real part $\sigma'_{\text{reg}}(\omega)$ may be interpreted as a sum of contributions from the single-particle and Cooper-pair channels, both of which absorb the radiation in a semiconductor-like fashion. Note that, if one sets the pair-breaking rate Γ to zero in Eqs. (17), one recovers a very compact form of the Mattis-Bardeen theory. It is also worth pointing out that the optical conductivity $\sigma_{\text{reg}}(\omega)$ of course does depend, via σ_0 , on the normal-

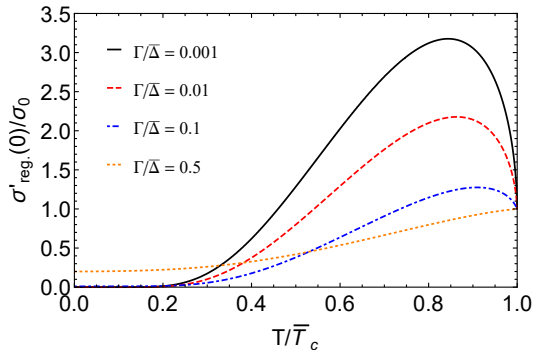


FIG. 4: Temperature dependence of the dirty-limit conductivity $\sigma'_{\text{reg}}(0)$, Eq. (18), for several values of the pair-breaking scattering rate Γ .

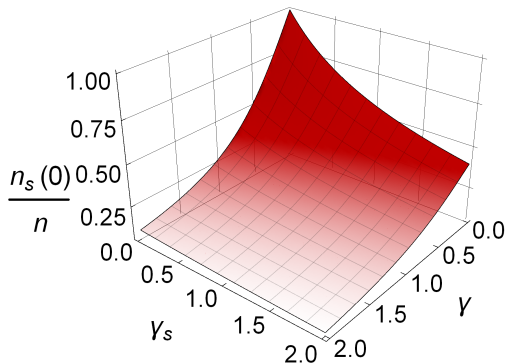


FIG. 5: Superfluid fraction n_s/n at $T = 0$ as a function of the scattering rates γ and γ_s according to Eq. (21).

state scattering rate Γ_n .

An observation of the absorption edge at $\omega = \bar{\Delta}$ would provide a smoking gun for the concept of the Dynes superconductors. In order to identify the conditions under which this feature can be observable, in Fig. 3 we plot $\sigma'_{\text{reg}}(\omega)$ in the experimentally relevant dirty limit. One observes that the absorption edge at $\omega = \bar{\Delta}$ is clearly visible for $\Gamma \lesssim 0.3\bar{\Delta}$ and $T \lesssim 0.3\bar{T}_c$, thus rendering the concept of the Dynes superconductors experimentally fal-

sifiable by optical means.

Coherence peak. It is well known²¹ that in absence of pair breaking, the low-frequency conductivity $\sigma'_{\text{reg}}(\omega \rightarrow 0)$ diverges for all temperatures $T < T_c$. In this paragraph we will calculate $\sigma'_{\text{reg}}(0)$ for a Dynes superconductor, assuming that the dirty limit applies. We will show that $\sigma'_{\text{reg}}(0)$ stays finite, and that, as a function of temperature, it exhibits the well-known coherence peak with a magnitude controlled by Γ . To this end, let us make use of Eq. (17) which implies that

$$\frac{\sigma'_{\text{reg}}(0)}{\sigma_0} = \int_0^\infty \frac{dx}{2T \cosh^2(x/2T)} [n'(x)^2 + p'(x)^2]. \quad (18)$$

Results of the numerical evaluation of Eq. (18) are presented in Fig. 4. Note that, for sufficiently large pair-breaking rates Γ , the temperature dependence of $\sigma'_{\text{reg}}(0)$ is monotonic, without any coherence peaks. However, for sufficiently small Γ , the conductivity $\sigma'_{\text{reg}}(0)$ immediately below T_c grows with decreasing temperature. In the vicinity of T_c , where $\bar{\Delta}$ is small, the growth is controlled by Γ , and for $\Gamma \ll T_c$ it can be shown that

$$\frac{\sigma'_{\text{reg}}(0)}{\sigma_0} = 1 + \frac{\pi}{8} \frac{\bar{\Delta}^2(T)}{\bar{T}_c \Gamma}. \quad (19)$$

When the temperature is decreased further, the thermal factor in Eq. (18) starts to dominate and $\sigma'_{\text{reg}}(0)$ decreases, until ultimately in the low- T region it saturates at

$$\frac{\sigma'_{\text{reg}}(0)}{\sigma_0} = \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + \bar{\Delta}^2}. \quad (20)$$

The formula Eq. (20) is valid in the dirty limit for any ratio between Γ and $\bar{\Delta}$. Note that the results Eqs. (19,20) can be used for a direct determination of the pair-breaking rate Γ by microwave measurements.

Superfluid fraction. The superfluid fraction n_s/n of a Dynes superconductor can be determined from Eq. (9). In the limit $T = 0$, the integral can be taken analytically and, introducing dimensionless scattering rates $\gamma = \Gamma/\bar{\Delta}$ and $\gamma_s = \Gamma_s/\bar{\Delta}$, the result can be written as

$$\frac{n_s(0)}{n} = \begin{cases} \frac{1}{\gamma_s} \left[\arctan(1/\gamma) - \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_s^2}} \left(\arccos \gamma_s + \arctan \frac{\sqrt{1-\gamma_s^2}}{\gamma} - \arctan \frac{\sqrt{1-\gamma_s^2} \sqrt{\gamma^2+1}}{\gamma \gamma_s} \right) \right] & \text{if } \gamma_s < 1, \\ \frac{1}{\gamma_s} \left[\arctan(1/\gamma) - \frac{1}{\sqrt{\gamma_s^2-1}} \ln \frac{(\gamma_s + \sqrt{\gamma_s^2-1})(\gamma + \sqrt{\gamma^2-1})}{\gamma \gamma_s + \sqrt{\gamma_s^2-1} \sqrt{\gamma^2+1}} \right] & \text{if } \gamma_s \geq 1. \end{cases} \quad (21)$$

The formula Eq. (21) is somewhat cumbersome. In order to illustrate its meaning, in Fig. 5 we present a 3D plot of n_s/n at $T = 0$ as a function of γ and γ_s . No-

tice that both types of scattering processes diminish the superfluid fraction, but (as expected) the pair-breaking impurities are much more effective in doing so. We have

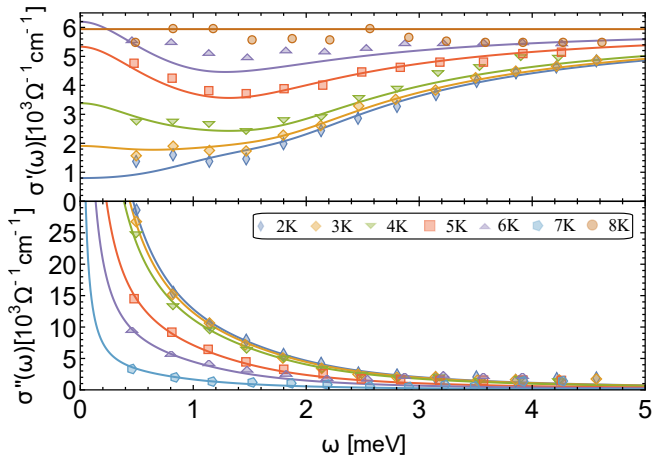


FIG. 6: Real and imaginary parts of the optical conductivity for a 15.1 nm thick MoN sample reported in Ref. 20. Fits of the data to the prediction for a dirty Dynes superconductor, Eqs. (17), are also shown. At $T = 2$ K, the fits are three-parametric. For all curves at higher temperatures there is only one fitting parameter, namely $\bar{\Delta}(T)$.

also checked that in absence of pair-breaking processes, i.e. for $\gamma = 0$, Eq. (21) reduces to the previously published results.^{10,21,28}

For the sake of completeness let us also point out that, instead of using Eq. (9), at finite temperatures the superfluid fraction of a Dynes superconductor can be more conveniently calculated from the Matsubara sum

$$\frac{n_s(T)}{n} = 2\pi T \sum_{\omega_n > 0} \frac{\bar{\Delta}^2}{\Omega_n^2 (\Omega_n + \Gamma_s)}, \quad (22)$$

where $\Omega_n = \sqrt{(|\omega_n| + \Gamma)^2 + \bar{\Delta}^2}$. Note that Eq. (22) can be obtained from the well-known result for superconductors in which only pair-conserving scattering is present,^{10,29} provided one takes the pair-breaking processes into account by the minimal substitution $|\omega_n| \rightarrow |\omega_n| + \Gamma$, which was mentioned in the Introduction.

IV. APPLICATION TO MOLYBDENUM NITRIDE

Motivated by interest in the physics of the superconductor-insulator transition,³⁰ strongly disordered superconducting thin films have recently become the subject of intensive research. Since in-gap states are frequently observed in such systems^{4,5,30,31} and since their tunneling density of states can be often described by the Dynes formula Eq. (1),^{4,5} the theory developed in this paper should be directly applicable precisely to such systems. It is also fortunate that, due to progress in terahertz spectroscopy, high-quality optical data on strongly disordered superconductors have recently become available.^{20,31}

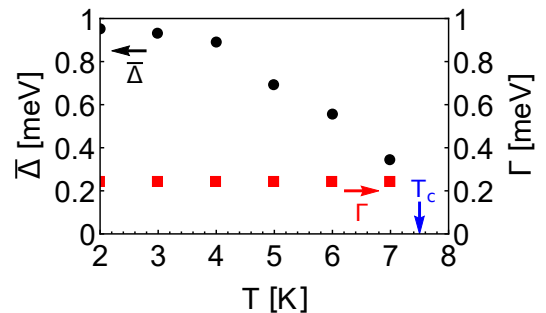


FIG. 7: Temperature dependence of the gap parameter $\bar{\Delta}(T)$ obtained from the fits shown in Fig. 6. Also shown is the value of Γ which has been determined at the lowest temperature $T = 2$ K; at higher temperatures its value was kept fixed.

As an example, in this paper we have chosen to discuss the terahertz spectra obtained by Simmendinger *et al.* on molybdenum nitride (MoN) thin films in Ref. 20. The authors have studied a whole series of films with different thickness, but most details were presented for the 15.1 nm thick film, and we will test the predictions of our theory against this sample.

Simmendinger *et al.* start their analysis by noting that although their films are definitely deeply in the dirty limit, the Mattis-Bardeen theory can not fit their data. The reason is that even at the lowest temperatures, large in-gap absorption has been observed. In Ref. 20 this finding has been explained by the existence of a hypothetical parallel normal-conducting channel inside the sample. While this might be possible - although one would have to explain the absence of an internal proximity coupling between the normal channel and the superconducting channel - we consider here an alternative explanation, namely that MoN is a Dynes superconductor.

