

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи



М.М. Коршунов

**Исследование связи магнетизма и необычной
сверхпроводимости в многоорбитальных моделях
слоистых соединений переходных металлов**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Научный консультант

д. ф.-м. н., проф.

С.Г. Овчинников

Красноярск – 2014

Содержание

Введение	5
Глава 1. Обзор литературы	17
1.1. Купраты	17
1.2. Кобальтиты Na_xCoO_2	38
1.3. Соединения железа: пниктиды и халькогениды	49
Глава 2. Зависящая от допирования зонная структура купратов в эффективной $t - t' - t'' - J^*$ модели и фазовые переходы с изменением поверхности Ферми	68
2.1. Параметры моделей	69
2.2. Формулировка эффективных моделей и приближений	74
2.3. Результаты для р-типа купратов	80
2.4. Результаты для n-типа купратов	86
2.5. Ферми-поверхность в $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$	88
2.6. Обсуждение	91
2.7. Заключение	95
Глава 3. Эволюция магнитного отклика с допированием в кобальтитах $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$	96
3.1. Эффективная модель сильной связи	97
3.2. Магнитная восприимчивость в нормальной фазе	102
3.3. Влияние сильных электронных корреляций на зонную структуру	105
3.4. Магнитный отклик в $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$	112
3.5. Обсуждение	116
3.6. Заключение	119
Глава 4. Спиновая восприимчивость в сверхпроводящей фазе ко-	

бальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$	121
4.1. Модель a_{1g} -зоны	122
4.2. Модель t_{2g} -зон	128
4.3. Заключение	134
Глава 5. Спин-резонансный пик в неупругом рассеянии нейтронов в соединениях железа	135
5.1. Магнитные возбуждения в четырёхзонной модели	136
5.2. Несоизмеримые антиферромагнитные возбуждения и спиновый резонанс в сверхпроводнике $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$	144
5.3. Спиновый резонанс в многоорбитальной модели	149
5.4. Обсуждение	154
5.5. Заключение	157
Глава 6. Магнитное состояние и его эволюция с допированием в пниктидах	158
6.1. Эволюция магнитного отклика с допированием	158
6.2. Температурная зависимость Δ_{SDW}	160
6.3. Скорость спин-решёточной релаксации и однородная магнитная восприимчивость	163
6.4. Заключение	165
Глава 7. Линейная температурная зависимость спиновой восприимчивости в соединениях железа	166
7.1. Теория	168
7.2. Сравнение с экспериментальными данными	176
7.3. Заключение	177
Глава 8. Анизотропия времени жизни квазичастиц в пятиорбитальной модели пниктидов	178

8.1. Модель	180
8.2. Метод	182
8.3. Собственно-энергетическая часть	186
8.4. Сравнение с экспериментальными данными	190
8.5. Заключение	197
Глава 9. Влияние примесей на сверхпроводящие свойства соединений железа	199
9.1. Вызванный немагнитными примесями переход из $s_{\pm}$ - в s_{++} -состояние в двухзонном сверхпроводнике	201
9.2. Скорость спин-решётчной релаксации $1/T_1T$ в ЯМР	209
9.3. Магнитный беспорядок в многозонных сверхпроводниках	213
9.4. Заключение	223
Глава 10. Сверхпроводящее спаривание в соединениях железа в приближении главных угловых гармоник	225
10.1. Спин-флуктуационная теория сверхпроводящего спаривания	231
10.2. Формализм ЛАНА	235
10.3. Влияние $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ на структуру параметра порядка	249
10.4. Зависимость от допирования и передопированные системы	258
10.5. Симметрия щели в KFe_2As_2 и гармоники $\cos 4\theta$ в LiFeAs	265
10.6. Обсуждение	278
10.7. Заключение	283
Заключение	284
Благодарности	288
Литература	289

Введение

Актуальность темы исследования. Интерес к физике твёрдого тела или, если рассматривать более широкий круг явлений, физике конденсированного состояния, связан не только (и не столько) с прикладным её значением, которое неопределимо в современном мире высоких технологий опирающихся на функциональные и нано-материалы, но и с фундаментальными проблемами, возникающими в процессе исследования различных материалов. Отдельным классом можно выделить соединения переходных металлов, которые проявляют целый спектр необычных свойств. Среди них и высокотемпературная сверхпроводимость в соединениях оксидов меди - купратах, и гигантское магнитосопротивление в манганитах, и большая величина термоэдс в слоистых кобальтитах, и необычная сверхпроводимость в соединениях железа - пниктидах и халькогенидах. Далее мы сфокусируемся на соединениях, проявляющих необычную сверхпроводимость - сверхпроводимость с нетривиальным (не-БКШ-типа) куперовским спариванием - купратах, кобальтитах и соединениях железа.

Высокотемпературные сверхпроводящие купраты, открытые более 20 лет назад, представляют загадку для современной физики твёрдого тела. Причина не только в необычной сверхпроводимости, но и в наблюдаемом изменении физических свойств при допировании. Между пределами недопированного антиферромагнитного (АФМ) диэлектрика и коррелированного Ферми-жидкостного металла система показывает сильно-коррелированное или, так называемое, “псевдощелевое” металлическое поведение до оптимального допирования $x_{opt} \approx 0.16$, соответствующего максимуму T_c на фазовой диаграмме купратов. В то время как в дырочно-допированных купратах, таких как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_2$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$, дальний Неелевский порядок исчезает до того, как возникает сверхпроводимость, в электронно-допированных соединениях, таких как $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_2$ и $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_2$, существуют указания на сосуществование сверхпроводимости и магнетизма. С теоретической точки зрения описание крос-

совера между практически локализованной картиной и режимом Ферми-жидкости очень сложен. Описание такого кроссовера является важной и актуальной задачей.

Богатая фазовая диаграмма кобальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$, имеющих в своей основе треугольную решётку Co, также привлекает внимание исследователей. Она включает несколько конкурирующих электронных фаз, на которые существенное влияние оказывает как дефицит ионов натрия x , так и степень гидрирования y . Помимо необычного сверхпроводящего состояния, возникающего при интеркаливании водой, в ней присутствуют состояния с магнитным и зарядовым упорядочением, а также несколько структурно различных фаз. Исследования с помощью мюонного и нейтронного рассеяний показали, что магнитная фаза при больших x соответствует дальнему АФМ порядку A -типа, т.е. спины Co в плоскости упорядочены ферромагнитно, а обмен вдоль оси c - антиферромагнитный. Примечательно, что в этой же области концентраций наблюдается аномально высокая термоэдс. Актуальными являются задачи исследования природы магнетизма, связи сверхпроводимости и магнитных возбуждений и исследования роли гидрирования.

Открытые в 2008 г. соединения железа с T_c до 55K в $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ стоят на втором месте после купратов и на 15K выше MgB_2 . Базовым элементом в обоих классах, в пниктидах и халькогенидах, является квадратная решётка Fe. В первом классе железо находится в тетраэдрическом окружении As или P, во втором - Se, Te или S. В отличие от купратов, многозонную электронную структуру которых из-за существенно доминирующего вклада плоскостной $d_{x^2-y^2}$ -орбитали, в принципе, можно описывать в эффективной низкоэнергетической однозонной модели, в соединениях железа, помимо существенного перекрытия между d -орбиталями, внеплоскостной As сильно гибридизуется с t_{2g} -набором d -орбиталей Fe и они все дают вклад в Ферми-поверхность. Минимальная модель в таком случае существенно многозонна и это делает соединения железа в этом вопросе больше похожими, скорее, на рутенаты, чем на куп-

раты. На первый взгляд фазовые диаграммы купратов и соединений железа подобны и заманчиво было бы заключить, что эти два класса сверхпроводящих материалов демонстрируют похожее поведение, но имеют место существенные отличия: 1) недопированные купраты являются моттовскими диэлектриками, а соединения железа - металлами, 2) в отличие от купратов, соединения железа не проявляют устойчивого псевдощелевого поведения в своих свойствах, 3) характерная особенность соединений железа по сравнению с купратами состоит в качественном, а иногда даже и количественном, согласии измеряемой в фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES, Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy) и с помощью квантовых осцилляций Ферми-поверхности с вычисленной первопринципными методами. Поскольку соединения железа были открыты относительно недавно, для них возникло множество актуальных задач качественного уровня: выяснение симметрии параметра порядка сверхпроводящего состояния, природы сверхпроводимости и её связи с магнетизмом, влияния примесей, исследование роли зонной структуры и магнитных возбуждений в транспортных свойствах, изучение магнитного состояния.

Во всех упомянутых классах сверхпроводников, купратах и слоистых кобальтитах и соединениях железа, остаются неясными многие моменты. В данной работе представлены шаги в направлении выяснения роли магнитных возбуждений в формировании нормальной и сверхпроводящей фаз.

Степень разработанности темы исследования. Для купратов накоплено грандиозное количество экспериментального материала и предложено множество теорий. Так, например, установлено, что сверхпроводящее состояние характеризуется d -симметрией. Однако, благодаря бурному развитию экспериментальных технологий, прогресс не остановился и каждый год возникают новые факты. Из различных теорий, которые опираются на первопринципные расчёты в приближении локальной плотности (local density approximation, LDA), можно выделить динамическую теорию среднего поля (Dynamical Mean-Field Theory, DMFT), которая, однако, точна только в пределе бесконечной размер-

ности решётки что для такой квазидвумерной системы, как купраты, не является хорошим пределом, поскольку магнитные флуктуации на малых расстояниях исключены. Одним из перспективных подходов является метод LDA+GTB (Local Density Approximation + Generalized Tight-Binding, т.е. приближение локальной плотности + обобщённый метод сильной связи), на основе которого можно получить многозонную модель Хаббарда с параметрами, вычисленными из первых принципов.

Ситуация со слоистыми кобальтитами и соединениями железа другая. Они были открыты относительно недавно и даже однозначные ответы на такие качественные вопросы, как симметрия параметра порядка, ещё не получены. Более того, симметрия и структура параметра порядка в соединениях железа меняется от материала к материалу. Тем не менее, как будет указано в данной работе, весьма вероятно, что причина сверхпроводящего взаимодействия в обеих системах фундаментально подобна и обусловлена магнитными взаимодействиями, хотя такие существенные детали, как симметрия спаривания и структура щели, в соединениях железа зависят от геометрии Ферми-поверхности, орбитального характера зон и уровня корреляций.

Цели и задачи диссертационной работы: Основной целью работы является исследование взаимосвязи магнетизма и сверхпроводимости в таких соединениях переходных металлов, как кобальтиты, купраты, пниктиды и халькогениды. Для достижения поставленных целей было необходимо решить следующие задачи:

1. Для ВТСП купратов p- и n-типа с помощью метода LDA+GTB определить параметры низкоэнергетических эффективных моделей. В этих моделях в режиме сильных корреляций в обобщённом приближении среднего поля, учитывающем рассеяние на спиновых флуктуациях за пределами расщепления Хаббард-1, получить зависимости зонной структуры и Ферми-поверхности от допирования.

2. Построить эффективную модель кобальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$, исследо-

вать эволюцию магнитного отклика с допированием и проанализировать влияние сильных электронных корреляций. Проанализировать связь магнетизма коллективизированных электронов и изменения топологии Ферми-поверхности с допированием.

3. Исследовать влияние симметрии сверхпроводящей щели и электронной структуры на динамическую спиновую восприимчивость в слоистом кобальтите $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. Выделить доминирующий вклад в магнитный отклик в нормальном состоянии и выяснить, каково влияние e'_g -карманов. Получить спиновый отклик в сверхпроводящем состоянии для различных типов симметрии параметра порядка и сравнить результаты с экспериментальными данными.

4. В многозонной модели сверхпроводников на основе железа получить спиновый отклик в состояниях с $s_{\pm}$ -, s_{++} - и d -симметриями параметра порядка. Исследовать импульсную зависимость спин-резонансного пика. Сравнить результаты расчётов с результатами неупругого рассеяния нейтронов в $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$.

5. Используя теорию магнетизма коллективизированных электронов описать магнитные свойства LaFeAsO . Вычислить температурную зависимость параметра порядка состояния волны спиновой плотности и из её величины при нулевой температуре получить магнитный момент. Исследовать зависимость температуры Нееля от допирования в пниктидах $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$. Выяснить, какова зависимость от допирования мнимой части спиновой восприимчивости на антиферромагнитном волновом векторе, обратно пропорциональной времени спин-решёточной релаксации T_1T .

6. В двухзонной модели пниктидов исследовать температурную зависимость однородной спиновой восприимчивости и выяснить причины её линейного возрастания с температурой. Исследовать, является ли такое поведение универсальным для Ферми-жидкости с сильными флуктуациями волны спиновой плотности и выяснить, чем определяется наклон линейной температурной зависимости.

7. Рассмотреть неупругое динамическое рассеяние квазичастиц на спино-

вых и зарядовых флуктуациях в пятиорбитальной модели с локальным кулоновским взаимодействием для соединений железа. Получить массовый оператор с помощью диаграмм второго порядка с поляризационным оператором в приближении случайных фаз и выявить факторы, которые могут дать сильную анизотропию рассеяния. Объяснить различие между транспортными свойствами электронов и дырок и сравнить с наблюдаемыми зависимостями постоянной Холла и проводимости от допирования в пниктидах.

8. Исследовать зависимость критической температуры T_c от параметра рассеяния на немагнитных и магнитных примесях в двухзонной модели пниктидов. Выяснить, в каком случае T_c будет подавляться, а в каком - оставаться конечной и практически не зависящей от параметра рассеяния на примесях в состояниях с $s_{\pm}$ - и s_{++} -симметриями параметра порядка.

9. На основе спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания и приближения главных угловых гармоник описать сверхпроводящую фазовую диаграмма соединений железа и выяснить, какое именно взаимодействие на Ферми-поверхности доминирует при различных уровнях допирования. Исследовать, какая симметрия будет доминировать при сильном допировании электронами, когда дырочные карманы пропадают, и при сильном допировании дырками, когда остаются только дырочные карманы.

Научная новизна.

1. Определены параметры низкоэнергетических эффективных моделей ВТСП купратов. Впервые показано наличие двух квантовых фазовых переходов Лифшица при допировании купратов дырками.

2. Получена зависимость магнитного отклика от допирования в эффективной многозонной модели кобальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. Проанализировано влияние сильных электронных корреляций в приближении Гутцвиллера.

3. Исследовано влияние симметрии сверхпроводящей щели и электронной структуры на динамическую спиновую восприимчивость в $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. Показано, что ниже T_c результаты для $d_{x^2-y^2}$ - или d_{xy} -типов симметрий параметра

порядка согласуются с экспериментальными данными.

4. Предсказано возникновение спинового резонанса в неупругом нейтронном рассеянии при наличии $s_{\pm}$ -симметрии параметра порядка в сверхпроводниках на основе железа.

5. Магнитные свойства LaFeAsO описаны в модели магнетизма коллективизированных электронов. Показано, что мнимая часть спиновой восприимчивости на антиферромагнитном волновом векторе, обратно пропорциональная времени спин-решёточной релаксации $T_1 T$ в ЯМР, имеет Кюри-Вейсовский характер вплоть до $x \approx 0.11$, после которой показывает паулиевскую зависимость от температуры.

6. Объяснена экспериментально наблюдаемая линейная температурная зависимость однородной спиновой восприимчивости в двухзонной модели пниктидов и показано, что причина такого линейного возрастания та же, что и в двумерной Ферми-жидкости, а именно, наличие неаналитических поправок.

7. Исследовано неупругое динамическое рассеяние квазичастиц на спиновых и зарядовых флуктуациях в пятиорбитальной модели с локальным кулоновским взаимодействием для соединений железа. Показано, как возникает сильная анизотропия рассеяния на электронных Ферми-поверхностях и долгоживущие состояния квазичастиц.

8. Впервые показано, что в двухзонной модели пниктидов с $s_{\pm}$ -симметрией параметра порядка при наличии внутризонного притяжения возникает переход из $s_{\pm}$ в s_{++} -состояние, при котором T_c остаётся конечной и практически не зависящей от параметра рассеяния на примесях. Показано, что при рассеянии на магнитных примесях T_c не подавляется полностью в случае наличия только межзонного рассеяния, причём параметр порядка $s_{\pm}$ -типа не изменяется, а s_{++} -состояние переходит в $s_{\pm}$ -состояние при увеличении параметра рассеяния.

9. На основе спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания и приближения главных угловых гармоник подробно описана сверхпроводящая фазовая диаграмма соединений железа и выяснено, какое именно взаимодей-

ствие на Ферми-поверхности доминирует при различных уровнях допирования.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты, изложенные в диссертации, сами по себе представляют интерес для описания свойств рассматриваемых соединений, а также могут служить основой для построения новых теоретических подходов.

Так, продемонстрирована необходимость двух квантовых фазовых переходов с изменением топологии Ферми-поверхности для эволюции последней от присущей слабодопированному мотт-хаббардовскому диэлектрику малой Ферми-поверхности до большой Ферми-поверхности в передопированных дырками купратах. Показано, что эволюция магнитного состояния с допированием в кобальтите $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ может быть качественно описана в моделях делокализованных электронов. Предсказано возникновение спинового резонанса в неупругом нейтронном рассеянии в сверхпроводниках на основе железа при наличии $s_{\pm}$ -симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Указано, что для описания магнитных свойства пниктида LaFeAsO наиболее пригодна модель магнетизма коллективизированных электронов. Установлено, что экспериментально наблюдаемая линейная температурная зависимость однородной спиновой восприимчивости в пниктидах обусловлена наличием неаналитических поправок в двумерной Ферми-жидкости и определяется квадратом амплитуды рассеяния в канале волны спиновой плотности. Показано, как возникает сильная анизотропия рассеяния на электронных Ферми-поверхностях и долгоживущие состояния квазичастиц в соединениях железа из-за неупругого динамического рассеяния квазичастиц на спиновых и зарядовых флуктуациях. Получены условия устойчивости сверхпроводящих состояний с s_{++} - и $s_{\pm}$ -симметриями параметра порядка относительно рассеяния на немагнитных и магнитных примесях. Установлено, какое именно взаимодействие на Ферми-поверхности доминирует при различных уровнях допирования в соединениях железа.

Методология и методы исследования. В каждом из исследуемых классов веществ есть свои особенности, которые указывают, какие методы под-

ходят для их адекватного описания. Специфика купратов состоит в наличии сильных электронных корреляций. В этом случае наиболее перспективной является теория возмущений при большой величине хаббардовского отталкивания U и применение операторов Хаббарда. Слоистые кобальтиты Na_xCoO_2 являются примером коррелированных систем, проявляющих металлические свойства. Поэтому для их исследования мы комбинируем методы, подходящие для описания коллективизированных электронов, и приближение Гутцвиллера, хорошо описывающее коррелированную Ферми-жидкость. В соединениях железа важную роль играет многоорбитальная физика. Согласие между экспериментальной Ферми-поверхностью и рассчитанной из первых принципов, а также малая величина магнитного момента и отсутствие диэлектрического состояния даже в недопированных образцах, говорят о том, что корреляции в соединениях железа не очень велики. Поэтому мы используем подход теории Ферми-жидкости. В частности, приближение хаотических фаз, обобщённое на случай многоорбитальных систем, для вычисления спиновой восприимчивости, а также многозонное обобщение теории Элиашберга для описания влияния примесей на сверхпроводящее состояние.

Положения, выносимые на защиту:

1. Параметры эффективных низкоэнергетических моделей ВТСП купратов р-типа и n-типа. Переходы Лифшица с изменением топологии поверхности Ферми при изменении допирования. Поверхность Ферми в области оптимального допирования $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, характерная для допированного двумерного антиферромагнитного моттовского диэлектрика.
2. Эволюция магнитного отклика с допированием и влияние сильных электронных корреляций в приближении Гутцвиллера в эффективной многозонной модели кобальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$.
3. Динамическая спиновая восприимчивость в сверхпроводящем слоистом кобальтите $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ в трёх различных моделях: однозонная a_{1g} -модель с перескоком между ближайшими соседями, реалистичная трёхзонная t_{2g} -модель

как с e'_g карманами на поверхности Ферми, так и без них.

4. Предсказание возникновения спинового резонанса в неупругом рассеянии нейтронов при наличии $s_{\pm}$ -симметрии параметра порядка в сверхпроводниках на основе железа.

5. Магнитные свойства LaFeAsO в рамках теории магнетизма коллективизированных электронов: температурная зависимость параметра порядка состояния волны спиновой плотности, магнитный момент, приходящийся на атом Fe, зависимость температуры Нееля от допирования в пниктидах $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$. Температурная зависимость мнимой части спиновой восприимчивости на антиферромагнитном волновом векторе, обратно пропорциональная времени спинрешёточной релаксации T_1T .

6. Объяснение экспериментально наблюдаемой линейной температурной зависимости однородной спиновой восприимчивости в двухзонной модели пниктидов.

7. Качественное объяснение наблюдаемой зависимости постоянной Холла и проводимости от допирования в пниктидах $\text{Ba}(\text{Fe}_{2-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ и $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_2\text{Fe}_2\text{As}_2$ при учёте неупругого динамического рассеяния квазичастиц на спиновых и зарядовых флуктуациях в пятиорбитальной модели соединений железа с локальным кулоновским взаимодействием.

8. Переход из $s_{\pm}$ в s_{++} -состояние в двухзонной модели пниктидов при рассеянии на немагнитных примесях и переход из s_{++} в $s_{\pm}$ -состояние при рассеянии на магнитных примесях, что приводит к конечному значению T_c , практически не зависящему от параметра рассеяния на примесях.

9. Описание сверхпроводящей фазовой диаграммы соединений железа на основе спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания и приближения главных угловых гармоник и указание, какое именно взаимодействие на Ферми-поверхности доминирует при различных уровнях допирования.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность полученных результатов обеспечивается применением методов, широко апроби-

рованных для изучения Ферми-жидкостных систем и систем с сильными корреляциями, обоснованным выбором физических приближений, а также согласием результатов работы с результатами других авторов и экспериментальными данными.

Основные положения диссертации и отдельные результаты докладывались на следующих международных конференциях. Приглашённые доклады: Международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка - XXXV”, Верхняя Сысерть (2014); Trilateral Workshop on Hot Topics in HTSC: Fe-Based Superconductors, Звенигород (2013); EASTMAG V, Владивосток (2013); Superstripes 2013, Ischia, Italy (2013); Electronic Structure and Electron Spectroscopies (ES&ES), Киев (2013); Superstripes 2012, Erice-Sicily, Italy (2012); KITP Miniprogram: Iron-Based Superconductors, Santa Barbara, USA (2011); 5th International Conference on Magnetic and Superconducting Materials (MSM07), Хи-ва, Узбекистан (2007); 6th International Conference on New Theories, Discoveries and Applications of Superconductors and Related Materials (New3SC-6), Sydney, Australia (2007). Устные доклады: Workshop on Probing and Understanding Exotic Superconductors and Superfluids, ICTP, Trieste, Italy (2014); APS March Meetings 2010-2013, USA (2010-2013); International Conference “Fundamental Problems of High Temperature Superconductivity” (FPS’06, FPS’08, FPS’11), Звенигород (2006,2008,2011); Korrelationstage 2009 (KORREL09), Dresden, Germany (2009); Competing Orders, Pairing Fluctuations, and Spin Orbit Effects in Novel Unconventional Superconductors (COFUS08), Dresden, Germany (2008); DPG Annual Meeting, Germany (2007-2008); 23. Workshop on “Novel Materials and Superconductors”, Planneralp, Austria (2008); EASTMAG-2007, Казань (2007). Постерные доклады: Physical Phenomena at High Magnetic Fields (PPHMF-VII), USA (2010); International Conference on Highly Frustrated Magnetism (HFM2008), Braunschweig, Germany (2008); Unconventional Phases and Phase Transitions in Strongly Correlated Electron Systems (UPPT08), Dresden, Germany (2008); First International workshop on the physical properties of lamellar cobaltates,

LPS University of Paris-Sud, Orsay, France (2006); 8th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (M2S-HTSC VIII), Dresden, Germany (2006).

Также результаты работы неоднократно обсуждались на семинарах Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Физического института им. П.Н. Лебедева РАН, Института физических проблем им. П.Л. Капицы РАН.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 36 печатных работах, из них 34 статей в рецензируемых журналах [1–34] и 2 статьи в сборниках трудов конференций [35, 36].

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 10 глав, заключения и библиографии. Общий объём диссертации 345 страниц, из них 288 страниц текста, включая 86 рисунков. Библиография включает 474 наименования на 57 страницах.

Глава 1

Обзор литературы

1.1. Купраты

ВТСП (высокотемпературные сверхпроводящие) купраты, открытые более 20 лет назад, всё ещё представляют загадку для современной физики твёрдого тела. И причина не только в необычной сверхпроводимости самой высокой с когда-либо наблюдаемой температурой перехода T_c . В купратах наблюдается эволюция от недопированного антиферромагнитного (АФМ) диэлектрика до практически обычного, хотя и коррелированного [37], Ферми-жидкостного металла в передопированных системах. Между этими двумя режимами система показывает сильно-коррелированное или, так называемое, “псевдощелевое” металлическое поведение до оптимального допирования $x_{opt} \approx 0.16$, соответствующего максимуму T_c на фазовой диаграмме купратов.

Купраты состоят из двумерной решётки $3d$ -ионов переходного металла (Cu), окружённого $2p$ -ионами лигандов (O). Также присутствует так называемый апический кислород, который может быть расположен над и под плоскостью меди. На уровне Ферми присутствуют d -состояния меди, из которых доминируют e_g -орбитали и, в частности, $d_{x^2-y^2}$ -орбиталь. Между плоскостями CuO_2 расположены ионы или группы ионов, например La, Nd, YBa. Проводящими являются именно медно-кислородные плоскости, а ионы между ними - разделителями. Допирование осуществляется именно заменой одного из разделителей другим ионом, имеющим отличную валентность, как в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_2$ и $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_2$, или добавкой внеплоскостного кислорода, как, например, в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$. Дополнительная дырка или электрон переходят в плоскость CuO_2 , таким образом допируя её.

Фазовая диаграмма купратов достаточно сложна. Недопированные соеди-

нения являются антиферромагнетиками. С увеличением допирования антиферромагнетизм исчезает. Сверхпроводимость возникает при ненулевом допировании и затем исчезает, при этом зависимость T_c от концентрации носителей (дырок или электронов) x формирует “купол”. В то время как в дырочно-допированных купратах, таких как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_2$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$, дальний Неелевский порядок исчезает до того, как возникает сверхпроводимость, в электронно-допированных соединениях, таких как $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_2$ и $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_2$, существуют указания на сосуществование сверхпроводимости и магнетизма. Недопированные купраты являются диэлектриками, поэтому хорошей исходной точкой может быть модель Хаббарда с половинным заполнением и имеющим в ней место переходом Мотта-Хаббарда.

Так называемые недодопированные купраты, т.е. те, у которых уровень допирования меньше соответствующего максимальному $T_c(x)$, проявляют как признаки псевдощелевого состояния, так и нескольких конкурирующих фаз. К ним относятся, например, зарядовое упорядочение [38–42] и фаза спинового стекла. В дырочно-допированных купратах (так называемые купраты р-типа) необычное металлическое состояние вблизи оптимального допирования характеризуется линейным по температуре сопротивлением в широкой области температур. Наиболее распространённая точка зрения состоит в том, что эти особенности связаны с сильными электронными корреляциями.

Недавние успехи в усовершенствовании экспериментальных методов, особенно фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy, ARPES) и сканирующей туннельной микроскопии (Scanning Tunneling Microscopy, STM), позволили открыть множество интересных особенностей эволюции купратов с допированием. Так, была получена Ферми-поверхность при малом допировании [43]. Совместно с предыдущими измерениями на оптимально и передопированных системах (см., например, работу [44] и ссылки там), эти наблюдения составляют единую картину эволюции Ферми-поверхности с допированием от “Ферми-арки” [45] в слабодопированных

веществах до “большой” Ферми-поверхности в передопированных системах. Наблюдаемое изменение Ферми-поверхности согласуется с измерениями Холловского коэффициента R_H [46].