We proceed as follows: since the studied sample is obviously in the extremely dirty limit, we can use Eqs. (17) to fit the observed frequency dependence of the real and imaginary parts of conductivity. At the lowest experimental temperature $T = 2$ K the least-squares fitting procedure is robust and we can safely fix the three free parameters entering Eqs. (17), namely the overall scale σ_0 , the superconducting gap $\bar{\Delta}$, and the pair-breaking scattering rate Γ . The resulting fit is shown in Fig. 6; the agreement between theory and experiment is seen to be reasonable.

Next we assume that both σ_0 and Γ do not depend on temperature, and using their values which have been determined at $T = 2$ K, we fit the higher-temperature conductivity data by a single parameter: the superconducting gap $\bar{\Delta}(T)$. The resulting temperature dependence of the superconducting gap $\bar{\Delta}(T)$ exhibits the expected order parameter-like shape, see Fig. 7, and the corresponding fits of the optical conductivity are shown in Fig. 6. The agreement between experiment and theory is satisfactory, especially if we realize that the fits of

two frequency-dependent functions $\sigma'_{\text{reg}}(\omega)$ and $\sigma''_{\text{reg}}(\omega)$ are done using a single free parameter $\bar{\Delta}(T)$ at every temperature $T > 2$ K.

Note that our estimate of the pair-breaking rate of the 15.1 nm thick MoN film, $\Gamma \approx 0.2$ meV, is of the same order of magnitude as $\Gamma \approx 0.1$ meV directly measured by tunneling in a similar 10 nm thick MoC film.⁵ It is worth pointing out that such values are reasonable. In fact, according to our interpretation, Γ is a typical exchange field inside the superconducting film. If we assume that the magnetic impurities are located in the vicinity of the film/substrate interface with area density n_{\square} , and if we characterize the impurities by exchange field J decaying to zero on the length scale a (of atomic dimensions), then we can make the following very rough estimate: $\Gamma \approx Ja^3 n_{\square}/d$. Let us take the typical values $J = 1$ eV, $a = 0.3$ nm, and for the film thickness $d = 15.1$ nm. If we assume that $n_{\square} = x/a^2$ (where x is the fraction of atomic positions occupied by magnetic impurities), then we obtain that $\Gamma \approx 0.2$ meV corresponds to $x = 0.01$, which looks quite reasonable. Larger values of a lead to even smaller concentrations of the magnetic impurities.

V. CONCLUSIONS

Based on Nam's description of the electromagnetic properties of superconductors,¹⁰ in this paper we have presented a comprehensive set of predictions for the optical conductivity of the recently identified Dynes superconductors.^{6,7} In particular, we have shown that two metals with the same optical response in the normal state and equal superconducting gaps Δ may exhibit very different superconducting responses, with the shape of the latter depending on the ratio of the pair-breaking and pair-conserving scattering rates Γ and Γ_s , see Fig. 2.

The most characteristic optical fingerprint of a Dynes superconductor is the presence (at low temperatures and for physically reasonable pair-breaking rates) of an additional absorption edge in $\sigma'(\omega)$ at $\omega = \bar{\Delta}$, which exists in addition to the conventional absorption edge at $\omega = 2\bar{\Delta}$. Another property which is unique to a Dynes superconductor is that the dissipative component of the low-frequency conductivity $\sigma'_{\text{reg}}(\omega \rightarrow 0)$ stays finite down to temperature $T = 0$. Both of these anomalies are in fact a simple consequence of the fact that the Dynes superconductors are gapless, see Fig. 1.

Furthermore we have shown that the pair-breaking scattering rate Γ can be straightforwardly determined from microwave measurements, either from the slope of the coherence peak, Eq. (19), or from the low-frequency conductivity $\sigma'_{\text{reg}}(\omega \rightarrow 0)$ in the limit of low temperatures, Eq. (20), thus enabling comparison with the Γ values obtained from the tunneling spectroscopy.

Practical formulae have been derived for the superfluid fraction n_s/n (or, equivalently, superfluid stiffness) of the Dynes superconductors. In the zero-temperature limit, we have found an explicit algebraic expression, Eq. (21),

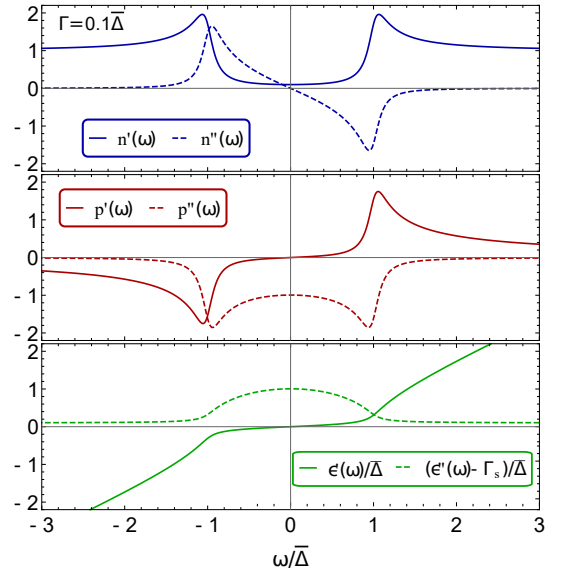


FIG. 8: The real and imaginary parts of the functions $n(\omega)$, $p(\omega)$, and $\epsilon(\omega)$ describing a Dynes superconductor with the pair-breaking rate $\Gamma = 0.1\bar{\Delta}$.

showing how $n_s(0)/n$ depends on the scattering rates Γ and Γ_s . At finite temperatures, the formula Eq. (22), which is suitable for an efficient numerical evaluation of $n_s(T)/n$, has been derived.

Strongly disordered thin superconducting films seem to be the best candidate where the Dynes phenomenology may be observable.^{4,5} This is probably caused by the presence of magnetic impurities at the interface between the film and the substrate, which may be present even in otherwise very clean films.^{32,33} In this paper we have shown that the apparently anomalous optical data for MoN thin films²⁰ can be reasonably fitted by the Dynes optics, see Figs. 6,7. This result lends further support to the identification of strongly disordered thin superconducting films as potential Dynes superconductors.

From the methodological point of view, we would like to point out that Eqs. (8,9,10,11) together with Eqs. (3,14) provide a complete description of the electromagnetic properties of the Dynes superconductors. Their numerical evaluation is equally costly as that which makes use of the generalized Mattis-Bardeen formula,²⁶ but, unlike the latter, allows also for pair-breaking processes. As regards the formal properties of our results, the optical conductivity Eq. (8) has the correct analytic properties and high-frequency asymptotics, and therefore it satisfies also the conductivity sum rule Eq. (12). Moreover, by scanning a wide range of parameters $\bar{\Delta}$, Γ_s , and Γ , we have checked that $\sigma'(\omega)$ for a Dynes superconductor is positive definite (as it should be), although we were not able to prove it. This means that our theory for optics of the Dynes superconductors satisfies the same set of constraints which is obeyed by the simple Drude formula. Since the latter is known to be a good starting point when analyzing the optics of normal metals, we are convinced

that the present theory might play an analogous role in the superconducting state.

Acknowledgments

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contracts No. APVV-0605-14 and No. APVV-15-0496, and by the Agency VEGA under contract No. 1/0904/15.

APPENDIX: THE FUNCTIONS $n(\omega)$, $p(\omega)$, AND $\epsilon(\omega)$

For readers' convenience, in Fig. 8 we plot the functions $n(\omega) = n'(\omega) + in''(\omega)$ and $p(\omega) = p'(\omega) + ip''(\omega)$ for a Dynes superconductor, defined by Eq. (14). When frequency is measured in units of Δ , these functions depend on a single parameter: the pair-breaking rate Γ . Also shown in Fig. 8 are the real and imaginary parts of the function $\epsilon(\omega)$ defined by Eq. (3).

-
- ¹ P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959). It should be pointed out that Anderson's argument has its limitations: sufficiently strong nonmagnetic disorder can lead to a superconductor to insulator transition.
- ² A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP **12**, 1243 (1961).
- ³ R. C. Dynes, V. Narayanamurti, and J. P. Garno, Phys. Rev. Lett. **41**, 1509 (1978).
- ⁴ Y. Noat, V. Cherkez, C. Brun, T. Cren, C. Carbillat, F. Debontridder, K. Ilin, M. Siegel, A. Semenov, H.-W. Hbers, and D. Roditchev, Phys. Rev. B **88**, 014503 (2013).
- ⁵ P. Szabó, T. Samuely, V. Hašková, J. Kačmarčík, M. Žemlička, M. Grajcar, J. G. Rodrigo, and P. Samuely, Phys. Rev. B **93**, 014505 (2016).
- ⁶ F. Herman and R. Hlubina, Phys. Rev. B **94**, 144508 (2016).
- ⁷ F. Herman and R. Hlubina, Phys. Rev. B **95**, 094514 (2017).
- ⁸ T. Kondo, W. Malaeb, Y. Ishida, T. Sasagawa, H. Sakamoto, Tsunehiro Takeuchi, T. Tohyama, and S. Shin, Nat. Commun. **6**, 7699 (2015).
- ⁹ D. C. Mattis and J. Bardeen, Phys. Rev. **111**, 412 (1958).
- ¹⁰ S. B. Nam, Phys. Rev. **156**, 470 (1967).
- ¹¹ S. B. Nam, Phys. Rev. **156**, 487 (1967).
- ¹² J. P. Carbotte, E. Schachinger, and J. Hwang, Phys. Rev. B **71**, 054506 (2005).
- ¹³ C. J. J. Coumou, E. F. C. Driessen, J. Bueno, C. Chapelier, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **88**, 180505(R) (2013).
- ¹⁴ M. Žemlička, P. Nelinger, M. Trgala, M. Reháč, D. Manca, M. Grajcar, Phys. Rev. B **92**, 224506 (2015).
- ¹⁵ V. G. Kogan, R. Prozorov, and V. Mishra, Phys. Rev. B **88**, 224508 (2013).
- ¹⁶ Ya.V. Fominov, M. Houzet, and L.I. Glazman, PRB **84**, 224517 (2011).
- ¹⁷ M. Kharitonov, T. Proslir, A. Glatz, and M.J. Pellin, PRB **86**, 024514 (2012).
- ¹⁸ F. M. Marchetti and B. D. Simons, J. Phys. A **35**, 4201 (2002).
- ¹⁹ H. Shiba, Prog. Theor. Phys. **40**, 435 (1968).
- ²⁰ Julian Simmendinger, Uwe S. Pracht, Lena Daschke, Thomas Proslir, Jeffrey A. Klug, Martin Dressel, Marc Scheffler, Phys. Rev. B **94**, 064506 (2016).
- ²¹ F. Marsiglio and J. P. Carbotte, in *Superconductivity*, K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Eds., Vol. I, Springer, Berlin, 2008.
- ²² G. Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press, New York, 1980.
- ²³ V. Ambegaokar and L.P. Kadanoff, Nuovo Cimento **22**, 914 (1961).
- ²⁴ B. Velický, Phys. Rev. **184**, 614 (1969).
- ²⁵ R.J. Elliott, J. A. Krumhansl, and P.L. Leath, Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).
- ²⁶ W. Zimmermann, E. Brandt, M. Bauer, E. Seider, and L. Genzel, Physica C **183**, 99 (1991).
- ²⁷ R. A. Ferrell and R. E. Glover, Phys. Rev. **109**, 1398 (1958), M. Tinkham and R. A. Ferrell, Phys. Rev. Lett. **2**, 331 (1959).
- ²⁸ A. J. Berlinsky, C. Kallin, G. Rose, and A.-C. Shi, Phys. Rev. B **48**, 4074 (1993).
- ²⁹ A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1963).
- ³⁰ Yen-Hsiang Lin, J. Nelson, and A. M. Goldman, Physica C **514**, 130 (2015).
- ³¹ Bing Cheng, Liang Wu, N. J. Laurita, Harkirat Singh, Madhavi Chand, Pratap Raychaudhuri, N. P. Armitage, Phys. Rev. B **93**, 180511 (2016).
- ³² S. Casalbuoni, E.A. Knabbe, J. Kötzler, L. Lilje, L. von Sawilski, P. Schmüser, and B. Steffen, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A **538**, 45 (2005).
- ³³ T. Junginger, S. Calatroni, A. Sublet, G. Terenziani, T. Prokscha, Z. Salman, T. Proslir, J. Zasadzinski, preprint arXiv:1703.08635.