Псевдощелевое поведение, наблюдаемое в ARPES, также проявляется в транспортных измерениях. В частности, если нарисовать изменения кривизны сопротивления, т.е. $d^2(\rho_{ab}/\rho_{ab}(300\text{K}))/dT^2$, на фазовой диаграмме в координатах $T - x$, то сразу виден кроссовер между недодопированными и передопированными режимами [47]. Внутриплоскостное сопротивление ρ_{ab} имеет линейную по T зависимость только в окрестности оптимального допирования x_{opt} .

Существенные изменения динамики квазичастиц были обнаружены вблизи оптимального допирования при измерении зависящего от времени фотоиндуцированного изменения коэффициента отражения в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-y}\text{Dy}_y\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (BSCCO) [48]. А именно, перераспределение спектрального веса, которое ожидается для сверхпроводника типа БКШ, наблюдалось для передопированного, но не для недодопированного BSCCO. Это согласуется с наблюдаемым различием в переносе спектрального веса с низких частот в нормальном и сверхпроводящем состояниях в недо- и передопированных образцах [49, 50].

В то же время интегральные характеристики системы более плавные изменяются с увеличением допирования x . Зависимость сдвига химпотенциала $\Delta\mu$ от x показывает пиннинг при $x < x_{opt}$ и плавную эволюцию при больших концентрациях допирования [51]. Измеренная нодальная Ферми-скорость v_F практически не зависит от допирования с точностью до экспериментальной ошибки в 20% [52, 53]. Эксперименты, комбинирующие измерения транспорта при постоянном токе и инфракрасную спектроскопию, выявили практически постоянную эффективную массу электрона $m^*/m = 3.8 \pm 2$ в недодопированных и немного передопированных $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) и $\text{YBa}_2\text{Cu}_6\text{O}_y$ (YBCO) [54]. Зависимость эффективной массы от допирования при малых x противоречит теории перехода металл-диэлектрик Бринкмана-Райса [55], которая предсказывает расходимость m^* в точке перехода. Один из основных недостатков этой

теории состоит в том, что магнитные корреляции были отброшены. Наблюдаемое различие подчёркивает важность этих корреляций в физике ВТСП.

С теоретической точки зрения описание кроссовера между практически локализованной картиной и режимом Ферми-жидкости очень сложен. Исходя из Ферми-жидкостного подхода можно обсуждать передопированную и, частично, оптимально допированную области фазовой диаграммы, но для недодопированных и недопированных систем этот подход неприменим. Хорошей исходной точкой для описания коррелированной металлической системы является приближение Гутцвиллера [56–58] для модели Хаббарда. Это приближение эквивалентно [59, 60] решению типа среднего поля в подходе слэйв-бозонов [61]. В то же время, как было показано в разложении по $1/d$, где d - размерность решётки, приближение Гутцвиллера эквивалентно случаю $d = \infty$ [59]. Очевидно, что для такой квазидвумерной системы, как ВТСП купраты, это не является хорошим пределом. Аналогичные выводы можно сделать о динамической теории среднего поля (Dynamical Mean-Field Theory, DMFT) [62, 63], которая точна только при $d = \infty$. В этом пределе магнитные флуктуации на малых расстояниях исключены. Это не является хорошей исходной точкой для описания системы с дальним АФМ порядком при малых x и ближними АФМ корреляциями в недодопированной области.

Одним из перспективных методов вычисления электронной структуры сильно-коррелированных систем и моттовских диэлектриков является много-электронный метод LDA+GTB (Local Density Approximation + Generalized Tight-Binding, т.е. приближение локальной плотности + обобщённый метод сильной связи) [34]. Этот метод является обобщением хаббардовской теории возмущений, основанной на атомном пределе. Все локальные взаимодействия в элементарной ячейке учитываются методом точной диагонализации многозонного гамильтониана $p-d$ модели с параметрами, полученными из LDA. Перескоки и взаимодействия между элементарными ячейками учитываются по теории возмущений в представлении X -операторов Хаббарда. Далее мы сделаем обзор

метода LDA+GTB.

1.1.1. Обзор метода LDA+GTB

Один из наиболее привлекательных аспектов физики конденсированного состояния в возможности объяснять и даже предсказывать свойства материалов, из которых состоит наш мир. Существенное продвижение в этом направлении было сделано в середине 60-х Хохенбергом, Коном и Шэмом [64, 65], которые сформулировали теорию функционала плотности (Density Functional Theory, DFT). Поскольку исходной точкой является уравнение Шрёдингера для определённого расположения атомов и орбитальной и спиновой конфигурации, эту теорию часто называют ‘первопринципными’ или ‘*ab initio*’ расчётами. Если добавить к DFT приближение локальной плотности (Local Density Approximation, LDA) или обобщённое градиентное приближение (Generalized Gradient Approximation, GGA) для изначально неизвестной величины - обменно-корреляционной энергии, то эта теория даёт численное описание энергии основного состояния и зонной структуры различных атомов, молекул и твёрдых тел (см., например, обзор [66]).

Несмотря на успех для *s*- и *p*-атомов в твёрдых телах, применение LDA не увенчалось успехом при описании переходных металлов с частично заполненной *3d*-орбиталью. Наиболее разительным провалом было то, что согласно LDA La_2CuO_4 должен был быть металлом, а он является диэлектриком. Корень этой проблемы в неэкранированном одноузельном кулоновском взаимодействии - хаббардовском отталкивании [67]. В приближении типа среднего поля в однозонной системе при хаббардовском отталкивании U большем, чем ширина зоны W , зона расщепляется на две хаббардовские подзоны со щелью между ними $\propto U$. Спектральный вес квазичастицы перераспределяется между этими подзонами. При половинном заполнении уровень Ферми находится внутри щели и система является диэлектриком. В многоорбитальной системе помимо хаббардовского отталкивания возникают и приводят к разнообразным физическим

эффектам другие локальные взаимодействия - хундовский обмен J_H , межорбитальное хаббардовское отталкивание U' и так называемый парный перескок J' . Открытие хаббардовской щели и главенствующая роль, играемая локальными взаимодействиями вблизи половинного заполнения, находятся за пределами LDA и GGA.

Существует несколько обобщений LDA, призванных учесть одноузельные взаимодействия или симулировать их роль. Один из таких методов - это LDA+U [68], а другой - SIC-LSDA (Self-Interaction-Corrected Local Spin Density Approximation) [69]. В обоих методах локальные взаимодействия учитываются в рамках подхода Хартри-Фока и, в отличие от LDA, приводят к антиферромагнитному диэлектрическому основному состоянию в La_2CuO_4 , но происхождение диэлектрической щели там неправильное. В LDA+U и SIC-LSDA она формируется локальными одноэлектронными состояниями, расщеплёнными за счёт спиновой или орбитальной поляризации. Следовательно, парамагнитная фаза выше температуры Нееля T_N в недопированном La_2CuO_4 будет металлической, несмотря на режим сильных корреляций с $U \gg W$. В этих приближениях присутствует существенный недостаток - пренебрежение перераспределением спектрального веса между хаббардовскими подзонами. Этот эффект включён в другой подход к первопринципным вычислениям для систем с сильными корреляциями - LDA+DMFT (LDA + динамическая теория среднего поля, LDA + Dynamical Mean Field Theory) [70–73]. Этот метод основан на самосогласованной процедуре, в которой зонная структура LDA используется для вычисления электронной собственно-энергетической части в DMFT. DMFT основана на том, что в пределе бесконечного числа измерений $D \rightarrow \infty$ в модели Хаббарда собственно-энергетическая часть не зависит от импульса, $\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \rightarrow \Sigma(\omega)$ [62, 62, 63]. Остаточная зависимость от частоты точна в пределе $D \rightarrow \infty$ и содержит важную информацию о динамических корреляциях и Мотт-Хаббардовском переходе. С другой стороны, пространственные корреляции становятся очень важны в низкоразмерных системах, таких, как ВТСП купраты. Именно поэтому для

купратов в LDA+DMFT не могут быть получены корректные законы дисперсии зон и спектральные интенсивности. Естественные обобщения этого метода, LDA+кластерный DMFT или LDA+ячеечный DMFT (LDA+Cluster DMFT или LDA+Cellular DMFT) [74–77], и SDFT (теория функционала спектральной плотности, Spectral Density Functional Theory) [78] дают зависящую от импульса собственно-энергетическую часть позволяя, таким образом, учесть нелокальные корреляции.

Метод LDA+GTB не просто “один из” подходов для изучения модели Хаббарда. С самого начала обобщённый метод сильной связи (Generalized Tight Binding method, GTB method) формулировался, чтобы обобщить микроскопические расчёты зонной структуры на случай учёта сильных электронных корреляций (СЭК) в таких Мотт-Хаббардовских диэлектриках, как оксиды переходных металлов [79]. Подобно обычному методу сильной связи, исходной точкой являются определённые локальные стояния электронов и затем, с помощью Фурье-преобразования, производится переход к импульсному пространству чтобы получить зонную структуру. Из-за СЭК невозможно использовать локальные состояния свободных электронов поскольку локальный фермион на d -орбитали, в отличие от обычного метода сильной связи, является квазичастицей, определяемой возбуждениями между локальными многоэлектронными уровнями d^n и $d^{n\pm 1}$. Другими словами, метод GTB - это сильно-коррелированная версия метода сильной связи. Первые компьютерные программы и успешное применение метода GTB было сделано для купратов в работе [80]. В той версии использовалась многозонная $p - d$ модель для La_2CuO_4 [81] со множеством эмпирических параметров. Чтобы сформулировать первопринципный подход, был сформулирован гибридный метод LDA+GTB [34]. Затем подобные идеи были использованы для изучения зонной структуры манганитов $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ [82] и кобальтовое LaCoO_3 [83].

Метод LDA+GTB можно рассматривать как развитие идей атомного представления подхода Хаббард [67] для применения к существующим материалам

как, например, оксиды $3d$ -металлов. Метод GTB также является специфической версией кластерной теории возмущений (Cluster Perturbation Theory, CPT) в представлении X -операторов Хаббарда [84].

Основные шаги метода LDA+GTB

Как и любая другая кластерная теория возмущений, метод GTB основан на точной диагонализации (Exact Diagonalization, ED) внутриячеечной части многоэлектронного гамильтониана H_c и теории возмущений для межъячеечной части H_{cc} . Схема LDA+GTB состоит из следующих шагов [34], показанных на Рисунке 1.1:

Шаг I: LDA. Вычисление зонной структуры в LDA, конструирование функций Ванье заданной симметрии, вычисление одно- и двух-электронных матричных элементов гамильтониана сильной связи с локальными кулоновскими взаимодействиями и взаимодействиями на ближайших соседях.

Шаг II: ED. Разделение полного гамильтониана H на внутри- и межъячеечную части, $H = H_c + H_{cc}$, где H_c представляет собой сумму ортогональных друг другу элементарных ячеек, $H_c = \sum_f H_f$. Точная диагонализация одной элементарной ячейки H_f и конструирование X -операторов Хаббарда $X_f^{pq} = |p\rangle \langle q|$ используя полный ортонормированный набор собственных состояний $\{|p\rangle\}$ of H_f .

Шаг III: теория возмущений. В представлении X -операторов локальные взаимодействия диагональны, а все межъячеечные перескоки и дальнотдействующее кулоновское взаимодействие квадратичны по X -операторам. Далее могут быть использованы различные варианты теории возмущений, известные для модели Хаббарда в X -представлении. Один из наиболее общих подходов включает использование обобщённого уравнения Дайсона в рамках диаграммной техники для X -операторов [84].

Далее мы обсудим каждый шаг в отдельности.

Шаг I: LDA

Из LDA получается набор блоховских функций $|\Psi_{\lambda\mathbf{k}}\rangle$ и энергии зон $\epsilon_{\lambda}(\mathbf{k})$, где λ - зонный индекс. Например, расчёты зонной структуры в LDA для La_2CuO_4 и Nd_2CuO_4 были сделаны методом TB-LMTO-ASA (Linear Muffin-Tin Orbitals using Atomic Sphere Approximation in the Tight-Binding method, линейные маффин-тин орбитали в приближении атомных сфер в методе сильной связи) [85]. Используя формализм функций Ванье [86] или метод NMTO (Nth-order Muffin-Tin Orbitals, Маффин-тин орбитали N -го порядка) [87] с помощью проекционной процедуры получаются одноэлектронные энергии ϵ_{λ} и интегралы перескока $T_{fg}^{\lambda\lambda'}$ модели сильной связи [34]:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{f,\lambda,\sigma} (\epsilon_{\lambda} - \mu) n_{f\lambda\sigma} + \sum_{f \neq g} \sum_{\lambda,\lambda',\sigma} T_{fg}^{\lambda\lambda'} c_{f\lambda\sigma}^{\dagger} c_{g\lambda'\sigma} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{f,g,\lambda,\lambda'} \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4} V_{fg}^{\lambda\lambda'} c_{f\lambda\sigma_1}^{\dagger} c_{f\lambda\sigma_3} c_{g\lambda'\sigma_2}^{\dagger} c_{g\lambda'\sigma_4}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

где $c_{f\lambda\sigma}$ - оператор уничтожения дырки в представлении Ванье на узле f с орбитальным индексом λ и спиновым индексом σ , $n_{f\lambda\sigma} = c_{f\lambda\sigma}^{\dagger} c_{f\lambda\sigma}$ - оператор числа частиц.

Значения кулоновских параметров $V_{fg}^{\lambda\lambda'}$ можно получить из расчётов LDA для сверхячейки [88]. Для меди в La_2CuO_4 полученные таким методом хаббардовский параметр U и хундовский обмен J равны 10 эВ и 1 эВ, соответственно [89].

Отметим, что число и симметрия выбранных функций Ванье определяется интересующим нас энергетическим окном. Например, широко распространено мнение, что низкоэнергетическая физика купратов может быть описана в трёхзонной модели [90, 91], которая включает связующие орбитали меди ($d_{x^2-y^2}$) и кислорода ($p_{x,y}$). Тем не менее, если мы заинтересованы в физике, включающей апический кислород, необходимо добавить кислородные p_z и мед-

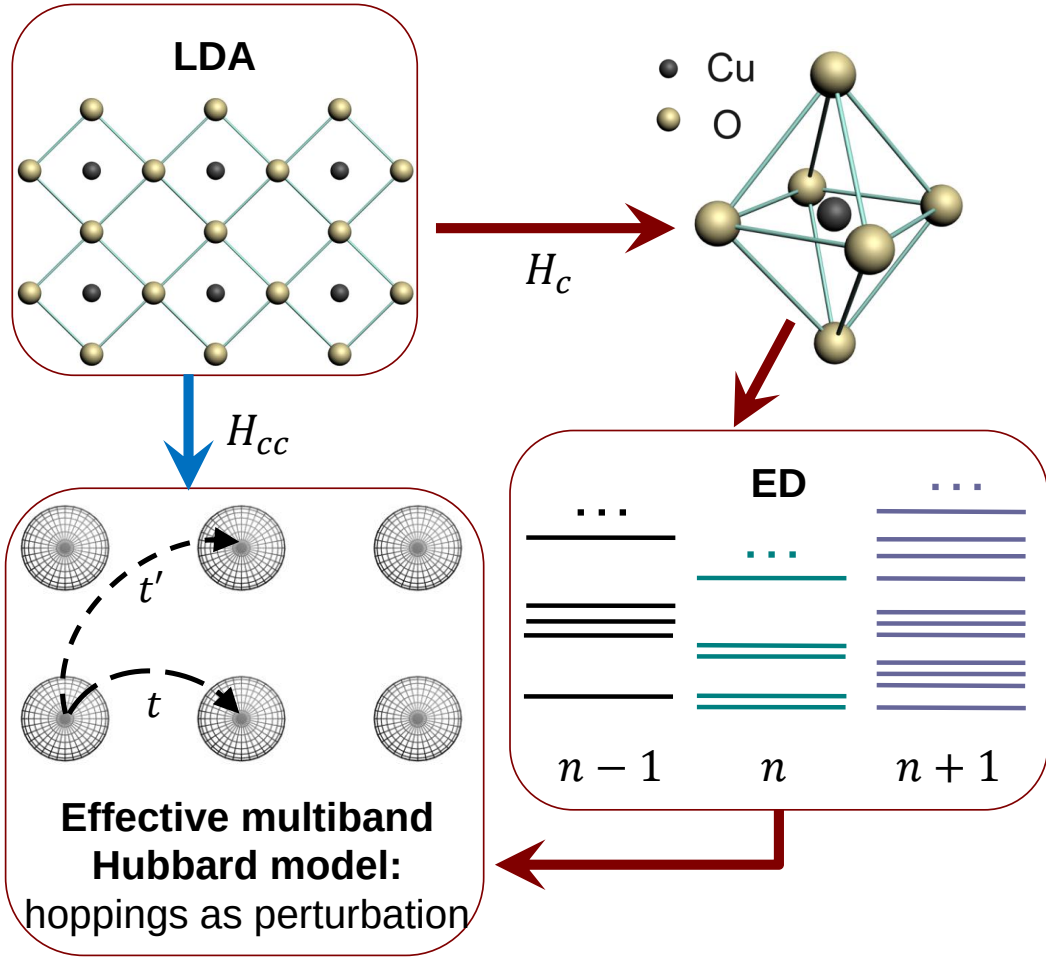


Рис. 1.1. Схема трёх шагов метода LDA+GTB на примере CuO_2 -слоя. Первый шаг состоит в расчёте зонной структуры методом LDA и получении параметров многоорбитального гамильтониана, который затем разделяется на внутриячеечную и межъячеечную части, H_c и H_{cc} , соответственно. Элементарная ячейка - это кластер $\text{CuO}_6 = \text{CuO}_4 + \text{два апических кислорода}$. Вторым шагом является точная диагонализация H_c , которая приводит к набору энергетических уровней. Собственные состояния H_c используются для построения многозонной модели Хаббарда в представлении X -операторов с перескоками между кластерами (t , t' , и т.д.) из H_{cc} . После этого для получения функции Грина электронов используется теория возмущений для X -операторов.

ные d_{z^2} орбитали, что приводит к пятизонной $p - d$ модели [81]. Для описания ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy, UPS) или рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (X-ray Photoelectron Spectroscopy, XPS) необходимо учитывать все $3d$ орбитали. В рамках пятиорбитальной модели можно, например, рассматривать фотоэмиссионную спектроскопию с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy, ARPES) до энергий связи порядка 2 эВ и резонансную неупругую рентгеновскую спектроскопию (Resonant Inelastic X-ray Spectroscopy, RIXS). Для других оксидов переходных металлов набор необходимых функций Ванье выбирается индивидуально.

Шаг II: точная диагонализация

В оксидах переходных металлов (Me) элементарную ячейку можно выбрать как кластер MeO_n ($n = 6, 5, 4$) и, обычно, там присутствует общий для двух близлежащих ячеек кислород. Все остальные ионы приводят к электронной нейтральности и вносят вклад в электронную структуру на высоких энергиях. Перед процедурой точной диагонализации необходимо решить проблему неортогональности кислородных орбиталей близлежащих ячеек. Для связующих σ -орбиталей e_g электронов $3d$ металла и кислородных a_{1g} и b_{1g} орбиталей эта проблема решается точно используя диагонализацию в k -пространстве [92]. В LDA+GTB для купратов используется та-же процедура для t_{2g} орбиталей. Ортогонализация приводит к перенормировке перескоков и кулоновских матричных элементов в уравнении (1.1).

Остановимся подробнее на ортогонализации. Из-за общего для двух ячеек кислорода неортогональными являются построенные из атомных p_x , p_y и p_z σ -связующих орбиталей MOLCAO (Molecular Orbital as a Liner Combination of Atomic Orbitals, молекулярные орбитали как линейная комбинация атомных орбиталей). Диагонализация гамильтониана сильной связи в k -пространстве [92]

приводит к следующим линейным комбинациям:

$$p_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mu} c_{\lambda\mu}(\mathbf{k}) \tilde{p}_{\mathbf{k}\mu}, \quad (\lambda = x, y, z), \quad (1.2)$$

где Фурье-образы от $\tilde{p}_{f\nu}$ (так называемые групповые орбитали кислорода) ортогональны в различных ячейках. В координатном пространстве групповая орбиталь $\tilde{p}_{f\nu}$ - это кислородная волновая функция, центрированная на положении $3d$ -металла $\mathbf{R}_f$; она отлична от нуля на расстояниях порядка нескольких близлежащих узлов. Следовательно, перенормировки $p-d$ и $p-p$ перескоков следующие:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} T_{pd}^{\lambda\lambda'} p_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\lambda'} &= \sum_{\mathbf{k},\nu} T_{pd}^{\lambda\lambda'} c_{\lambda\nu}^*(\mathbf{k}) \tilde{p}_{\mathbf{k}\nu}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\lambda'} = \sum_{f,g} T_{fg}^{\nu\lambda'} \tilde{p}_{f\nu}^{\dagger} d_{g\lambda'}, \\ \sum_{\mathbf{k}} T_{pp}^{\lambda\lambda'} p_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} p_{\mathbf{k}\lambda'} &= \sum_{\mathbf{k},\nu,\nu'} T_{pp}^{\lambda\lambda'} c_{\lambda\nu}^*(\mathbf{k}) c_{\lambda'\nu'}(\mathbf{k}) \tilde{p}_{\mathbf{k}\nu}^{\dagger} p_{\mathbf{k}\nu'} = \sum_{f,g,\nu,\nu'} T_{fg}^{\nu\nu'} \tilde{p}_{f\nu}^{\dagger} \tilde{p}_{g\nu'}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Перенормированный параметр $p-d$ перескока $T_{fg}^{\nu\lambda'}$ уменьшается с расстоянием $\mathbf{R} = \mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g$ и отличен от нуля для нескольких ближайших соседей даже если исходные параметры перескока T_{pd} и T_{pp} были взяты конечными только для соседних ячеек. Например, для купратов эти параметры были вычислены до 6-ой координационной сферы и неисчезающими оказались параметры до 3-ей сферы [34]. Именно это является причиной, почему параметры перескока на следующие за ближайшими соседними узлами t' и на следующие за следующими за ближайшими соседними узлами t'' появляются и важны в $t - t' - t'' - J$ модели купратов. Аналогично межъячеечные (дальнодействующие, но ограниченные несколькими ближайшими соседями) кулоновские параметры с участием дырки на кислороде оказываются зависящими от расстояния. Кулоновские $p-d$ и $p-p$ взаимодействия равны

$$\begin{aligned} H_{pd}^{\text{int}} &= \sum_{f,i,j} \sum_{\nu,\lambda,\sigma,\sigma'} V_{pd} \Phi_{fij} n_{df\lambda\sigma} \tilde{p}_{i\nu\sigma'}^{\dagger} \tilde{p}_{j\nu\sigma'}, \\ H_{pp}^{\text{int}} &= \sum_{f,g,i,j} \sum_{\nu} U_p \Psi_{fgij} p_{f\nu\uparrow}^{\dagger} p_{g\nu\uparrow} p_{i\nu\downarrow}^{\dagger} p_{j\nu\downarrow}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Внутриячеечные $p-d$ коэффициенты равны $\Phi_{000} = 0.918$, в то время как межъячеечные равны $\Phi_{001} = -0.13$ и $\Phi_{002} = -0.02$ [92]. $p-p$ коэффициенты равны

$\Phi_{0000} = 0.21$ и $\Phi_{0001} = -0.03$. Из этих значений сразу видно, что кулоновское взаимодействие, в отличие от перескоков, в основном локализовано в одной элементарной ячейке гамильтониана H_f .

Далее будем работать с перенормированными параметрами. После ортогонализации гамильтониан (1.1) может быть переписан как сумма внутри- и межъячеечных вкладов:

$$H = H_c + H_{cc}, \quad H_c = \sum_f H_f, \quad H_{cc} = \sum_{f,g} H_{fg}, \quad (1.5)$$

где ортогональные состояния в различных ячейках f описываются гамильтонианами H_f .

Точная диагонализация H_f даёт набор собственных состояний $|p\rangle = |n_p, i_p\rangle$ и энергий E_p . Здесь n_p - число электронов на элементарную ячейку, а i_p обозначает все остальные квантовые числа, такие как спин, орбитальный момент и т.д. Для купратов дырочное представление наиболее удобно. При этом $n = 0$ означает вакуумное состояние дырок (конфигурация $d^{10}p^6$), $n = 1$ означает однодырочную молекулярную орбиталь (конфигурация $d^9p^6 + d^{10}p^6$), $n = 2$ представляет собой двухдырочную орбиталь ($d^9p^5 + d^{10}p^4 + d^8p^6$). Синглет Жанга-Райса является наиболее важной, но не единственной конфигурацией, вносящей вклад в основное состояние с $n = 2$. В манганитах важными являются электронные конфигурации $n = 5, 4, 3$ и соответствуют они высокоспиновым термам d^5p^6 ($S = 5/2$), $d^4p^6 + d^5p^5$ ($S = 2$), $d^3p^6 + d^4p^5$ ($S = 3/2$) [82]. В кобальтитах важные электронные конфигурации это $n = 7, 6, 5$ [83]. Стоит отметить, что при точной диагонализации в LDA+GTV остаются все возможные возбуждённые собственные состояния, а не отбрасываются как в процедуре Ланцоша.

Из локальной электронейтральности определяется главная конфигурация. В стехиометрическом $3d$ металле существуют три главных подпространства гильбертова пространства: d^{n-1} , d^n и d^{n+1} . Для каждого подпространства точная диагонализация предоставляет набор многоэлектронных состояний $|n, i\rangle$ с энергиями $E_i(n)$, $i = 0, 1, 2, \dots, N_n$. В этом наборе многоэлектронных тер-

мов присутствуют зарядово-нейтральные возбуждения Бозе-типа с энергиями $\omega_i = E_i(n) - E_0(n)$. Возбуждения, соответствующие добавлению электрона (локальные квазичастицы Ферми-типа), имеют энергии $\Omega_{c,i} = E_0(n+1) - E_i(n)$. Здесь индекс “с” означает, что квазичастица формирует пустую зону проводимости. Аналогично, валентная зона формируется квазичастицами Ферми-типа, соответствующими удалению электрона, с энергиями $\Omega_{v,i} = E_0(n) - E_i(n-1)$. Такой многоэлектронный язык используется в спектроскопии, см., например, работу [93]. Наиболее подходящий математический язык для описания локальных квазичастиц и их межъячеечных перескоков - это формализм X -операторов Хаббарда [67]:

$$X_f^{pq} = |p\rangle \langle q|. \quad (1.6)$$

Их алгебра формируется законом умножения $X_f^{pq} X_f^{rs} = \delta_{qr} X_f^{ps}$ и условием полноты $\sum_p X_f^{pp} = 1$. Эти два закона отражают тот факт, что X -операторы являются проективными операторами. Оператор X_f^{pq} описывает переход из начального состояния $|q\rangle$ в конечное состояние $|p\rangle$, т.е. $X^{pq} |q\rangle = |p\rangle$. Важное свойство X -операторов в том, что любой локальный оператор является линейной комбинацией X -операторов. Действительно, $\hat{O}_f = \hat{1} \cdot \hat{O} \cdot \hat{1} = \sum_{p,q} |p\rangle \langle p| \hat{O} |q\rangle \langle q| = \sum_{p,q} \langle p| \hat{O} |q\rangle X_f^{pq}$. Коммутационные соотношения для операторов Хаббарда следуют из их алгебры и довольно сложны. Тем не менее, можно ввести понятие квазифермиевского и квазибозовского операторов: если $n_p - n_q$ нечётно ($\pm 1, \pm 3$ и т.д.), то оператор X^{pq} называется квазифермиевским; если $n_p - n_q$ чётное число ($0, \pm 2$ и т.д.), то X^{pq} - квазибозовский оператор [67].