Záver

Keďže samotným výsledkom je venovaná prakticky celá dizertačná práca, v závere dáme priestor pre otázky, ktoré pri štúdiu vlastností teoretického modelu Dynesových supravodičov prirodzene vznikli a v budúcnosti sa im plánujeme venovať my, alebo môžu slúžiť ako podnety na prácu pre iných.

Začnem, z pohľadu autora tou najzaujímavejšou. Ako sme mali možnosť vidieť pri riešení rovníc v priblížení CPA v podkapitole venovanej práve tomuto formalizmu, potenciálové rozdelenia pre **NP** a **ZP rozptyly** vchádzajú do hry úplne iným spôsobom. Zatiaľ čo $P_s(U)$ môže byť úplne ľubovoľné, $P_m(V)$ je v prípade, ktorý vedie na Dynesovu formulu pre hustotu stavov, definované lorentziánom. Tento rozdiel, takisto ako pôvod $P_m(V)$ v spomínanej forme si samozrejme v budúcnosti žiadajú štúdium a vysvetlenie na mikroskopickú úroveň.

Ďalšia otázka, ktorá zrejme taktiež úzko súvisí s predchádzajúcim odstavcom, je v akých typoch materiálov a za akých okolností vidíme v experimente hustotu stavov, opísateľnú Dynesovou formulou. Podľa našich vedomostí takáto kategorizácia doposiaľ nebola urobená a pre ďalšie štúdium mikroskopického mechanizmu bude zrejme kľúčová.

Ďalší podnet na výskum sa dá nájsť v kapitole venovanej spektrálnym vlastnostiam, kde sme Dynesov supravodič navrhli ako alternatívny, vnútorne konzistentný model namiesto modelu prezentovaného v [10]. Autorov uvedenej práce zaujíma teplotná závislosť rozptylových konštánt popisujúcich NP a ZP rozptylové procesy v prípade vysokoteplotných supravodičov. Nakoľko autorom v uvedenej práci stačí v ich fitovacom algoritme zmeniť formuly popisujúce fyzikálny model, veríme, že výsledok tohto výskumu bude čoskoro k dispozícii.

Dynesov supravodič sa taktiež ukazuje ako vhodný kandidát pre štúdium tzv. Homesovho zákona [26], t.j. univerzálnej závislosti zlomku supravodivej časti koncentrácie elektrónov n_s/n od podielu T_c/Γ_n . Keďže táto téma v podstate nadväzuje na štúdium vodivosti prezentovanej v [H3], plánujeme sa jej venovať okamžite po dokončení dizertačnej práce.

Keďže na model Dynesovho supravodiča sa dá pozeráť aj ako na rozšírenie BCS teórie o vplyv NP a ZP rozptylových procesov do formúl pre funkciu energetickej medzery

$\Delta(\omega)$ a renormalizáciu vlnovej funkcie $Z(\omega)$, dá sa priamočiaro skúmať voľná energia Dynesových supravodičov, ako aj kritické polia H_{c1} a H_{c2} [27]. Zdôraznime, že toto štúdium tvorí prirodzenú "povinnú jazdu" experimentálnych predpovedí pre Dynesov supravodič. Rovnako sa dá pozeráť aj na predpoveď pre Ramanovu spektroskopiu.

Ďalšia veľmi zaujímavá otázka sa týka zovšeobecnenia modelu Dynesovho supravodiča. Pri obr. 4, spomenutom v úvode tejto práce nás mohlo spontánne napadnúť, či sa nedá pozrieť na prípad, kedy spin NP rozptylových nečistôt nie je nevyhnutne fixovaný v smere osi z , ale jeho orientácia je ľubovoľná. Táto otázka sa javí byť prirodzenejšia o to viac, ak si uvedomíme, že pôvodné počty uvažujúce riedky plyn magnetických nečistôt na úrovni T-matice [2] využívajú formalizmus matíc 4×4 , ktorý s takouto voľnosťou smeru spinu pracuje od začiatku.

Zaujímavá štúdia sa dá zrejme rozviesť aj ohľadom vplyvu externého magnetického poľa na optickú vodivosť Dynesovho supravodiča. Motivácia pre takúto štúdiu sa dá nájsť napr. v článku [28], ktorý sa zaoberá podobnou témou. V prípade takejto analýzy by sme zrejme nemuseli začínať úplne od nuly, nakoľko by sme s najväčšou pravdepodobnosťou mohli využiť výsledky z článku [H1], kde sme sa zaoberali vplyvom slabého externého magnetického poľa na hustotu stavov Dynesovho supravodiča.

Experimentálny význam štúdia Dynesových supravodičov sa dá nájsť aj v kontexte využitia supravodičov obsahujúcich nečistoty pri konštrukcii napr.: kvantových dvojhladinových systémov, t.j. kvantových bitov [29], detektorov kinetickej indukčnosti [30] alebo parametrických zosilňovačov [31]. Ukazuje sa napríklad, že pre zvýšenie kvality mikrovlnných rezonátorov je kľúčové porozumenie rozptylových procesov supravodivého materiálu z ktorého sú vyrobené, nakoľko tieto rozptylové procesy môžu viesť k potlačeniu strednej doby života kvázičastíc a tým pádom aj k zníženiu kvality takéhoto rezonátora [17].

Na úplný záver spomeňme predpoklady, ktoré teória Dynesových supravodičov síce prirodzene obsahuje, ale v rámci našich doterajších poznatkov zatiaľ nijako nedokazuje oprávnenosť ich použitia. Tak napríklad: polia popisujúce rozptylové procesy na NP nečistotách sú čisto klasické, bez akejkoľvek vnútornej dynamiky. Absencia tejto dynamiky vedie napríklad k ignorácii možnosti existencie Kondovho javu. Nakoniec, stále nám chýba explicitný dôkaz kladnej definitnosti reálnej časti vodivosti, podobný tomu, ktorý prezentujeme pre spektrálne funkcie v článku [H2]. Hoci sme tento dôkaz aspoň z časti nahradili numerickým testom na veľkej vzorke náhodne vybraných hodnôt parametrov v rámci relevantných intervalov, bolo by pekné túto vlastnosť nahliadnúť aj analyticky.

Dodatok A: Nambu-Gorkovov formalizmus

V tomto dodatku predstavíme Nambu-Gorkovov formalizmus ktorý využívame pri formulácii a následnom riešení CPA rovníc (H1-4) pre Dynesov supravodič. Výhoda tohto formalizmu spočíva v tom, že jednotným spôsobom dokáže popísať ako normálny, tak aj supravodivý stav kovu.

Najskôr definujeme stĺpcový vektor $\alpha_{\mathbf{k}}$ pozostávajúci z elektrónových anihilačných a kreačných operátorov. Spolu s ním uvedieme hermitovsky združený, riadkový $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$ a taktiež ich vzájomný antikomutačný vzťah:

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger = \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \quad c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right), \quad \left\{ \alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \right\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \tau_0. \quad (29)$$

V celom výklade v rámci dizertačnej práce pracujeme s Pauliho maticami, ktoré tvoria prirodzenú súčasť Nambu-Gorkovho formalizmu.

$$\tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (30)$$

Definujme teraz Nambuho elektrónovú Greenovu funkciu $G(\mathbf{k}, \tau)$, t.j. Greenovu funkciu pozostávajúcu z operátorov $\alpha_{\mathbf{k}}$ a $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$ a jej výsledná forma bude teda nadobúdať štruktúru matice 2×2 :

$$G(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T \alpha_{\mathbf{k}}(\tau) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = \begin{pmatrix} -\langle T c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle T c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\ -\langle T c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle T c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(\tau) c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Všimnime si, že diagonálne prvky $G(\mathbf{k}, \tau)$ zodpovedajú Greenovej funkcii normálneho kovu, zatiaľ čo nediagonálne prvky budú nenulové len pre supravodivý stav kovu, pretože ich štruktúra súvisí s parametrom usporiadania v supravodiči. Tieto prvky nazývame anomálnymi Greenovými funkciami¹².