Далее будем использовать упрощённые обозначения

$$X_f^{pq} \rightarrow X_f^{\alpha_m} \rightarrow X_f^m, \quad (1.7)$$

где число m нумерует возбуждения и играет роль зонного индекса квазичастиц; каждая пара (p, q) соответствует некоторому вектору $\alpha(p, q)$, называемому “корневым вектором” в диаграммной технике X -операторов [94]. В таких

обозначениях одноэлектронный (дырочный) оператор рождения представляет собой линейную комбинацию: $c_{f\lambda\sigma} = \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}(m) X_f^m$, где $\gamma_{\lambda\sigma}(p, q) = \langle p | c_{f\lambda\sigma} | q \rangle$.

В X -представлении внутриячеечная часть гамильтониана диагональна,

$$H_c = \sum_{f,p} (E_p - n_p \mu) X_f^{pp}. \quad (1.8)$$

Межъячеечная часть имеют следующий вид:

$$H_{cc} = \sum_{f \neq g} \sum_{m,m'} t_{fg}^{mm'} X_f^{m\dagger} X_g^{m'}, \quad (1.9)$$

где введены следующие матричные элементы перескока

$$t_{fg}^{mm'} = \sum_{\sigma,\lambda,\lambda'} T_{fg}^{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) \gamma_{\lambda'\sigma}(m'). \quad (1.10)$$

Все внутриатомные кулоновские $d-d$ взаимодействия включены в H_c и, поскольку H_c диагонально в X -представлении, они учитываются точно. Доминирующая часть кулоновских $p-d$ и $p-p$ взаимодействия также включена в H_c и вносит вклад в энергии E_p , в то время как малая их часть ($\sim 10\%$) приводит к межъячеечному кулоновскому взаимодействию, которое также как и перескоки квадратично по X -операторам, $H_{cc}^{\text{Coul.}} = \sum_{f \neq g} \sum_{p,q,p',q'} V_{fg}^{pq,p'q'} X_f^{pq} X_g^{p'q'}$.

Шаг III: теория возмущений

Характерный локальный энергетический масштаб даётся эффективным хаббардовским параметром $U_{eff} = E_0(n+1) + E_0(n-1) - 2E_0(n)$, который равен разнице начальной конфигурации $d^n + d^n$ и возбуждённых конфигураций $d^{n-1} + d^{n+1}$ [93]. Эта же самая энергия получается из локальной щели между зоной проводимости и валентной зоной, $U_{eff} = \Omega_{c,0} - \Omega_{v,0}$. В зависимости от соотношения между голым хаббардовским отталкиванием U и энергией переноса заряда $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$, U_{eff} может представлять собой Мотт-Хаббардовскую щель при $U < \Delta_{pd}$ или щель с переносом заряда (Charge Transfer, CT) E_{CT} при $U > \Delta_{pd}$ [95]. Межъячеечные перескоки и взаимодействия приводят к

дисперсии зон и эффективному уменьшению энергетической щели, $E_g < U_{eff}$. Межъячеечная часть гамильтониана (1.9) и нелокальные кулоновские взаимодействия можно исследовать с помощью теории возмущений. Стоит отметить, что в X -представлении возмущение (1.9) имеет точно такую-же структуру, как и в обычной модели Хаббарда. Именно поэтому можно использовать весь накопленный опыт в изучении модели Хаббарда в X -представлении.

Одноэлектронная функция Грина для частицы с импульсом $\mathbf{k}$, энергией E , спином σ и орбитальными индексами λ и λ' ,

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{\lambda\lambda'}(E) \equiv \left\langle \left\langle c_{\mathbf{k}\lambda\sigma} \left| c_{\mathbf{k}\lambda'\sigma}^\dagger \right. \right\rangle \right\rangle_E, \quad (1.11)$$

может быть выражена через линейную комбинацию функций Грина, построенных на операторах Хаббарда $D_{\mathbf{k}\sigma}^{mn}(E) = \left\langle \left\langle X_{\mathbf{k}\sigma}^m \left| X_{\mathbf{k}\sigma}^{n\dagger} \right. \right\rangle \right\rangle_E$,

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{\lambda\lambda'}(E) = \sum_{mm'} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \gamma_{\lambda'\sigma}^*(m') D_{\mathbf{k}\sigma}^{mm'}(E). \quad (1.12)$$

Теперь встаёт вопрос, как вычислить X -операторную функцию Грина. Один из последовательных методов теории возмущений - диаграммная техника. Для X -операторов с их неудобной алгеброй стандартная теорема Вика неприменима. Тем не менее, довольно давно была доказана обобщённая теорема Вика [96]. Первая довольно удобная версия диаграммной техники была сформулирована в работе [94]. Основные правила диаграммной техники для X -операторов детально описаны в работе [84], где было получено обобщённое уравнение Дайсона:

$$\hat{D}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \left[(E - \Omega_m) \delta_{mm'} - \hat{P}_{\mathbf{k}\sigma}(E) \hat{t}(\mathbf{k}) - \hat{\Sigma}_{\mathbf{k}\sigma}(E) \right]^{-1} \hat{P}_{\mathbf{k}\sigma}(E). \quad (1.13)$$

Здесь $\Omega_m = E_p(n+1) - E_q(n)$ - это локальная энергия m -ой квазичастицы. Из-за алгебры X -операторов кроме матрицы собственной энергии $\hat{\Sigma}_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ возникает так называемый “силовой оператор” $\hat{P}_{\mathbf{k}\sigma}(E)$. Аналогичный оператор был известен ранее в диаграммной технике спиновых операторов [97]. Этот член отвечает за спектральный вес (силу осциллятора) квазичастицы, а также за

перенормировку ширины зоны. Решение Хаббард-1 [67] получается, если положить $\hat{\Sigma}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = 0$ и $\left(\hat{P}_{\mathbf{k}\sigma}(E)\right)_{mm'} = F_m \delta_{mm'}$, где $F_m = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle$ - так называемый “фактор заполнения”. F_m соответствует ненулевому спектральному весу для квазичастичных возбуждений между хотя бы частично заполненными собственными состояниями и нулевому спектральному весу для возбуждений между пустыми состояниями. В приближении Хаббард-1 уравнение дисперсии квазичастиц хаббардовских фермионов имеет вид

$$\det \|\delta_{mn} (E - \Omega_m) / F(m) - t^{mn}(\mathbf{k})\| = 0. \quad (1.14)$$

Это дисперсионное уравнение подобно дисперсионному уравнению стандартного метода сильной связи, но вместо одноэлектронных локальных энергий ε_λ здесь присутствуют локальные энергии квазичастиц Ω_m , а также факторы заполнения F_m . Именно благодаря такому подобию метод был назван “обобщённым методом сильной связи”.

Числа заполнения $\langle X^{pp} \rangle$ вычисляются самосогласованно вместе с уравнением на химический потенциал, $n_e = \frac{\langle N_e \rangle}{N} = \frac{1}{N} \sum_{f,n,i} n \langle X_f^{n,i; n,i} \rangle$. Изменение концентрации n_e приводит к перераспределению чисел заполнения и из-за факторов заполнения F_m приводит к изменению зонной структуры квазичастиц.

В методе GTB внутриячеечная функция Грина может быть найдена точно:

$$G_{0\sigma}^{\lambda\lambda'}(E) = \sum_m |\gamma_{\lambda\sigma}(m)|^2 \delta_{\lambda\lambda'} D_{0\sigma}^m(E), \quad (1.15)$$

где локальная функция Грина на операторах Хаббарда есть $D_{0,\sigma}^m(E) = F_m / (E - \Omega_m + i\delta)$. Мы видим, что электрон здесь представлен линейной комбинацией локальных (хаббардовских) фермионов с квазичастичными энергиями Ω_m и спектральными весами $|\gamma_{\lambda\sigma}(m)|^2 F_m$. Это именно тот язык, что используется в представлении Леманна [98]. Отличие в том, что теперь оно реализуется на локальном уровне и как энергии квазичастиц, так и их спектральные веса могут быть вычислены в явном виде.

Стоит отметить, что зоны, получаемые методом LDA+GTB, не являются

обычными одноэлектронными зонами. Не существует одночастичного уравнения Шрёдингера с эффективным потенциалом, которые привели бы к зонной структуре метода LDA+GTB. Квазичастицы там - это возбуждения между различными многоэлектронными уровнями. Зоны метода LDA+GTB зависят от чисел заполнения многоэлектронных уровней через операторы $\hat{P}_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ и $\hat{\Sigma}_{\mathbf{k}\sigma}(E)$, которые должны вычисляться через уравнение на хипотенциал. Здесь с самого начала не существует поведения типа жёсткой зоны - зонная структура существенно зависит от допирования, температуры, давления и внешних полей.

Зонная структура La_2CuO_4 в методе LDA+GTB

Здесь мы представим результаты метода LDA+GTB для купратов с одним CuO_2 слоем на элементарную ячейку: купрат p-типа (дырочно-допированный) $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и купрат n-типа (электронно-допированный) $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Поскольку пока в методе нет самосогласованного расчёта электронной и магнитной структур, вычисления проводятся для заданного магнитного порядка. Здесь мы рассмотрим антиферромагнитную фазу с дальним АФМ порядком.

Точная диагонализация многозонной $p-d$ модели (1.1) для кластера CuO_6 , который, помимо плоскостного кислорода, включает апиический, приводит к следующим локальным собственным состояниям (в дырочном представлении):

1. $n_h = 0$, вакуумное состояние $|0\rangle$, сформированное орбитальной конфигурацией $d^{10}p^6$.
2. $n_h = 1$, спиновый дублет $|\sigma, \lambda\rangle$ с различными орбитальными симметриями. Самый низший имеет симметрию b_{1g} , $|\sigma\rangle$, а первый возбуждённый соответствует молекулярной орбитали a_{1g} .
3. $n_h = 2$, набор двухдырочных синглетов и триплетов, простирающихся по энергии до $U_d \sim 10$ эВ. Самый нижний - синглет $|S\rangle$ симметрии 1A_1 , который включает синглет Жанга-Райса помимо прочих двухдырочных

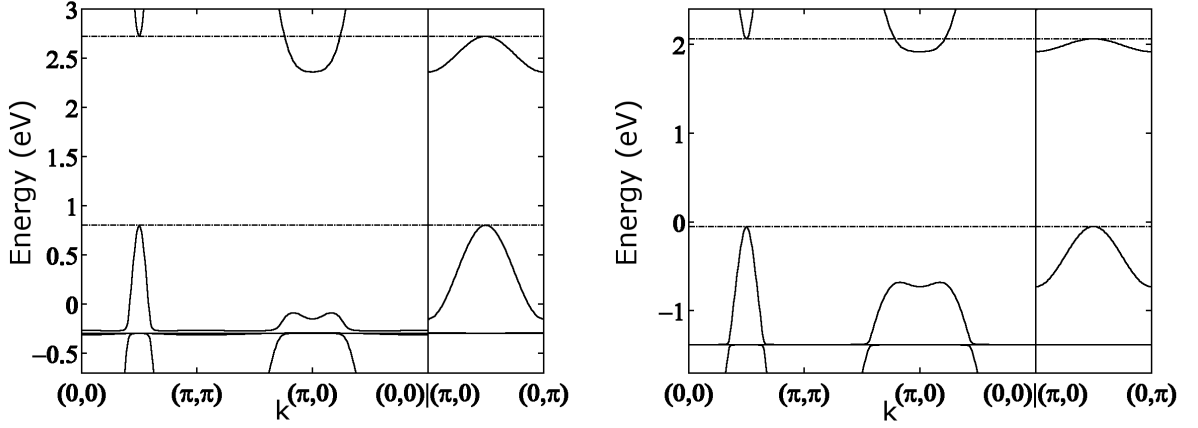


Рис. 1.2. Зонная структура антиферромагнитного La_2CuO_4 (слева) и Nd_2CuO_4 (справа) вдоль основных направлений зоны Бриллюэна в методе LDA+GTB [34].

синглетных состояний. Первое возбуждённое состояние - триплет $|TM\rangle$ ($M = +1, 0, -1$) с симметрией ${}^3B_{1g}$. Полное число собственных состояний порядка сотни.

Следующим шагом является вычисление матричных элементов $\langle 0 | c_{f\lambda\sigma} | 1\sigma'\lambda \rangle$, $\langle 1\sigma'\lambda | c_{f\lambda\sigma} | 2, i \rangle$, и конструирование X -операторов для всех электронных орбиталей. Здесь значения λ соответствуют $\text{Cu-}d_{x^2-y^2}$, $\text{Cu-}d_{z^2}$, $\text{O-}b$, $\text{O-}a$ или $\text{O-}p_z$ орбитали. В антиферромагнитном La_2CuO_4 мы производим разбиение на две подрешётки A и B , соответствующие противоположным направлениям спина на узлах. Из-за такого разбиения в решении Хаббард-1 возникают два фактора заполнения: $F_{m,A}$ и $F_{m,B}$. Благодаря эффективному молекулярному полю локальный спиновый дублет b_{1g} расщепляется так, что при нулевой температуре имеем: $\langle X_A^{\uparrow\uparrow} \rangle = \langle X_B^{\downarrow\downarrow} \rangle = 1$, $\langle X_A^{\downarrow\downarrow} \rangle = \langle X_B^{\uparrow\uparrow} \rangle = 0$. Зонная структура и плотность состояний в методе GTB в широкой области энергий со всеми возбуждёнными двухдырочными состояниями $|2, i\rangle$ была получена в работе [99]. Пустая зона проводимости формируется только одним хаббардовским фермионом $X_f^{0,\sigma}$. Она отделена щелью с переносом заряда $U_{eff} = E_{CT} \approx 2$ эВ от заполненной валентной зоны. Валентная зона, имеющая ширину порядка 6 эВ, сформирована большим числом хаббардовских фермионов $X_f^{\sigma,2i}$ и состоит из ряда узких зон. Если нас интересует небольшое энергетическое окно вблизи

E_{CT} (например, чтобы изучать ARPES), то вычисления можно упростить отбрасывая высокоэнергетические состояния из двухдырочного $|2, i\rangle$ и однодырочного $|1\sigma'\lambda\rangle$ наборов. Тогда минимальный реалистичный набор состояний, формирующий базис, будет $\{|0\rangle, |\sigma\rangle, |S\rangle, |TM\rangle\}$.

Фермиевские операторы в этом базисе будут следующим образом выражаться через X -операторы:

$$\begin{aligned} c_{fd_{x^2-y^2}\sigma} &= uX_f^{0,\sigma} + 2\sigma\gamma_x X_f^{\bar{\sigma},S}, \\ c_{fp_b\sigma} &= vX_f^{0,\sigma} + 2\sigma\gamma_b X_f^{\bar{\sigma},S}, \\ c_{fp_a\sigma} &= \gamma_a(\sigma\sqrt{2}X_f^{\bar{\sigma},T0} - X_f^{\sigma,T2\sigma}), \\ c_{fd_{z^2}\sigma} &= \gamma_z(\sigma\sqrt{2}X_f^{\bar{\sigma},T0} - X_f^{\sigma,T2\sigma}), \\ c_{fp_z\sigma} &= \gamma_p(\sigma\sqrt{2}X_f^{\bar{\sigma},T0} - X_f^{\sigma,T2\sigma}). \end{aligned} \quad (1.16)$$

Здесь $\bar{\sigma} \equiv -\sigma$, а $T2\sigma$ означает $T(+1)$ или $T(-1)$ в зависимости от значения спиновой переменной $\sigma = \pm 1/2$. Точный вид многозонного гамильтониана сильной связи (1.1) в этом базисе имеет вид двухзонной синглет-триплетной модели Хаббарда [34]:

$$\begin{aligned} H_{pd} &= \sum_f \left[\varepsilon_1 \sum_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \varepsilon_{2S} X_f^{SS} + \varepsilon_{2T} \sum_M X_f^{TMTM} \right] + \\ &+ \sum_{f \neq g, \sigma} \left[t_{fg}^{00} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} + t_{fg}^{SS} X_f^{S\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}S} + 2\sigma t_{fg}^{0S} (X_f^{\sigma 0} X_g^{\bar{\sigma}S} + h.c.) + \right. \\ &+ t_{fg}^{ST} \left\{ \left(\sigma\sqrt{2}X_f^{T0\bar{\sigma}} - X_f^{T2\sigma\sigma} \right) (vX_g^{0\sigma} + 2\sigma\gamma_b X_g^{\bar{\sigma}S}) + h.c. \right\} + \\ &\left. + t_{fg}^{TT} \left(\sigma\sqrt{2}X_f^{T0\bar{\sigma}} - X_f^{T2\sigma\sigma} \right) \left(\sigma\sqrt{2}X_g^{\bar{\sigma}T0} - X_g^{\sigma T2\sigma} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Параметры перескока (1.10) эффективной модели выражаются через микроскопические первопринципные параметры t_{pd} и t_{pp} :

$$\begin{aligned} t_{fg}^{00} &= -2t_{pd}\mu_{fg}2uv - 2t_{pp}\nu_{fg}v^2, \\ t_{fg}^{SS} &= -2t_{pd}\mu_{fg}2\gamma_x\gamma_b - 2t_{pp}\nu_{fg}\gamma_b^2, \\ t_{fg}^{0S} &= -2t_{pd}\mu_{fg}(v\gamma_x + u\gamma_b) - 2t_{pp}\nu_{fg}v\gamma_b, \\ t_{fg}^{TT} &= \frac{2}{\sqrt{3}}t_{pd}\lambda_{fg}2\gamma_a\gamma_z + 2t_{pp}\nu_{fg}\gamma_a^2 - 2t'_{pp}\lambda_{fg}2\gamma_p\gamma_a, \\ t_{fg}^{ST} &= \frac{2}{\sqrt{3}}t_{pd}\xi_{fg}\gamma_z + 2t_{pp}\chi_{fg}\gamma_a - 2t'_{pp}\xi_{fg}\gamma_p. \end{aligned}$$

Здесь μ_{fg} , ν_{fg} , λ_{fg} , ξ_{fg} и χ_{fg} - это коэффициенты, возникающие при конструировании групповых орбиталей кислорода, u , v , γ_x , γ_b , γ_a , γ_p и γ_z - это матричные элементы $\gamma_{\lambda\sigma}(p, q)$ перехода в X -представление (подробности см. в работе [34]).

Рассчитанные зонные структуры квазичастиц по основным симметричным направлениям зоны Бриллюэна $\Gamma(0, 0) - M(\pi, \pi) - X(\pi, 0) - \Gamma(0, 0)$ and $X(\pi, 0) - Y(0, \pi)$ для La_2CuO_4 и Nd_2CuO_4 показаны на Рисунке 1.2. Нуль на энергетической шкале - это не уровень Ферми, он определяется условием $\varepsilon_{d_{x^2-y^2}} = 0$.

Верх валентной зоны соответствует точке $\bar{M} = (\pi/2, \pi/2)$, в то время как дно зоны проводимости соответствует точке X . Дисперсия валентной зоны определяется гибридизацией двух зон, которые происходят либо от хаббардовских фермионов $X_f^{\bar{\sigma}S}$, либо от $X_f^{\bar{\sigma}TM}$. За гибридизацию между ними отвечает матричный элемент перескока t^{ST} в уравнении (1.17). Это фермиевские зоны, но часто в литературе их называют “синглетная зона” и “триплетная зона”. Эти названия отражают конечное двухдырочное состояние, участвующее в процессе возбуждения квазичастиц. В синглетной зоне доминирующая часть спектрального веса происходит из состояния b_{1g} , в то время как для дна зоны проводимости он происходит от $d_{x^2-y^2}$ состояния меди.

Заключение

Мы представили основные идеи метода LDA+GTB [9, 34, 100, 101]. Хотя метод и был разработан, чтобы изучить свойства ВТСП купратов, он является общим и может применяться для других систем с сильными корреляциями и моттовским диэлектрикам, как, например бороксиды FeBO_3 и VBO_3 . Одно из наиболее интересных свойств зонной структуры в методе LDA+GTB - это её сильная зависимость от внешних параметров. Это приводит, например, к возникновению внутрищелевых состояний в купратах при допировании и в кобальтатах при изменении температуры.

Метод LDA+GTB, конечно, не является универсальным. Поскольку он яв-

ляется комбинацией первопринципного и модельного подхода, невозможно выйти за пределы используемой в GTB модели. Например, отсутствие дальнего кулоновского взаимодействия не позволяет полностью описывать передопированные купраты. Естественно, это общий для всех моделей хаббардовского типа недостаток. Современная версия метода LDA+GTB не может быть использована когда параметр теории возмущений t/U возрастает и ожидается переход Мотта. Тем не менее, он очень хорошо работает в наиболее сложной для обычной зонной теории области сильных электронных корреляций.

1.2. Кобальтиты Na_xCoO_2

Внимание к слоистым кобальтитам Na_xCoO_2 возникло благодаря высоким значениям термоэдс [102]. Однако, по настоящему “горячим” объектом исследований они стали через несколько лет, после открытия необычной сверхпроводимости в соединении $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ [103]. Одна из причин состоит в том, что систематические теоретические и экспериментальные исследования этой новой сверхпроводящей системы могут помочь сопоставить механизмы сверхпроводимости в кобальтитах и традиционных ВТСП на основе купратов.

1.2.1. Кристаллическая структура и фазовая диаграмма

Кристаллическая структура базового соединения Na_xCoO_2 имеет квазидвумерный характер и состоит из электрически активных плоскостей CoO_2 . Эти плоскости разделены слоями Na, играющими роль зарядовых резервуаров (см. Рисунок 1.3) [103, 104]. Ионы кобальта формируют треугольную решётку. Например, $\text{Na}_{0.61}\text{CoO}_2$ кристаллизуется при 12 К в гексагональной структуре (группа $P6_3/mmc$) с параметрами решётки $a = 2.83176 \text{ \AA}$ и $c = 10.84312 \text{ \AA}$ [105]. Кислород размещается в высокосимметричной позиции $2d(1/3, 2/3, 3/4)$, расстояние Co-O составляет $1.9072(4) \text{ \AA}$. При интеркалировании водой молекулы H_2O располагаются по соседству с ионами Na, приводя при этом к увеличению

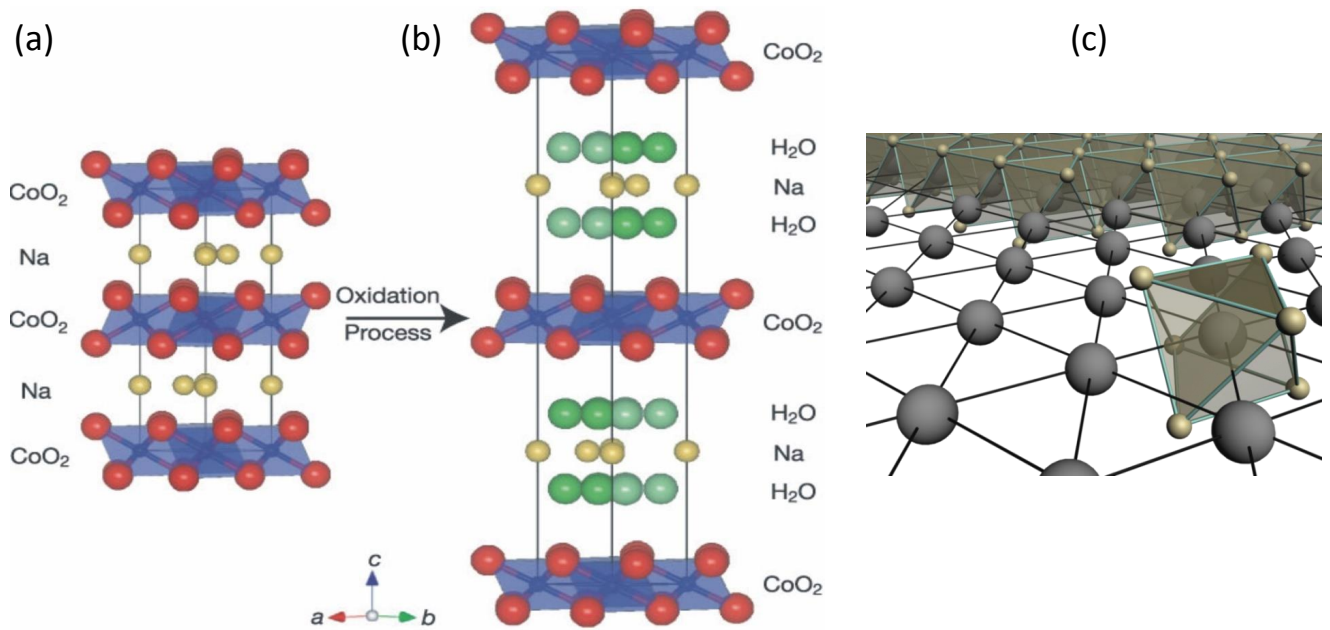


Рис. 1.3. (а) - кристаллическая структура Na_xCoO_2 и (б) - её изменение при интеркаляции водой [103]. (с) - CoO_2 слой, где большие сферы соответствуют Co , а маленькие – O .

параметра решётки c , т.е. к эффективному увеличению квазидвумерности.

Как и в случае купратов, фазовая диаграмма $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ включает несколько конкурирующих электронных фаз, отличаясь сложностью и разнообразием (Рисунок 1.4). Существенное влияние на физические свойства оказывает как дефицит ионов натрия x , так и степень гидрирования y . Помимо сверхпроводящего состояния, возникающего при интеркалировании водой, в ней присутствуют состояния с магнитным и зарядовым упорядочением, а также несколько структурно различных фаз.

С точки зрения электрической проводимости, при низких температурах $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ является хорошим металлом во всей области концентраций, кроме окрестности точки $x = 1/2$, где реализуется диэлектрическое состояние [106]. При высоких температурах, $T > 300$ К, в слоистом кобальтите возникает ионная проводимость, связанная с мобильностью ионов Na .

Одно из первых систематических исследований магнитных свойств Na_xCoO_2 в зависимости от концентрации x было выполнено в работе [106]. Со стороны малых концентраций, вплоть до $x = 1/2$, магнитное поведение

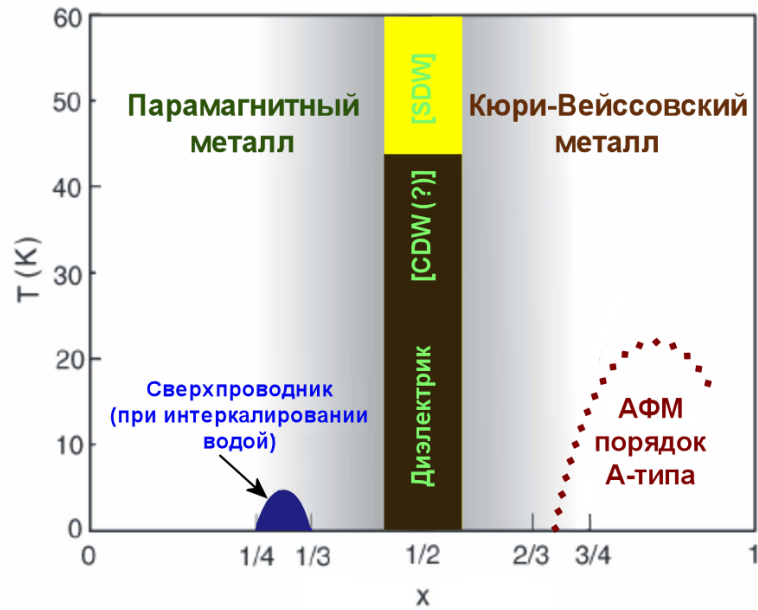


Рис. 1.4. Фазовая диаграмма $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ [22]. Сверхпроводимость возникает при конечной величине y . При $x = 0.5$ при конечных температурах имеются признаки переходов в фазу с волной спиновой плотности (Spin-Density Wave, SDW) и в фазу, напоминающую волну зарядовой плотности (Charge-Density Wave, CDW), хотя последнее ещё не подтверждено.