Neinteragujúci systém

Keďže nás bude najskôr zaujímať časový vývoj vektorového operátora $\alpha_{\mathbf{k}}(\tau)$ pre neinteragujúci systém, je prirodzné pozrieť sa na štruktúru Hamiltoniánu \mathcal{H}_0 popisujúceho

¹²Ako prvý tieto prvky zaviedol a nazval anomálnymi Gorkov.

plyn voľných elektrónov:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) = \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_3 \alpha_{\mathbf{k}} + const. \quad (32)$$

Ak sa teraz sústredíme na Schrödingerovu rovnicu v Heisenbergovom obraze pre $\alpha_{\mathbf{k}}$:

$$\frac{d}{d\tau} \alpha_{\mathbf{k}}(\tau) = [\mathcal{H}_0, \alpha_{\mathbf{k}}(\tau)] = -\varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_3 \alpha_{\mathbf{k}}(\tau), \quad (33)$$

môžeme priamo napísať pohybovú rovnicu pre $G_0(\mathbf{k}, \omega)$:

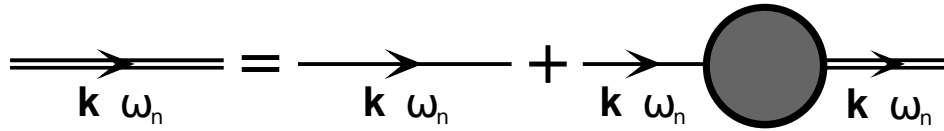
$$\left[\frac{d}{d\tau} + \varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_3 \right] G_0(\mathbf{k}, \tau) = -\delta(\tau) \tau_0. \quad (34)$$

Ak teraz použijeme štandardný postup s časovou Fourierovou transformáciou $G_0(\mathbf{k}, \tau) = \sum_{\omega} \hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n) e^{-i\omega_n \tau}$, dostaneme algebraickú rovnicu pre $\hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n)$ v tvare:

$$(i\omega_n \tau_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_3) \hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n) = \tau_0, \quad \text{s riešením:} \quad \hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{i\omega_n \tau_0 + \varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_3}{\omega_n^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}. \quad (35)$$

Interagujúci systém

Po tom ako sme našli tvar Greenovej funkcie pre plyn voľných elektrónov, prejdeme k popisu interagujúceho systému. Greenovu funkciu pre interagujúci systém vyjadríme prostredníctvom Dysonovho radu, zobrazeného na obr. 23.



Obr. 23: Dysonova rovnica pre elektrónový popagátor v reči Feynmanových diagramov.

Diagram zobrazený na obr. 23 sa dá samozrejme vyjadriť maticovou rovnicou:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n) + \hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n) \hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_n) \hat{G}(\mathbf{k}, \omega_n), \quad (36)$$

s riešením:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \left(i\omega_n \tau_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_3 - \hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_n) \right)^{-1}. \quad (37)$$

Zdôraznime, že funkcia vlastnej energie $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_n)$ je matica 2×2 a dá sa tak parametrizovať lineárnou superpozíciou Pauliho matíc uvedených v (30). Navyiac sa ukazuje, že vhodnou voľbou fázy supravodivého stavu si vystačíme len s maticami $\tau_{0,1,3}$. Vlastnú

energiu budeme teda parametrizovať v tvare:

$$\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_n) = (1 - Z(\mathbf{k}, \omega_n))i\omega_n\tau_0 + \Phi(\mathbf{k}, \omega_n)\tau_1 + \chi(\mathbf{k}, \omega_n)\tau_3. \quad (38)$$

Invertovaním matice v (37) získavame výraz pre plnú Greenovu funkciu v Nambuho-Gorkovom formalizme v tvare:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{Z(\mathbf{k}, \omega_n)i\omega_n\tau_0 + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi(\mathbf{k}, \omega_n))\tau_3 + \Phi(\mathbf{k}, \omega_n)\tau_1}{Z(\mathbf{k}, \omega_n)^2\omega_n^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi(\mathbf{k}, \omega_n))^2 + \Phi(\mathbf{k}, \omega_n)^2}. \quad (39)$$

V nasledujúcich úvahách budeme predpokladať nezávislosť premenných Z , χ a Φ od \mathbf{k} . Poznamenajme, že tento predpoklad je v súlade so štandardným správaním spomínaných premenných pre prípad s vlnových supravodičov, teda keď funkcia energetickej medzery nezávisí od \mathbf{k} . V ďalšom texte budeme pre tieto premenné používať označenie: $Z(\omega_n) = Z_n$, $\chi(\omega_n) = \chi_n$ a nakoniec $\Phi(\omega_n) = \Phi_n$.

V poslednej časti tohto dodatku spravíme výpočet hustoty tunelových stavov na imaginárnej osi presumovaním elektrónovej spektrálnej funkcie v \mathbf{k} priestore¹³:

$$\begin{aligned} N^i(\omega_n) &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} -\frac{1}{\pi} \hat{G}^{11}(\mathbf{k}, \omega_n) \\ &= \frac{N_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{Z_n i\omega_n + \varepsilon + \chi_n}{Z_n^2 \omega_n^2 + (\varepsilon + \chi_n)^2 + \Phi_n^2} \\ &= \frac{N_0}{\pi} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{Z_n i\omega_n}{Z_n^2 \omega_n^2 + (\varepsilon + \chi_n)^2 + \Phi_n^2}}_{I_1} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon + \chi_n}{Z_n^2 \omega_n^2 + (\varepsilon + \chi_n)^2 + \Phi_n^2}}_{I_2} \right]. \end{aligned} \quad (40)$$

Pripomeňme, že v druhom riadku (zatiaľ nedokončeného) odvodenia (40) pre hustotu tunelových stavov sme využili možnosť sumu cez \mathbf{k} prepísať cez integrál pomocou identity $1/\mathcal{V} \sum_{\mathbf{k}} = N_0 \int d\varepsilon \int d\Theta / (4\pi)$. Spoločne s touto identitou sme taktiež uvážili aj rotačnú invariantnosť študovaného systému. Keďže uvažovaný výpočet robíme pre všeobecný supravodič popísaný Greenovou funkciou (39), oplatí sa pozrieť separátne na členy I_1 a I_2 .

Integrál v I_2 môžeme vypočítať (pričom si samozrejme treba dať obzvlášť pozor na prípady keď $\text{Im } \chi_n \neq 0$):

$$I_2 = \left[\ln \left((\varepsilon + \chi_n)^2 + Z_n^2 \omega_n^2 + \Phi_n^2 \right) \right]_{-\infty}^{\infty} = 0, \quad (41)$$

¹³Celý výpočet budeme robiť na imaginárnej osi a k retardovanému jazyku sa vrátíme až na úplný záver prechodom na (lepšie povedané do infinitenzimálnej blízkosti nad) reálnu os, uvažujúc $i\omega_n \rightarrow \omega + i0$.

čo znamená, že môžeme prejsť k analýze výrazu I_1 . Ako môžeme vidieť, uvažovaný integrál je konvergentný a dá sa vykonať v komplexnej rovine využitím Cauchyho vety. Ak uvažujeme štandardné prípady, kedy sa rezíduum $\varepsilon = -\chi_n + i\sqrt{\Phi_n^2 + \omega_n^2 Z_n^2}$ nachádza v hornej polrovine komplexného priestoru, tak po vykonaní integrácie a využití definície funkcie energetickej medzery $\Phi_n = Z_n \Delta_n$ získavame:

$$I_1 = i\pi \frac{\sum_n \omega_n}{\sum_n \sqrt{\omega_n^2 + \Delta_n^2}}. \quad (42)$$

Tým pádom nám už nič nebráni v tom, aby sme tento výsledok uvážili v kontexte výpočtu (40) a napísali tak výsledný tvar pre merateľnú hustotu tunelových stavov $N(\omega)$, ktorú získame z imaginárnej časti po prechode na reálnu os:

$$N(\omega) = \text{Im } N^i(i\omega_n \rightarrow \omega + i0) = N_0 \text{Re} \left[\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta(\omega)^2}} \right]. \quad (43)$$

Na záver tohto dodatku si k odvodeniu hustoty tunelových stavov dovoľme pár komentárov. Všimnime si, že všeobecný supravodič popísaný Greenovou funkciou (39), vo všeobecnosti závisí od troch neznámych funkcií. Hustota tunelových stavov pre takýto supravodič (43) však vôbec nezávisí od $\chi(\omega)$ a $Z(\omega)$. Poznamenajme, že hustota tunelových stavov takýmto spôsobom stráca citlivosť nie len na vplyv ZP rozptylových procesov obsiahnutých v $Z(\omega)$, ale taktiež aj na časticovo-dierovú asymetriu, ktorá sa objaví v prípade $\chi(\omega) \neq 0$. Dobrým príkladom tejto vlastnosti je model skúmaný v [10], pre ktorý napriek uvažovanej časticovo-dierovej asymetrii výjde hustota tunelových stavov v tvare Dynesovej formuly [6]. Napriek tejto príťažlivej vlastnosti sa však ukáže, že skúmaný model má problém so sumačnými pravidlami [H2].

Na úplný záver poznamenajme, že merateľné veličiny, ktoré závisia od malého množstva neznámych (v našom prípade hustota stavov) hrajú vo fyzike vôbec veľmi dôležitú úlohu. Umožňujú sústredenie na štúdium veľmi špecifických vlastností (v našom prípade je to vplyv NP rozptylových procesov na funkciu energetickej medzery) bez vplyvu ostatných neznámych. Takto získaná informácia nám potom pomáha zorientovať sa v komplexnejšom kontexte skúmanej problematiky (v našom prípade je to vplyv oboch typov rozptylových procesov na supravodivé vlastnosti).

Feynmanove pravidlá v Nambuho-Gorkovovom formalizme

Ako sme si mohli všimnúť v predošlom odstavci, aj v tuhých látkach sa veľmi často používa jazyk Feynmanových diagramov. Tento jazyk pritom využijeme ešte raz v dodatku B pri výpočte funkcie odozvy, úzko súvisiacej s vodivosťou. Keďže Feynmanove diagramy idú ruka v ruke s Feynmanovými pravidlami, ktoré nám dávajú návod ako

tieto diagramy čítať a počítať, je prirodzené ich minimálne sformulovať. V tejto podkapitole si preto (bez odvodu¹⁴) predstavíme všeobecné Feynmanové pravidlá pre Nambuho-Gorkovov formalizmus.

- Čiarom v diagrame priradujeme štvorhybnosti v súlade so zákonmi zachovania vo vnútorných vrchoch, pričom sumujeme cez voľné štvorhybnosti a fonónové vetvy.
- Príspevok uzavretej slučky je daný stopou súčinu matíc, krát -1 .
- Poradie matíc v súčine je dané poradím im príslušných objektov na elektrónovej čiare v diagrame.

-
- (Tienenej) coulombovskej interakčnej čiare so štvorhybnosťou (\mathbf{q}, ω_n) prirad $-\frac{1}{V}V(\mathbf{q}, \omega_n) = -\frac{1}{V} \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{q}, \omega_n) q^2}$.
 - Fonónovej čiare pre vetvu s so štvorhybnosťou (\mathbf{q}, ω_n) prirad Greenovu funkciu zodpovedajúcu fonónovému propagátoru $\frac{1}{V} \hat{D}_0^s(\mathbf{q}, \omega_n)$.
 - Elektrónovej čiare so štvorhybnosťou (\mathbf{k}, ω_n) prirad maticovú Greenovu funkciu $\hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega)$.