Na_xCoO_2 носит обычный парамагнитный характер, однако магнитная восприимчивость по величине вдвое превышает паулиевскую. В этой области концентраций реализуется и сверхпроводящее состояние при $1/4 < x < 1/3$ [104, 107]. В дальнейшем, с ростом x восприимчивость приобретает Кюри-Вейссовский характер с парамагнитной температурой Кюри примерно 70 К. При $x > 2/3$ был обнаружен переход второго рода в упорядоченную фазу с $T_m \approx 22$ К [108]. Дальнейшие исследования с помощью мюонного и нейтронного рассеяний показали, что данная фаза соответствует дальнему АФМ порядку А-типа, т.е. спины Co в плоскости упорядочены ферромагнитно с $J_{ab} = -6$ мэВ, а обмен вдоль оси c - антиферромагнитный, $J_c = 12$ мэВ [109–112]. Примечательно, что в этой же области концентраций наблюдается аномально высокая термоэдс [102, 113–115], которая подавляется магнитным полем [116]. Это может указывать на её энтропийный характер, связанный с перескоками сильно коррелированных дырок.

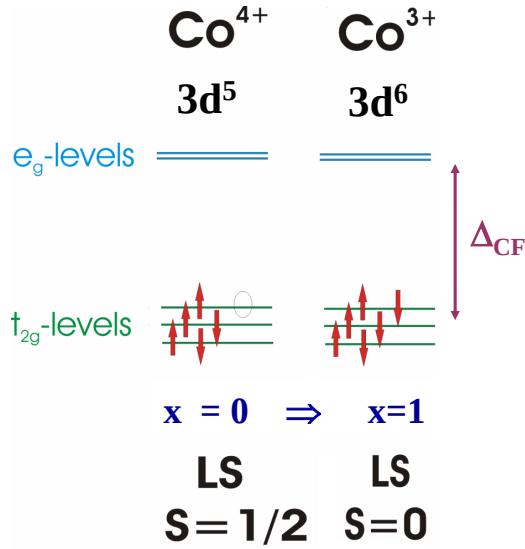


Рис. 1.5. Схема энергетических уровней Co вблизи уровня Ферми и их заполнение с допированием в случае низкоспиновой (Low-Spin, LS) конфигурации для Na_xCoO_2 . Согласно зонным расчётам величина кристаллического поля Δ_{CF} равна 2 эВ [117, 118].

1.2.2. Электронная структура

В противоположность ВТСП-купратам, где ион Cu^{2+} имеет конфигурацию $3d^9$, а дырка занимает единственную незаполненную e_g -орбиталь, кобальтиты являются существенно многоорбитальными системами. Электроны, отдаваемые ионами Na слою CoO_2 , понижают валентность кобальта от Co^{4+} ($3d^5$) до Co^{3+} ($3d^6$) при изменении x от 0 для CoO_2 до 1 для NaCoO_2 , являющегося зонным диэлектриком. Дырка на d -орбитали занимает один из t_{2g} -уровней, расположенных ниже e_g -уровней на $\Delta_{CF} \approx 2$ эВ [106], см. Рисунок 1.5. Вырождение t_{2g} уровней частично снимается тригональным кристаллическим полем, которое расщепляет их на синглет a_{1g} и два нижележащие e'_g -уровня.

Исследование электронной структуры сверхпроводящих кобальтитов ставит ряд проблем, наиболее острой из которых является несоответствие первопринципных расчётов в приближении локальной плотности потенциала (LDA) с данными ARPES (фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением). Расчёты, основанные на LDA, дают при $x = 0.33$ большую поверхность Ферми в окрестности Γ -точки зоны Бриллюэна, связанную, в основном, с a_{1g} состояни-

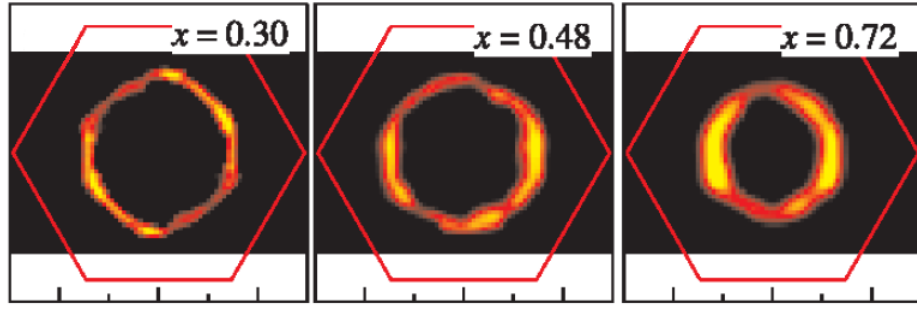


Рис. 1.6. Ферми-поверхность Na_xCoO_2 для различных концентраций x , измеренная в ARPES [124].

ями, и шесть маленьких карманов преимущественно e'_g характера в окрестности K -точек [104, 119–121]. Однако, согласно данным ARPES, в широком диапазоне концентраций Na имеет место лишь одна дырочная поверхность Ферми, расположенная вокруг Γ -точки [122–128]. Пример измеренной зависимости Ферми-поверхности от допирования приведён на Рисунке 1.6. Зоны, вклад в которые дают e'_g -орбитали, лежат ниже и никогда не пересекают уровень Ферми.

Отсутствие e'_g -карманов является неожиданным и накладывает серьезные ограничения на ряд предложенных моделей с нефононными механизмами сверхпроводимости, а также на магнитные свойства, связанные с условием нестинга [120, 129, 130]. Более того, измеренная ширина зоны квазичастиц примерно в два раза меньше, чем следует из расчётов LDA. Такое значительное противоречие между ARPES и LDA может быть разрешено одним из двух способов: включением эффектов сильных электронных корреляций за пределами LDA или переосмыслением корректности результатов ARPES. Далее мы рассмотрим оба варианта.

Из первопринципного подхода, называемого “ограниченный LDA” (“constrained LDA”), была получена величина хаббардовского отталкивания $U = 2.67$ эВ и хундовского обмена $J = 1.07$ эВ [15] для t_{2g} -орбиталей при учёте экранировки e_g -электронами в дополнение к экранировке s - и p -электронами. Учитывая, что ширина t_{2g} -зоны порядка 2 эВ, такие величины кулоновских параметров позволяют отнести слоистые кобальтиты к коррелированным

системам, хотя корреляции и не настолько сильны, как, например, в купратах.

Эффекты локального кулоновского отталкивания, рассмотренные на основе сочетания LDA с моделью Хаббарда (LSDA и LSDA+ U), действительно дают отсутствие маленьких карманов на поверхности Ферми [131]. Однако это приводит к полностью поляризованному ферромагнитному состоянию, расщепленным по спину зонам и спин-поляризованной поверхности Ферми, вдвое большей по площади. Все это противоречит экспериментальным данным. Попытка объяснения того, как сильные электронные корреляции приводят к орбитальной поляризации и сужению зоны, наблюдаемой в ARPES, проведена в работах [30, 132]. Основываясь на модели t_{2g} -зон с дисперсией из LDA расчётов, и используя многозонное приближение Гутцвиллера [56–58, 133], авторы работ [30, 132] получили, что при концентрациях $x > 0.2$ карманы на поверхности Ферми отсутствуют, так как сильное кулоновское отталкивание сдвигает e'_g -зону ниже уровня Ферми, приводя к орбитально поляризованному состоянию с единственной цилиндрической поверхностью Ферми с центром в Γ -точке. В свете этого встаёт вопрос о корректности выводов ARPES экспериментов.

В отличие от измерений ARPES, квантовые осцилляции Шубникова-де Гааза показывают наличие малых секций Ферми-поверхности как для систем с $x = 0.3$, так и для $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ [134, 135]. Как отмечают авторы работы [134], частоты квантовых осцилляций для $x = 0.3$ находятся в хорошем согласии с LDA расчётами из работы [104]. Однако эта интерпретация была отброшена ввиду того, что экспериментально наблюдаемая величина удельной теплоёмкости $\gamma_n = 12 \text{ mJK}^{-2} \text{ mol}^{-1}$ [136, 137] меньше, чем величина, получаемая из теоретических оценок в случае присутствия шести e'_g карманов. С другой стороны, новые измерения теплоёмкости приводят к значению $\gamma_n = 16.1 \text{ mJK}^{-2} \text{ mol}^{-1}$ [138], что уже не так сильно отличается от теоретических оценок. Ещё один эксперимент, показывающий наличие малых карманов - комптоновское рассеяние [139].

Таким образом, совокупность экспериментальных данных, свидетельствующих о присутствии малых e'_g карманов при $x < 2/3$, позволяет усомниться в

результатах ARPES. Пока существует единственный ответ на вопрос, почему малые карманы не видны в ARPES. Заключается он либо в экстремальной чувствительности этого метода к деталям поверхности образца [120, 139–141], либо в малой величине матричных элементов дипольных переходов для соответствующих волновых векторов. Таким образом, мы видим, что теория и эксперимент пока не дают согласующихся надежных результатов о поверхности Ферми для Na_xCoO_2 .

1.2.3. Диэлектрическое состояние вблизи $x=0.5$

Наиболее яркой и крайне необычной особенностью фазовой диаграммы $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ представляется наличие на ней узкой области, соответствующей диэлектрическому состоянию в окрестности $x = 1/2$. Этому состоянию соответствует температурная зависимость восприимчивости с двумя пиками при $T_{SDW} = 88$ К и $T_{MIT} = 53$ К [106, 142]. Электрическое сопротивление меняется монотонно при переходе через T_{SDW} , однако испытывает сильный скачок при T_{MIT} . Исследования электронной дифракции выявили наличие сверхструктуры в расположении ионов натрия [106, 142, 143].

Изначально состояние при $T < T_{SDW}$ связывали с зарядовым упорядочением Co, наведённым сверхструктурой Na. Дело в том, что при $x = 0.5$ ионы Na занимают две неэквивалентные позиции. Одна из них, обозначаемая Na1, расположена прямо над плоскостным Co, а вторая, Na2 - в середине треугольника, составленного из ионов кобальта. Если бы Na в позиции Na1 отдал все свои электроны кобальту, то последний перешёл в состояние Co^{3+} . Остальные ионы кобальта были бы в состоянии Co^{4+} со спином $S = 1/2$. Такая зарядовая сегрегация в цепочки немагнитных Co^{3+} и магнитных Co^{4+} ионов привела бы к диэлектрическому магнитному состоянию [106, 143]. Эта интерпретация, однако, не позволяет объяснить, почему диэлектрическое состояние возникает только ниже T_{MIT} , в то время как упорядочение ионов Na наблюдается и при комнатной температуре. Также не удаётся объяснить, почему T_{SDW} не совпада-

ет с T_{MIT} .

Альтернативная интерпретация была предложена на основе ЯМР экспериментов и рассеяния нейтронов [137, 144–147]. В этих экспериментах было показано, что, во-первых, зарядовое упорядочение не происходит по вышеизложенному сценарию. А именно, цепочки кобальта имеют валентности $\text{Co}^{3.5+\delta}$ и $\text{Co}^{3.5-\delta}$ с $\delta < 0.1$. Температура этого зарядового упорядочения выше T_{SDW} и равна $T_{CO} \approx 150$ К [145]. Во-вторых, валентность кобальта не меняется при переходе через SDW [144]. Таким образом, SDW не имеет прямого отношения к зарядовому упорядочению, а совокупность экспериментальных данных позволяет отнести состояние при $T < T_{SDW}$ к магнитному порядку типа волны спиновой плотности [144].

С другой стороны, в этом сценарии ситуация с переходом при T_{MIT} остаётся нерешённой. Часть ЯМР данных говорит об отсутствии зарядового упорядочения ниже этой температуры, и авторы работы [144] предлагают интерпретировать T_{MIT} как ещё один переход в состояние с волной *спиновой* плотности и такой реконструкцией Ферми-поверхности, которая приводит к малому количеству носителей. ЯМР данные другой группы позволили авторам работы [146] говорить о наличии при T_{MIT} перехода в состояние волны *зарядовой* плотности. Очевидно, что для окончательного решения вопроса о природе перехода при $T_{MIT} = 53$ К в $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ необходимы дальнейшие экспериментальные исследования.

1.2.4. Природа сверхпроводимости и магнетизма

Поведение магнитной восприимчивости Na_xCoO_2 приобретает черты, свойственные магнитоупорядоченным веществам, лишь при высоких концентрациях ионов Na ($x > 0.75$). В этой области Na_xCoO_2 представляет собой А-тип антиферромагнитного металла с ферромагнитным упорядочением спинов Co в плоскости и антиферромагнитным между плоскостями. Согласно данным ЯМР, при концентрациях $x > 0.67$ в металлической области значительны ферромагнит-

ные спиновые флуктуации [148], а по данным ЯКР в сверхпроводящих образцах с $0.25 > x > 0.35$ выше T_C наблюдаются существенные антиферромагнитные флуктуации [149, 150]. Эти факты имеют особое значение для $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$, поскольку именно спиновые флуктуации могут выступать в качестве возможного механизма куперовского спаривания в оксидных квазидвумерных соединениях переходных металлов.

Наличие дальнего магнитного порядка только в узкой области концентраций ($0.75 > x > 0.9$) представляет собой ещё одну загадку. Дело в том, что согласно первопринципным LDA расчётам [117, 118], ферромагнитное основное состояние должно реализоваться в широкой области концентраций, от $x = 0.3$ до $x = 0.7$. Это противоречит экспериментальным данным. Было предложено несколько теорий, объясняющих наблюдаемое поведение магнитного порядка. Теория магнетизма коллективизированных электронов, основанная на металлическом поведении слоистых кобальтитов, будет рассмотрена в Главе 3. Также существует подход, основанный на аналогии с манганитами и трёхмерными кобальтитами LaCoO_3 . В работе [151] исследовался сценарий возникновения магнитного полярона, приводящего к ферромагнитным флуктуациям при высоких концентрациях допирования. Этот сценарий базируется на возможности реализации высокоспинового (High Spin, HS) состояния в CoO_6 октаэдре, что, однако, маловероятно в случае данного слоистого кобальтита ввиду большой (~ 2 эВ) величины расщепления t_{2g} и e_g уровней, и относительной малости хундовского обмена (~ 1 эВ). Всё это приводит к положению энергии высокоспинового состояния на 1.75 эВ выше низкоспинового (Low Spin, LS) состояния [15] и, следовательно, к стабилизации низкоспинового состояния как основного при всех концентрациях Na. В более поздней работе [152] было сделано предположение, что даже в случае реализации LS-состояния как основного, динамические промежуточноспиновое (Intermediate Spin, IS)- и HS-состояния могут оказывать влияние на магнитные свойства квазичастиц.