-
- Coulombovskému vrcholu prirad τ_3 .
 - Elektrón-fonónovému vrcholu pre fonónovú vetvu s s vchádzajúcou elektrónovou hybnosťou \mathbf{k} a vychádzajúcou hybnosťou \mathbf{k}' prirad maticový element elektrón-fonónovej interakcie $g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^s \tau_3$.

¹⁴Odvodenie Feynmanových pravidiel väčšinou tvorí značnú časť štandardných kurzov zaoberajúcich sa oblasťou tuhých látok s využitím kvantovej teórie poľa.

Dodatok B: Teória lineárnej odozvy z rýchlika

Úloha, ktorú budeme v rámci tohto dodatku riešiť, sa dá formulovať takouto otázkou: "Ako sa zmení stredná hodnota veličiny M pod vplyvom slabej poruchy H' "? Ukážeme si, že odpoveď na túto otázku sa dá nájsť pomocou tzv. *Kubovej formuly*, t.j. formalizmu v rámci ktorého môžeme rátať funkcie odozvy v prítomnosti spomínanej poruchy.

Oporným bodom pre odvodenie Kubovej formuly je matica hustoty, v rámci ktorej opisujeme stav systému pomocou operátora $\hat{\rho} = \sum_{m,n} \rho_{mn} |m\rangle\langle n|$, splňujúcu podmienky:

$$\text{Tr } \hat{\rho} = 1, \quad \rho_{nn} \geq 0. \quad (44)$$

Strednú hodnotu operátora \hat{A} priradeného fyzikálnej veličine A potom dostaneme prostredníctvom:

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{A} \}. \quad (45)$$

Časový vývoj matice hustoty sa dá nájsť využitím časovej Schrödingerovej rovnice:

$$\begin{aligned} i\dot{\rho} &= \sum_{m,n} \rho_{mn} i \frac{\partial}{\partial t} (|m\rangle\langle n|) \\ &= \sum_{m,n} \rho_{mn} (H|m\rangle\langle n| - |m\rangle\langle n|H) \\ &= [H, \rho]. \end{aligned} \quad (46)$$

Po krátkom všeobecnom úvode prejdeme teraz priamo k štúdiu zmeny strednej hodnoty $\delta M(t)$ fyzikálnej veličiny $M(t)$ v systéme s hamiltoniánom H_0 pod vplyvom slabej poruchy¹⁵ v hamiltoniáne $H'(t)$. Za týmto účelom sa ukazuje byť výhodné prejsť k operátorom ktorých časový vývoj je definovaný v interakčnom obraze:

$$\tilde{A}(t) = e^{iH_0 t} A(t) e^{-iH_0 t}, \quad (47)$$

kde H_0 označuje časovo nezávislý hamiltonián neporušeného systému. Porovnaním $\dot{\tilde{\rho}}(t)$ a $\tilde{\rho}(t)$ sa dá nahliadnuť:

$$i\dot{\tilde{\rho}}(t) = [\tilde{H}'(t), \tilde{\rho}(t)], \quad (48)$$

čo znamená, že v interakčnom obraze je časový vývoj matice hustoty diktovaný poruchovou časťou hamiltoniánu v interakčnom obraze $\tilde{H}'(t)$. Uvažujme teraz rovnicu (48)

¹⁵Čo znamená, že sa v rámci poruchového rozvoja stačí obmedziť na lineárny člen v $H'(t)$.

v integrálnom jazyku:

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(t_0) - i \int_{t_0}^t dt' \left[\tilde{H}'(t'), \tilde{\rho}(t') \right]. \quad (49)$$

Ak sa ďalej obmedzíme na prvý rád poruchovej teórie matice hustoty vyjadrenej späť v Schrödingerovom obraze a zároveň si uvedomíme, že $\tilde{\rho}(t_0) = \rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-H_0/T}$ je matica hustoty kánonického súboru, dostávame:

$$\rho(t) = \rho_0 - i \int_{t_0}^t dt' e^{-iH_0 t'} \left[\tilde{H}'(t'), \rho_0 \right] e^{iH_0 t'}. \quad (50)$$

Nakoniec nám už nič nebráni vo vyjadrení odchylky $\langle \delta M(t) \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \delta M(t) \rangle &= \text{Tr} \{ M \rho(t) \} - \text{Tr} \{ M \rho_0 \} \\ &= \cancel{\langle M \rangle_0} - i \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \left\{ M e^{-iH_0 t'} \left[\tilde{H}'(t'), \rho_0 \right] e^{iH_0 t'} \right\} - \cancel{\langle M \rangle_0} \\ &= -i \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \left\{ \tilde{M}(t) \left[\tilde{H}'(t'), \rho_0 \right] \right\} \\ &= -i \int_{t_0}^t dt' \left\langle \left[\tilde{M}(t), \tilde{H}'(t') \right] \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (51)$$

Pripomeňme, že v treťom riadku odvodenia (51) pre Kubovu formulu sme využili invariantnosť stopy voči cyklickej zámene a zároveň sme zaviedli označenie pre stopu vzhľadom na rovnovážnu maticu hustoty $\langle A \rangle_0 = \text{Tr} \{ \rho_0 A \}$.

Sústredme sa teraz na prípady, kedy nás nezaujímajú prechodové javy pri zapínaní poruchy a uvažujme preto $t_0 \rightarrow -\infty$. Navyše, obvyklá štruktúra poruchy spočíva v súčine $H'(t) = a(t)B$, kde $a(t)$ je časovo závislé klasické pole, zatiaľčo B je časovo nezávislý operátor, charakterizujúci interakciu medzi klasickým polom a študovaným systémom. V takomto prípade môžeme pre (51) uvažovať:

$$\langle \delta M(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{G}_{MB}(t-t') a(t'), \quad (52)$$

kde sme zaviedli Greenovu funkciu $\mathcal{G}_{MB}(t)$ pomocou:

$$\mathcal{G}_{MB}(t) = -i \left\langle \left[\tilde{M}(t), B \right] \right\rangle_0 \theta(t), \quad (53)$$

kde $\theta(t)$ označuje Heavisidovu funkciu. Zdôraznime, že $\mathcal{G}_{MB}(t)$ vyjadruje funkciu odozvy veličiny popísanej operátorom M na veličinu, ktorej je priradený operátor B .

Dodatok C: Sumačné pravidlá

Motivovaní Greenovou funkciou, definovanou v predchádzajúcom dodatku prostredníctvom vzťahu (53), definujeme teraz tzv. *retardovanú Greenovu funkciu*:

$$G_R(t, t') = -i \left\langle \left[A(t), B(t') \right]_{\epsilon} \right\rangle \theta(t - t'), \quad (54)$$

kde $[X, Y]_{\epsilon} = XY + \epsilon YX$. Ak X a Y sú nepárnymi mocninami fermiónových kreačných a anihilačných operátorov¹⁶, tak berieme $\epsilon = +1$. Ak sú naopak operátory X , a Y vyjadrené prostredníctvom párnych mocnín kreačných a anihilačných operátorov¹⁷, potom berieme $\epsilon = -1$. Taktiež, narozdiel od predchádzajúcej kapitoly pracujeme s operátormi $A(t)$ a $B(t)$ v Heisenbergovom obraze:

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}, \quad (55)$$

kde H označuje kompletný hamiltonián. Posledný rozdiel tkvie v stredovaní:

$$\langle X \rangle = \text{Tr} \{ \rho X \}, \quad (56)$$

kde $\rho = \frac{1}{Z} e^{-H/T}$ zodpovedá matici hustoty rovnovážneho kanonického súboru. Podobne ako v predchádzajúcom dodatku môžeme aj teraz vďaka cyklickej zámene operátorov pod stopou nahliadnuť $G_R(t, t') = G_R(t' - t)$.

Nás bude v tejto časti zaujímať Fourierov obraz $G_R(t - t')$. Za týmto účelom sa ukáže výhodné definovať:

$$G(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{izt} G_R(t) = -i \int_0^{\infty} dt e^{izt} \left\langle \left[A(t), B(t') \right]_{\epsilon} \right\rangle. \quad (57)$$

Fourierovu transformáciu $\bar{G}_R(\omega)$ budeme definovať ako $\bar{G}_R(\omega) \equiv G(\omega + i0)$, kde infinitezimálna imaginárna časť zabezpečí konvergenciu integrálu v (57) a $\bar{G}(z)$ tak bude analytická v hornej polrovine komplexného priestoru.

Pre naše účely sa ukáže byť výhodné napísať Fourierov obraz retardovanej Greenovej funkcie cez tzv. spektrálnu reprezentáciu, pomocou spektrálnej funkcie $A(x)$, ako:

$$\bar{G}_R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{\omega + i0 - x}, \quad A(x) = (1 + \epsilon e^{-x/T}) \sum_{m,n} \frac{e^{-E_m/T}}{Z} A_{mn} B_{nm} \delta(x - E_n + E_m). \quad (58)$$

¹⁶Hovoríme, že X a Y sú fermiónové.

¹⁷Hovoríme, že X a Y sú bozónové.

Poznamenanajme, že v (58) sme využili vlastné stavy $|n\rangle$ hamiltoniánu H s vlastnými energiami E_n pri zápise maticových elementov $A_{mn} = \langle m|A|n\rangle$. Upozorníme na reálnosť spektrálnej funkcie v prípadoch kedy $B = A^\dagger$, nakoľko túto vlastnosť implicitne využívame v článku¹⁸ [H2].

Nuž a teraz nám už nič nebráni pomocou integrovania formuly pre spektrálnu funkciu zavedenú v (58) nahliadnuť sumačné pravidlá:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{1 + \epsilon e^{x/T}} = \langle AB \rangle, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx A(x) = \langle [A, B]_\epsilon \rangle. \quad (59)$$

¹⁸Kde pracujeme s kreačnými a anihilačnými elektrónovými operátormi.

Dodatok D: Prípady iných ako lorentzovských rozdelení

V rámci tohto dodatku sa vrátíme k riešeniu rovníc (6) pre $\Delta(\omega)$ a $Z(\omega)$ sformulovaných v rámci priblíženia CPA. V hlavnom texte práce sme sa zaoberali ich analytickým riešením v prípade, ak rozdelenie pravdepodobnosti $P_m(V)$, zodpovedajúce NP rozptylom má formu lorentzovského rozdelenia, pričom rozdelenie $P_s(U)$ môže byť ľubovoľné.

Ukazuje sa že v prípade keď uvážime iné rozdelenie pre $P_m(V)$ môžeme riešenie problému definovaného prostredníctvom rovnice (6) skúmať numericky, nakoľko sa jedná o veľmi dobre sformulovaný selfkonzistentný problém.

Oblasť numerického riešenia CPA rovníc v supravodivom stave pre rôzne formy pravdepodobnostného rozdelenia pre NP a ZP rozptyly, prípadne spojitého rozdelenia pre $\bar{\Delta}$, ponúka pomerne široký priestor na realizáciu. My upriamime pozornosť "len" na porovnanie efektu (troch) rôznych rozdelení na hustotu tunelových stavov v prípade, keď nie sú prítomné ZP rozptylové procesy.

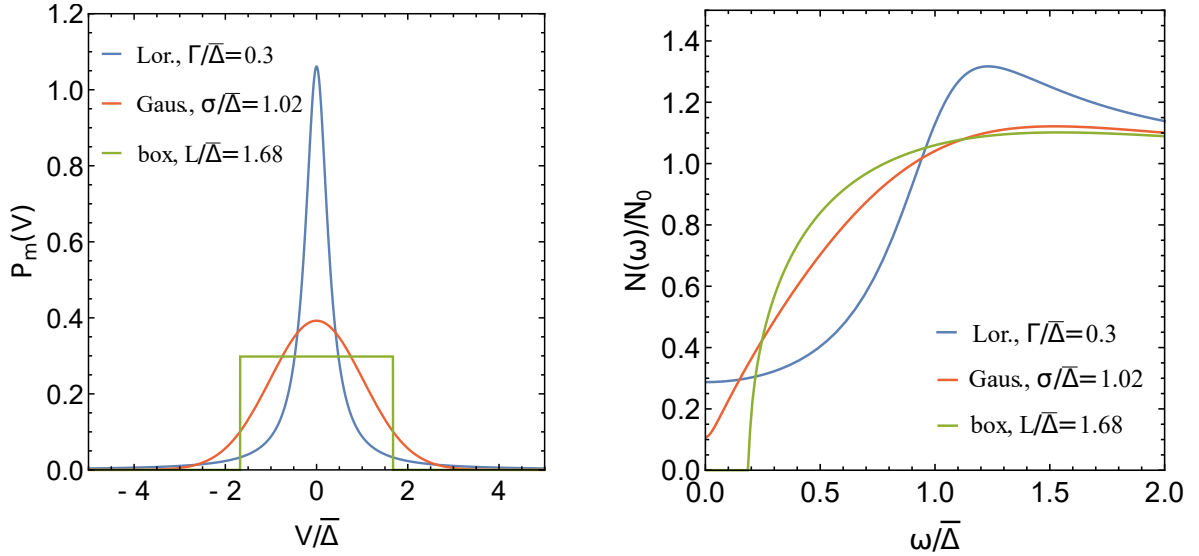
Dynesovu formulu pre tunelovú hustotu stavov budeme porovnávať s hustotami stavov, ktoré výjdu ako výsledok numerického riešenia CPA rovníc v prípadoch, keď $P_m(V)$ bude zodpovedať gaussovskému resp. rovnomernému rozdeleniu:

$$P_{Lor.}(V) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{V^2 + \Gamma^2}, \quad P_{Gaus.}(V) = \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{V}{\sigma}\right)^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}}, \quad P_{box}(V) = \begin{cases} \text{pre } |V| \leq L : & 1/(2L), \\ \text{pre } |V| > L : & 0. \end{cases} \quad (60)$$

Šírky rozdelení pritom budeme fixovať takým spôsobom, aby rozptylová konštanta v normálnom stave Γ_n bola rovnaká pre všetky uvažované rozdelenia. Podmienku pre hodnotu Γ_n sme formulovali prostredníctvom riešenia CPA rovníc v normálnom stave v [H1]:

$$\left\langle \frac{F_n}{F_n^2 + (\pi N_0 W)^2} \right\rangle_W = 1 \quad \text{kde:} \quad \Gamma_n = \frac{1 - F_n}{\pi N_0}.$$

Keďže riešenie získame pomocou štandardných numerických metód, prejdime priamo k výsledkom. Na obr. (24) prezentujeme ako samotné rozdelenia (vľavo), tak aj porovnávané hustoty stavov získané z numerického výpočtu (vpravo).



Obr. 24: Rozdelenia (vľavo) a hustoty tunelových stavov (vpravo) vchádzajúce do, resp. získané z numerického riešenia CPA rovníc. Poznamenajme, že vo všetkých prípadoch uvažujeme $N_0\bar{\Delta} = 0.1$.

Pri podrobnejšom skúmaní obr. (24) môžeme badať výrazný rozdiel medzi Dynesovou hustotou tunelových stavov a hustotami stavov zodpovedajúcim gaussovsky, alebo rovnomerne rozdeleným NP nečistotám napriek tomu, že hodnota rozptylovej konštanty je pre všetky rozdelenia fixovaná na rovnakej hodnote¹⁹ $\Gamma_n = 0.03N_0$.

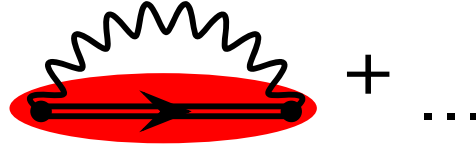
Tento efekt je však prirodzený, ak si uvedomíme rozdielny tvar jednotlivých rozdelení. Zaujímavé je tiež pozerať hodnotu tunelovej hustoty stavov priamo na Fermiho energii. Ako vidíme, najväčšiu hodnotu dosahuje lorentzovské rozdelenie vedúce k Dynesovej formule, potom je to Gaussovo rozdelenie a nakoniec rovnomerné rozdelenie (ktoré má dokonca stále konečnú energetickú medzeru). To zrejme súvisí s faktom, že lorentzovské rozdelenie je veľmi pomaly klesajúce (stredná kvadratická odchýlka dokonca diverguje), zatiaľ čo "chvosty" na vysokých energiách sú pre Gaussovo rozdelenie exponenciálne potlačené a pre rovnomerné rozdelenie sú nulové z definície.

¹⁹Poznamenajme, že je jednoduché nahliadnuť, že $\Gamma_n = \Gamma$.

Dodatok E: Riešenie CPA rovníc pre fluktuujúcu energetickú medzeru

Ako sme uviedli už v úvode práce, v tomto dodatku dáme priestor NP procesom, zachovávajúcim symetriu inverzie času. Príkladom takéhoto prípadu je uváženie fluktuujúcej energetickej medzery.

Predtým, ako prejdeme k riešeniu CPA rovníc v krátkosti nahliadneme rozdiel medzi ZP a NP procesmi v rámci Bornovho priblíženia (interakcia v najnižšom ráde interakčnej energie). Sústredíme sa pritom len na podstatu vecí, pričom na technické detaily sa odvoláme na [11].



Obr. 25: Príspevok do self-energie od elektrón-fonónovej interakcie. Podstatná časť (elektrónová Greenová funkcia spoločne s elektrón-fonónovými vertexmi) je podfarbená červenou farbou. Tri bodky predstavujú v prípade Bornovej aproximácie len jeden ďalší diagram (v prípade T-matice by ich bolo viac). Dôležité však je, že aj tieto ďalšie príspevky obsahujú spomínanú štruktúru, avšak s vertexami reprezentujúcimi inú ako elektrón-fonónovú interakciu.

Objektom nášho záujmu pritom bude štruktúra self-energie $\Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)$ podfarbená na obr. (25) červenou farbou, ktorá závisí od maticovej štruktúry lokálnej elektrónovej Greenovej funkcie znázornenej dvojčiarou²⁰:

$$\hat{G}_{loc}(\omega_n) = -\pi N_0 \frac{i\omega_n \tau_0 + \Delta_n \tau_1}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta_n^2}}, \quad (61)$$

a taktiež od maticovej štruktúry vertexov. Tá sa totiž líši (pozri (5)) v prípade magnetických prímiesi s vertexom $\sim \tau_0$, BCS párovania s vertexom $\sim \tau_1$ a skalárnych prímiesi s vertexom $\sim \tau_3$.

Nahliadnime teraz v rámci nášho kvalitatívneho argumentu štruktúru výsledku lokálnej Greenovej funkcie obalenej rôznymi druhmi vertexov:

$$\begin{aligned} \text{magnetické : } & \tau_0 (A\tau_0 + B\tau_1)\tau_0 = A\tau_0 + B\tau_1, \\ \text{BCS párovania : } & \tau_1 (A\tau_0 + B\tau_1)\tau_1 = A\tau_0 + B\tau_1, \\ \text{skalárne, el-fonón interakcia : } & \tau_3 (A\tau_0 + B\tau_1)\tau_3 = A\tau_0 - B\tau_1. \end{aligned} \quad (62)$$

V (62) si môžeme všimnúť dve veci. Prvá je, že vertex zodpovedajúci interakcii so

²⁰Podotknime, že s touto funkciou sme sa už stretli prostredníctvom [H1]-(B2).

skalárnou nečistotou má rovnakú maticovú štruktúru ako vertex pre plnú elektrón-fonónovú interakciu, takže takto obalené lokálne Greenové funkcie majú rovnakú (znamienkovú) štruktúru pre koeficienty A a B. Druhá vec je, že v prípade pre BCS párovanie, alebo pre magnetické rozptyly sa pri obalovaní vertexmi otočí znamienko pri koeficiente B a znamienková štruktúra je teda odlišná od prípadu elektrón-fonónovej interakcie. Tento rozdiel napokon spôsobí, že do rovnice pre Δ_n pochádzajúcej z porovnania self-energii vstúpia aj magnetické nečistoty, prípadne fluktuácie parametra usporiadania.

V tomto dodatku sme sa práve na vplyv fluktujúceho parametra usporiadania $\bar{\Delta}$ pozreli optikou priblíženia CPA. V prvom kole sa sústredíme na prípad, kedy máme prítomné len fluktuácie $\bar{\Delta}$, bez akýchkoľvek nečistôt. Ukáže sa, že výsledná CPA rovnica sa dá získať z rovnice (6) vypnutím magnetických a skalárnych nečistôt a zapnutím rozdelenia pre fluktujúcu energetickú medzeru $\bar{\Delta}$, ktoré uvažujeme v tvare lorentziánu:

$$\left\langle \frac{1}{z_n^* + \delta_n + \Lambda_n} \right\rangle_{\bar{\Delta}} = z_n, \quad \text{kde: } P_{\bar{\Delta}}(\bar{\Delta}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\bar{\Delta}}}{(\bar{\Delta} - \bar{\Delta}_0)^2 + \Gamma_{\bar{\Delta}}^2}, \quad (63)$$

s pomocnými premennými uvedenými²¹ v (7). Ukáže sa, že tento problém sa dá (v podstate rovnakou metódou ako v prípade magnetických nečistôt v [H1]) riešiť analyticky²² s výsledkom:

$$\Delta(\omega) = \bar{\Delta}_0 / \left(1 + \frac{i\Gamma_{\bar{\Delta}}}{\omega} \right), \quad Z(\omega) = \left(1 + \frac{i\Gamma_{\bar{\Delta}}}{\omega} \right). \quad (64)$$

Výsledok (64) pre $\Delta(\omega)$ aj v tomto prípade povedie na hustotu tunelových stavov v tvare Dynesovej formuly.

Samozrejme, tento výsledok je zaujímavé skúmať v kombinácii so zapnutými nečistotami. Začneme zapnutím magnetických nečistôt s lorentzovským rozdelením. V takom prípade riešime:

$$\left\langle \frac{1}{z_n^* + \delta_n + \Lambda_n} \right\rangle_{V, \bar{\Delta}} = z_n, \quad \text{kde: } P_{\bar{\Delta}}(\bar{\Delta}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\bar{\Delta}}}{(\bar{\Delta} - \bar{\Delta}_0)^2 + \Gamma_{\bar{\Delta}}^2}, \quad P(V) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{V^2 + \Gamma^2}. \quad (65)$$

Riešenie tohto problému sa dá²³ opäť nahliadnúť využitím Cauchyho vety a vedie na:

$$\Delta(\omega) = \bar{\Delta}_0 / \left(1 + i \frac{\Gamma + \Gamma_{\bar{\Delta}}}{\omega} \right), \quad Z(\omega) = \left(1 + i \frac{\Gamma + \Gamma_{\bar{\Delta}}}{\omega} \right). \quad (66)$$

Výsledok (66) je zaujímavý nie len tým, že opäť raz vedie na Dynesovu formulu pre

²¹Samozrejme uvažujúc $U = V = 0$

²²Pričom si treba dať pozor na podmienku (taktiež analogicky s [H1]) pre polohu jedného z pólov nad reálnou osou, ktorá sa však ukáže byť pre rozumné hodnoty $\bar{\Delta}_0$ a $\Gamma_{\bar{\Delta}}$ splnená.

²³Opäť, za predpokladu splnenia podmienok pre polohu pólov.

hustotu stavov, ale aj tým, že ukazuje ako sa dva rôzne NP procesy (rozptyly na magnetických nečistotách a fluktuácie energetickej medzery $\bar{\Delta}$) kombinujú najprirodzenejším možným spôsobom.

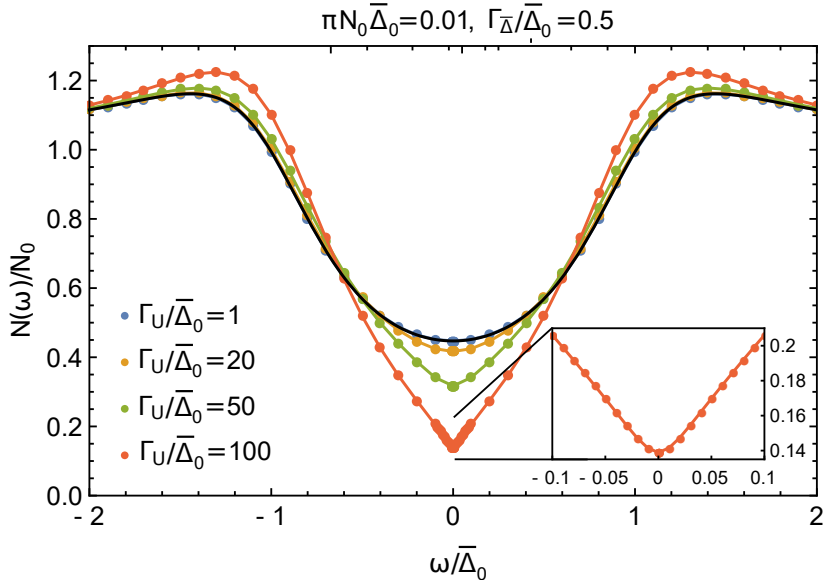
V tomto kontexte je taktiež zaujímavá otázka, čo sa stane ak zapneme nie magnetické, ale ZP nečistoty. Táto otázka je prirodzená, lebo skalárne prímеси budú v realistických experimentoch prítomné vždy a je dobré s ich vplyvom počítať. Skúmaný problém sa dá vyjadriť CPA rovnicou v tvare:

$$\left\langle \frac{z_n + \delta_n - \Lambda_n}{(z_n + \delta_n - \Lambda_n)(z_n^* + \delta_n + \Lambda_n) + (\pi N_0 U)^2} \right\rangle_{U, \bar{\Delta}} = z_n. \quad (67)$$

Ako vidíme, CPA rovnica je tentokrát náročnejšia ako v predošlých prípadoch a doposiaľ sa nám ju nepodarilo uspokojivo riešiť analyticky. Ako sme však videli v predchádzajúcom dodatku, CPA rovnicu je možné riešiť numericky ako selfkonzistentný problém. V našom prípade pri numerickom riešení uvažujeme rozdelenia:

$$P_U(U) = \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{U}{\Gamma_U}\right)^2}}{\sqrt{2\pi}\Gamma_U}, \quad P_{\bar{\Delta}}(\bar{\Delta}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\bar{\Delta}}}{(\bar{\Delta} - \bar{\Delta}_0)^2 + \Gamma_{\bar{\Delta}}^2}, \quad (68)$$

Výsledky numerického riešenia CPA rovníc sú zobrazené na obr. (26).



Obr. 26: Numerické riešenie CPA rovníc v prípade gaussovského rozdelenia ZP rozptylových nečistôt a lorentzovského rozdelenia pre $\bar{\Delta}$.

Všimnime si dve zaujímavé veci. Prvou je fakt, že v prípade nízkej hodnoty $\Gamma_U/\bar{\Delta}_0$ sa dá výsledok numerického riešenia popísať Dynesovou formulou uvažujúc $\Gamma = \Gamma_{\bar{\Delta}_0}$. Druhou je pozorovanie že zvyšovanie podielu $\Gamma_U/\bar{\Delta}_0$ pri fixovanej hodnote $\Gamma_{\bar{\Delta}_0}/\bar{\Delta}_0$ vedie k otváraniu energetickej medzery.

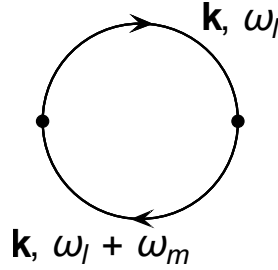
Na záver dodajme, že doposiaľ sme neštudovali najkomplexnejší prípad so zapnutými oboma typmi nečistôt spoločne s fluktuáciami energetickej medzery. Táto oblasť štúdia tak ostáva ako námet na prácu v budúcnosti.

Dodatok F: Výpočet optickej funkcie odozvy

V tomto dodatku sa vrátíme k odvodeniu vzťahu pre korelačnú funkciu $K(\omega)$, predstavenú vo vzťahu (H3-6 a 7):

$$K(\omega_m) = D_0 + \frac{e^2 v_F^2}{3} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} T \sum_{\omega_l} \text{Tr} \left[\hat{G}(\mathbf{k}, \omega_l + \omega_m) \hat{G}(\mathbf{k}, \omega_l) \right]. \quad (69)$$

Zatiaľ čo prvý člen D_0 zodpovedá konštantnému diamagnetickému príspevku, druhý popisuje paramagnetickú časť funkcie odozvy, citlivú na supravodivý stav a na vplyv nečistôt. Tento príspevok sa dá taktiež popísať bublinovým diagramom, zobrazeným na obr. 27.



Obr. 27: Diagram zodpovedajúci paramagnetickej časti funkcie odozvy.

Keďže študujeme materiály s guľatými Fermiho plochami, kde zanedbávame uhlovú závislosť \mathbf{k} , môžeme (69) zapísať v tvare:

$$K(\omega_m) = D_0 \left[1 + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon T \sum_l \text{Tr} \left\{ G(k, \omega_l + \omega_m) G(k, \omega_l) \right\} \right]. \quad (70)$$

Predtým, ako sa sústredíme na výpočet spomínaného diagramu, spomeňme si na spektrálnu reprezentáciu Greenovej funkcie, spoločne s užitočnou identitou pre sumu cez fermiónové frekvencie:

$$G(\omega_l) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(x)}{i\omega_l - x}, \quad \sum_{\omega_l} \frac{T}{(i\omega_l - x)(i(\omega_l + \omega_n) - y)} = \frac{f(x) - f(y)}{x - y + i\omega_n}. \quad (71)$$

Pripomeňme, že $f(x)$ označuje Fermi-Diracovo rozdelenie. Použitím (71) môžeme bublinový diagram v (70) formulovať priamo na reálnej osi v tvare:

$$\begin{aligned} & \bigcirc \stackrel{i\omega_m \rightarrow \omega + i0}{=} \frac{D_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \text{Tr} \left\{ A(k, x) (G_R(k, x + \omega + i0) + G_R(k, x - \omega - i0)) \right\} \\ & = -\frac{D_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \text{Tr} \left\{ (G_R(k, x) - G_R^*(k, x)) (G_R(k, x + \omega) + G_R^*(k, x - \omega)) \right\}, \end{aligned} \quad (72)$$

pričom sme v druhom riadku využili fakt, že spektrálna funkcia súvisí s imaginárnou časťou Greenovej funkcie spôsobom $A(\mathbf{k}, x) = -\text{Im} \{G_R(\mathbf{k}, x)\}/\pi$.

Vzhľadom na ďalšie počty sa ukazuje výhodné zaviesť pomocné premenné a pozorovať ich symetrie:

$$\begin{aligned} F_1(k, x, y) &\equiv \frac{\text{Tr}\{G_R(k, x)G_R(k, y)\}}{2\pi i}, & F_1(k, y, x) &= F_1(k, x, y), \\ F_2(k, x, y) &\equiv \frac{\text{Tr}\{G_R^*(k, x)G_R^*(k, y)\}}{2\pi i}, & F_2(k, y, x) &= F_2(k, x, y) = -F_1^*(k, x, y), \\ F_3(k, x, y) &\equiv \frac{\text{Tr}\{G_R(k, x)G_R^*(k, y)\}}{2\pi i}, & F_3(k, x, y) &= -F_3^*(k, y, x). \end{aligned} \quad (73)$$

Využitím (73) a súčasným posunutím integračnej premennej $x \rightarrow x + \omega$ v členoch s $x - \omega$ vieme bublinový diagram vyjadriť v tvare:

$$\begin{aligned} \bigcirc &= -\frac{D_0}{2} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx (f(x + \omega) + f(x)) \text{Re} \{F_1(k, x, x + \omega)\}}_{\text{člen A}} \right. \\ &\quad - i \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx (f(x + \omega) - f(x)) \text{Im} \{F_1(k, x, x + \omega)\}}_{\text{člen B}} \\ &\quad \left. + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx (f(x + \omega) - f(x)) F_3(k, x + \omega, x)}_{\text{člen C}} \right]. \quad (74) \end{aligned}$$

Teraz sa sústredíme na výpočet členy C zo (74). Ako sa ukazuje, vďaka rozdielu Fermi-Diracových rozdelení, nenarážame v tomto člene na problém s rovnomernou konvergenciou a môžeme tak uvažovať zámenu poradia integrálov $\int d\varepsilon \int dx \dots \rightarrow \int dx \int d\varepsilon \dots$. Vnútna integrácia cez premennú ε sa s využitím (73) a (H3-8) dá urobiť analyticky a vedie k výsledku:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon F_3(k, x + \omega, x) = \frac{1 + n(x + \omega)n(x)^* + p(x + \omega)p(x)^*}{\varepsilon(x + \omega) - \varepsilon(x)^*} \equiv -2H_1(x + \omega, x). \quad (75)$$

Analogickým postupom sa vieme dopracovať aj k výsledku pre integrál cez ε v člene B:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \text{Im} \{F_1(k, x, x + \omega)\} = \text{Im} \left[\frac{1 - n(x)n(x + \omega) - p(x)p(x + \omega)}{\varepsilon(x) + \varepsilon(x + \omega)} \right] \equiv 2H_2''(x, x + \omega) \quad (76)$$

Vylučovacou metódou sme sa dostali až k najproblematickejšiemu *člene A*. Kvôli súčtu Fermi-Diracových rozdelení narážame na problém s rovnomernou konvergenciou pri spomínanej zámene integrálov. Spomínaný súčet totiž dovolí prežiť aj nenulovým príspevkom pre $x \rightarrow -\infty$. Riešenie tohto problému spočíva v odčítaní a pričítaní integrálov cez funkciu $F_1(k, x, y)$ v normálnom stave ($\Gamma_N = \Gamma_s + \Gamma$). Odčítanie normálneho príspevku v *člene A* zabezpečí slušné správanie podintegrálnej funkcie pre $x \rightarrow -\infty$, umožní nám tak zameniť poradie integrálov a integráciu cez ε dokončiť analyticky:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \operatorname{Re} \left[F_1(k, x, x + \omega) - F_{1,N}(k, x, x + \omega) \right] = \operatorname{Re} \left[\frac{1 - n(x)n(x + \omega) - p(x)p(x + \omega)}{\varepsilon(x) + \varepsilon(x + \omega)} \right] \equiv 2H_2'(x, x + \omega). \quad (77)$$

Nakoniec výpočtu sa podme pozrieť na *člen A* vyjadrený v normálnom stave, ktorý nám zostal ako pozostatok z predchádzajúcej (rekonvergenčnej) procedúry:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx (f(x + \omega) + f(x)) \operatorname{Re} \{ F_{1,N}(k, x, x + \omega) \} = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \operatorname{Tr} \left[G_{R,N}(k, x) (G_{R,N}(k, x - \omega) + G_{R,N}(k, x + \omega)) \right] \right\} = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) (P(x - \varepsilon) + P(x + \varepsilon)), \quad \text{kde: } P(u) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{(u + i\Gamma_n)^2 - \omega^2} \right]. \end{aligned} \quad (78)$$

V poslednom riadku (78) sa ukazuje výhodné rozdeliť problém prostredníctvom identity $f(x) \equiv f_0(x) + \delta f(x)$, kde $\delta f(x)$ popisuje odchýlku Fermi-Diracovho rozdelenia pri konečnej teplote od prípadu nulovej teploty, popísanej štandardnou schodovou funkciou $f_0(x)$. Pre (78) tak získavame:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx (f_0(x) + \delta f(x)) (P(x - \varepsilon) + P(x + \varepsilon)) = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^0 dx (P(x - \varepsilon) + P(x + \varepsilon)) + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta f(x) (P(x - \varepsilon) + P(x + \varepsilon))}_0 = \\ & = \frac{1}{\pi\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[\arctan \left(\frac{\varepsilon + \omega}{\Gamma_N} \right) - \arctan \left(\frac{\varepsilon - \omega}{\Gamma_N} \right) \right] = 2. \end{aligned} \quad (79)$$

Upozorníme, že v druhom člene v druhom riadku sme opäť využili fakt, že správanie

$\delta f(x)$ v limite $|x| \rightarrow \infty$ nás oprávnňuje zameniť poradie integrálov a vykonať integráciu cez premennú ε v komplexnej rovine pomocou reziduovej vety.

Všimnime si, že výsledok (79) zodpovedajúci príspevku z preintegrovaného pričítaného člena (vyjadreného v normálnom stave) sa v (69) (po uvážení (74)) akurát vyruší s konštantným diamagnetickým príspevkom.

Ak spojíme doterajšie úvahy, dostaneme vyjadrenie pre funkciu odozvy v normálnom stave v tvare:

$$K(\omega) = -D_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[(f(x) + f(x + \omega)) H_2'(x, x + \omega) - (f(x + \omega) - f(x)) (H_1(x + \omega, x) + i H_2''(x, x + \omega)) \right]. \quad (80)$$

I keď je forma (80) už hotová na numerické integrovanie, ukazuje sa byť výhodné využiť zdedené symetrie pomocných funkcií $H_1(x, y)$ a $H_2(x, y)$ zo vzťahov zavedených v (73). Najskôr využijeme symetriu $H_1(x, y) = -H_1^*(y, x)$ a taktiež pričítame a odčítame člen $\int_{-\infty}^{\infty} dx (f(x + \omega) - f(x)) H_2'(x, x + \omega)$, čo nás vedie k vyjadreniu funkcie odozvy v tvare:

$$\begin{aligned} K(\omega) &= -D_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[2f(x) H_2'(x, x + \omega) + (f(x + \omega) - f(x)) (H_1^*(x, x + \omega) + H_2^*(x, x + \omega)) \right] \\ &= D_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[-2f(x) H_2'(x, x + \omega) + (f(x + \omega) - f(x)) H(x + \omega, x) \right]. \quad (81) \end{aligned}$$

V druhom riadku sme využili symetriu $H_2(x, y) = H_2(y, x)$ v prvom člene a druhý člen sme upravili najskôr prostredníctvom substitúcie $x \rightarrow -x - \omega$ a následne využitím symetrie $H^*(-x, -y) = -H(x, y)$, kde $H(x, y) = H_1(x, y) + H_2(x, y)$.

Pri konečnej trpezlivosti sa pomocou podobného narábania so spomínanými symetriami dá dospieť k výslednému vzťahu pre vodivosť (H3-6) vo výslednej forme (H3-9,10,11).

Zoznam publikácií

- [H1] F. Herman and R. Hlubina,
Microscopic interpretation of the Dynes formula for the tunneling density of states,
Phys. Rev. B **94**, 144508 (2016), preprint arXiv:1606.02983.
- [H2] F. Herman and R. Hlubina,
Consistent two-lifetime model for spectral functions of superconductors,
Phys. Rev. B **95**, 094514 (2017), preprint arXiv:1701.04430.
- [H3] F. Herman and R. Hlubina,
Electromagnetic properties of impure superconductors with pair-breaking processes,
poslané do PRB, preprint arXiv:1705.04674.

Zoznam konferenčných príspevkov

- Konferencia: *Week of Doctoral Students*,
Praha, Česká republika, 6 jún 2016, prezentácia
- Konferencia: *16th Czech and Slovak Conference on Magnetism 2016*,
Košice, Slovenská republika, 13 - 16 jún 2016, poster
- Konferencia: *Correlations & Coherence at Different Scales*,
Ustron, Poľsko, 4 - 9 september 2016, poster
- Jesenná škola: *Quantum Materials: Experiments and Theory*,
Jülich, Nemecko, 12 - 16 september 2016, poster
- Konferencia: *GRC, Novel Trends in Superconductivity of Correlated Electrons*,
Waterville Valley, USA, 4 - 9 jún 2017, poster

Bibliografia

- [1] P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959).
- [2] H. Shiba, Prog. Theor. Phys. **40**, 435 (1968).
- [3] P. Szabó et al., Phys. Rev. B **93**, 014505 (2016).
- [4] Alice E. White, R. C. Dynes, and J. P. Garno, Phys. Rev. B **33**, 3549(R) (1986).
- [5] D. Sherman et al., Nat. Phys. **11**, 188 (2015).
- [6] R. C. Dynes, V. Narayanamurti, and J. P. Garno, Phys. Rev. Lett. **41**, 1509 (1978). V (15) treba uvažovať koreň odmocniny s kladnou imaginárnou časťou.
- [7] Y. Noat et al., Phys. Rev. B **88**, 014503 (2013).
- [8] S. Casalbuoni et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A **538**, 45 (2005).
- [9] T. Junginger et al., preprint arXiv:1703.08635.
- [10] T. Kondo et al., Nat. Commun. **6**, 7699 (2015).
- [11] L. Kopnický, Diplomová práca, FMFI UK, (2016)
- [12] P. Soven, Phys. Rev. **156**, 809 (1967).
- [13] B. Velický, S. Kirkpatrick, and H. Ehrenreich, Phys. Rev. **175**, 747 (1968).
- [14] A. Weinkauff and J. Zittartz, J. Low Temp. Phys. **18**, 229 (1975).
- [15] P. J. Lloyd, J. Phys. C **2**, 1717 (1969).
- [16] M. Hashimoto et al., Nat. Phys. **10**, 483 (2014).
- [17] M. Žemlička et al., Phys. Rev. B **92**, 224506 (2015).
- [18] S. B. Nam, Phys. Rev. **156**, 470 (1967).
- [19] J. P. Carbotte, E. Schachinger, and J. Hwang, Phys. Rev. B **71**, 054506 (2005).
- [20] F. Marsiglio and J. P. Carbotte, in *Superconductivity*, K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Eds., Vol. I, Springer, Berlin, 2008, p. 73.
- [21] G. Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press, New York, 1980.
- [22] J. Simmendinger et al., Phys. Rev. B **94**, 064506 (2016).
- [23] D. C. Mattis and J. Bardeen, Phys. Rev. **111**, 412 (1958).
- [24] B. Cheng et al., Phys. Rev. B **93**, 180511(R) (2016).
- [25] D. Sherman et al., Nat. Phys. **11**, 188-192 (2015).
- [26] C. C. Homes et al., Nature (London) **430**, 539 (2004).

- [27] J. Bardeen and M. Stephen, Phys. Rev. **136** A1485 (1964).
- [28] Xi et al., PRL **105**, 257006 (2010).
- [29] O. V. Astafiev et al., Nature (London) **484**, 355 (2012).
- [30] B. A. Mazin, AIP Conference Proceedings **1185**, 135 (2009).
- [31] B. H. Eom, Nat. Phys. **8**, 623-627 (2012)