Ещё один интересный вопрос связан с соотношением плоскостного и меж-

плоскостного обменных взаимодействий. Из анализа данных нейтронного рассеяния [109–112] было найдено, что $J_{ab} = -6$ мэВ, а $J_c = 12$ мэВ. Данный результат на первый взгляд противоречит ожидаемому в квазидвумерной системе. Однако, как было показано в работе [153], магнитное взаимодействие вдоль оси c усилено за счёт присутствия орбиталей Na. Поэтому, несмотря на двумерную электронную структуру Na_xCoO_2 , его магнитные свойства остаются существенно трёхмерными. Интересно отметить, что это свойство нарушается при добавлении слоев H_2O , что приводит к двумерным магнитным флуктуациям.

Дополнительной причиной подавления магнитного момента в плоскости может являться эффект фрустраций. Дело в том, что плоскостная решётка ионов Co является треугольной. В этом случае для АФМ взаимодействия на ближайших соседях и магнитной изинговской анизотропии дальний АФМ порядок будет подавлен. Это приведет к тому, что упорядочение будет определяться ферромагнитными (ФМ) взаимодействиями между следующими за ближайшими соседями. Соответственно, обменный интеграл, получаемый из анализа нейтронного рассеяния в упорядоченной фазе, будет ФМ в плоскости. При этом в неупорядоченной фазе АФМ флуктуации из-за обмена между ближайшими соседями будут играть определяющую роль. Описанная ситуация характерна для широкого класса магнитно-фрустрированных систем, включающих как оксиды переходных металлов, так и интерметаллические соединения.

Что касается сверхпроводимости в $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$, долгое время отсутствовало полное согласие в отношении симметрии сверхпроводящей щели $\Delta_{\mathbf{k}}$. Исследования удельной теплоёмкости [136, 154–156] и измерения глубины проникновения с помощью релаксации спина мюона (Muon Spin Relaxation, μSR) [157] выявили наличие линий нулей $\Delta_{\mathbf{k}}$ на Ферми поверхности. Такое же заключение было сделано на основе измерений спин-решёточной релаксации $1/T_1T$ в ЯКР, где были найдены степенная температурная зависимость и отсутствие пика Хебеля-Слихтера, характерного для s -типа сверхпроводника [149, 150, 156, 158, 159].

В то же время были обнаружены сильные АФМ флуктуации выше T_c . Ранние работы по исследованию температурной зависимости сдвига Найта $K(T)$ свидетельствовали в пользу спин-триплетной симметрии сверхпроводящей щели, так как сдвиг Найта в направлении, перпендикулярном слою CoO_2 , практически не зависел от температуры [160, 161]. Такое поведение привело к серии теоретических работ, рассматривающих триплетную сверхпроводимость в $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ [120, 129, 130, 162–164]. Однако современные высокоточные ЯМР данные [165, 166] выявили уменьшение сдвига Найта с температурой по всем направлениям, что однозначно указывает на спин-синглетное куперовское спаривание.

Согласно теоретико-групповому анализу, симметрии синглетного параметра порядка на треугольной решётке классифицируются как

- s -тип ($\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0$),
- расширенный s -тип ($\Delta_{\mathbf{k}} = 2/3\Delta_0 [\cos k_y + 2 \cos (k_x\sqrt{3}/2) \cos (k_y/2)]$),
- $d_{x^2-y^2}$ -тип ($\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 [\cos k_y - \cos (k_x\sqrt{3}/2) \cos (k_y/2)]$),
- d_{xy} -тип ($\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 [\sqrt{3} \sin (k_x\sqrt{3}/2) \sin (k_y/2)]$),
- $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -тип,

а также более высокие гармоники (см. работу [167] и ссылки в ней). Оба $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy} типы симметрий характеризуются присутствием линий нулей $\Delta_{\mathbf{k}}$ на Ферми-поверхности. При этом, для $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -типа симметрия по отношению к обращению времени оказывается нарушенной.

Для неискажённой тетрагональной симметрии плоскости CoO_2 все три d -типа вырождены. Однако, из-за отсутствия нулей на Ферми-поверхности, $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -симметрия является более энергетически выгодной. До сих пор не было обнаружено нарушение симметрии по отношению к обращению времени [168, 169]. В общем случае, совместное влияние примесей и конкурирующих нестабильностей, таких, как куперовское спаривание во втором канале и

нарушение симметрии решётки, могут снять вырождение трёх d -типов симметрии [170]. Это может быть как раз случаем слоистых кобальтитов, где расположение Na вносит беспорядок при концентрации $x = 0.33$ [143].

Сравнительный анализ сверхпроводимости в ВТСП купратах и слоистых кобальтитах, по-видимому, указывает на спин-флуктуационный механизм куперовского спаривания за счёт обмена двумерными АФМ флуктуациями в обеих системах, что позволяет легко объяснить d -тип симметрии параметра порядка. При этом различия в величинах T_c в таком сценарии определяется различием величин обменов в купратах и кобальтитах. Роль воды в кобальтитах заключается в расталкивании CoO_2 -плоскостей, что приводит к существенно двумерным магнитным флуктуациям, аналогичным присутствующим в ВТСП. Однако для окончательного выяснения природы сверхпроводимости в обеих системах необходимо также выяснить роль электрон-фононного взаимодействия, которое, как известно, играет существенную роль в купратах (см., например, обзор [171] и работы [172, 173]). Что касается Na_xCoO_2 , величины электрон-фононного взаимодействия были получены из анализа зависимости спектров комбинационного рассеяния от допирования [174]. Хотя полученное значение T_c за счёт электрон-фононного взаимодействия близко к экспериментальному, в этом случае остаётся невыясненным вопрос о том, почему сверхпроводимость реализуется только при интеркаливании водой и в узкой области концентраций допирования.

1.3. Соединения железа: пниктиды и халькогениды

Совсем недавно на поле высокотемпературной сверхпроводимости, где последние двадцать лет безраздельно доминировали купраты, появился новый игрок – соединения железа [175]. Хотя температуру жидкого азота их критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние, T_c , не пересекла, но уже в конце 2008 г., меньше чем через год после открытия этого нового класса, достигла 56К. На сегодняшний день рекорд среди монокристаллов принадле-

жит $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ с $T_c = 57.5\text{K}$ [176], а большие надежды внушает открытие сверхпроводимости с $T_c \sim 60\text{K}$ в однослойных плёнках FeSe [177, 178]. Вообще, в соединениях железа, обладающих сверхпроводимостью, можно выделить два класса - пниктиды и халькогениды. Базовым элементом везде является квадратная решётка железа, в большинстве слабодопированных соединений подверженная орторомбическим искажениям при температурах, сравнимых с температурой перехода в антиферромагнитную (АФМ) фазу T_{SDW} . В первом классе железо находится в тетраэдрическом окружении мышьяка или фосфора, во втором - селена, теллура или серы. Пниктиды бывают однослойные типа 1111 (LaFeAsO , LaFePO , $\text{Sr}_2\text{VO}_3\text{FeAs}$ и т.д.) и 111 (LiFeAs , LiFeP и др.), а также типа 122 содержащие два слоя FeAs на элементарную ячейку (BaFe_2As_2 , KFe_2As_2 и т.п.). К халькогенидам относятся соединения типа 11 ($\text{Fe}_{1-\delta}\text{Se}$, $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$, плёнки FeSe) и 122 (KFe_2Se_2). В настоящее время существует множество обзоров, в которых подробно обсуждаются структура и физические свойства соединений железа, например [10, 179–189].

Характерная особенность соединений железа по сравнению с, например, купратами, состоит в качественном, а иногда даже и количественном, согласии измеряемой в ARPES (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy - фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением) и с помощью квантовых осцилляций Ферми-поверхности с вычисленной первопринципными методами. Это, а также малая величина магнитного момента на железе (из нейтронных исследований $\sim 0.3\mu_B$) в пниктидах и отсутствие изоляторного состояния в недопированном случае, позволяет говорить о малой или средней величине электронных корреляций. Поэтому естественной начальной точкой описания скорее является модель делокализованных электронов, а не Мотт-Хаббардовский предел и модели типа $t - J_1 - J_2$.

1.3.1. Электронная структура

Основные свойства электронной структуры соединений железа

Основной кристаллографический элемент соединений железа - это плоскость FeAs (где вместо As могут быть P, Se или Te) с квадратной $a \times a$ плоскостью ионов Fe и двумя квадратными $\tilde{a} \times \tilde{a}$ плоскостями As выше и ниже её ($\tilde{a} = a\sqrt{2}$). Минимальная элементарная ячейка всей плоскости FeAs есть, следовательно, $\tilde{a} \times \tilde{a}$ и включает две формульные единицы. В некоторых, но не всех, случаях низкоэнергетическая часть электронной структуры может быть “развёрнута” в два раза большую зону Бриллюэна, соответствующую элементарной ячейке $a \times a$, так, что реальная зонная структура может быть получена с помощью “свёртки” двумерной зоны Бриллюэна. При этом точки $X = (\pi/a, 0)$ и $Y = (0, \pi/a)$ из “развёрнутой” зоны переходят в одну точку $\tilde{M} = (\pi/\tilde{a}, \pi/\tilde{a})$ в малой зоне Бриллюэна. В дальнейшем зону Бриллюэна (Brillouin Zone, BZ), соответствующую двум и одному атомам Fe на ячейку мы будем обозначать как 2-FeBZ и 1-FeBZ, соответственно.

Несмотря на большое разнообразие кристаллических структур и химических составов, все соединения железа проявляют одинаковые главные особенности электронной структуры:

1. В немагнитном состоянии зонная структура имеет полуметаллический тип, где две или более зон пересекают уровень Ферми вблизи точки Γ и две электронные зоны пересекают уровень Ферми вблизи точки $\tilde{M}$.

2. Две дырочные зоны сформированы орбиталями железа xz и yz , которые вырождены (без спин-орбитального взаимодействия) в точке Γ , но расщепляются (и получают небольшой вклад от орбитали z^2) более менее однородно вдали от неё. Две электронные зоны сформированы орбиталями xz и yz , соответственно, с добавлением вклада от орбитали xu .

3. Как результат, вдали от экстремального допирования дырками или электронами, когда исчезают электронные или дырочные Ферми-поверхности, соот-

ветственно, всегда присутствуют по крайней мере две дырочные Ферми-поверхности и две электронные, которые сильно разнесены в обратном пространстве. Более того, из соответствующие центры отделены друг от друга точно на $\mathbf{Q} = (\pi/\tilde{a}, \pi/\tilde{a}) = (\pi/a, 0)$. В общем случае Ферми-поверхности имеют достаточно разные формы, так что невозможно говорить о хорошем нестинге, только о квазинестинге.

С другой стороны, многие детали электронной структуры варьируются от материала к материалу. Например, в некоторых материалах на уровень Ферми может выходить ещё одна дырочная зона, которая может иметь орбитальный z^2 -характер, т.е. являться существенно трёхмерной, или xy -характер, т.е. даже более двумерный характер, чем зоны xz/yz .

Различные соединения железа могут иметь различный уровень допирования как дырками, так и электронами. Тем не менее, практически во всей области составов топология Ферми-поверхности сохраняется. Исключения составляют система KFe_2As_2 , где электронные Ферми-карманы вблизи точки X исчезают, а дырочные карманы вблизи точки Γ существенно увеличиваются, и система KFe_2Se_2 , в которой исчезают дырочные карманы и остаются только электронные. Также стоит помнить, что в сильно анизотропных системах размер Ферми-поверхности слабо связан с соответствующей плотностью состояний на уровне Ферми.

Ограничения первопринципных расчётов

Первопринципные расчёты были очень важны в начале эры соединений железа и они дали толчок к возникающему пониманию физики куда больше, чем в случае купратов. В соединениях железа они успешно предсказали правильную топологию Ферми-поверхности [190] и корректный магнитный порядок [191]. Наиболее успешное предсказание относительно симметрии параметра порядка было сделано на основе расчётов зонной структуры [191]. Эти факты существенно улучшили репутацию зонной теории в контексте сверхпроводимости,

но стоит помнить что, хотя теория функционала плотности (Density Functional Theory, DFT) и не является средством шарлатанов, она и не панацея, равно как и её обобщения типа DFT+DMFT и другие. Далее мы перечислим наиболее существенные недостатки и ограничения расчётов в DFT в приложении к соединениям железа.

DFT по построению является теорией среднего поля (но не низкоэнергетической теорией, как иногда некорректно утверждают). Это более сложная теория среднего поля, чем многие другие, поскольку она включает все корреляционные эффекты и интеграл от всех флуктуаций в энергетический функционал (и, следовательно, в потенциал среднего поля). С другой стороны, существующие реализации DFT, такие, как приближение локальной плотности или обобщённое градиентное приближение, по построению включают в себя только те корреляции и те флуктуации, которые присутствуют в однородном электронном газе при плотностях, сравнимых с плотностями электронов в настоящих твёрдых телах. Однородный электронный газ при таких плотностях очень далёк от магнетизма и ещё более далёк от электронной локализации - вигнеровской кристаллизации. Соответствующая физика, следовательно, отсутствует, когда DFT используется с перечисленными “локальными” приближениями. Причины отсутствующей физики можно разделить на два класса: 1) одноузельные кулоновские взаимодействия, также называемые хаббардовскими, которые включены в очень ограниченном виде на уровне стонеровских магнитных взаимодействий, отражающих первое правило Хунда, и 2) квантовые критические флуктуации, примером которых являются дальнодействующие ферромагнитные флуктуации в почти ферромагнитных металлах. Признаком первых является недооценка тенденции к магнетизму в DFT-расчётах, а вторых - переоценка такой тенденции. В купратах DFT-расчёты подвержены первой проблеме, в соединениях железа - в основном второй, хотя и первая также присутствует.

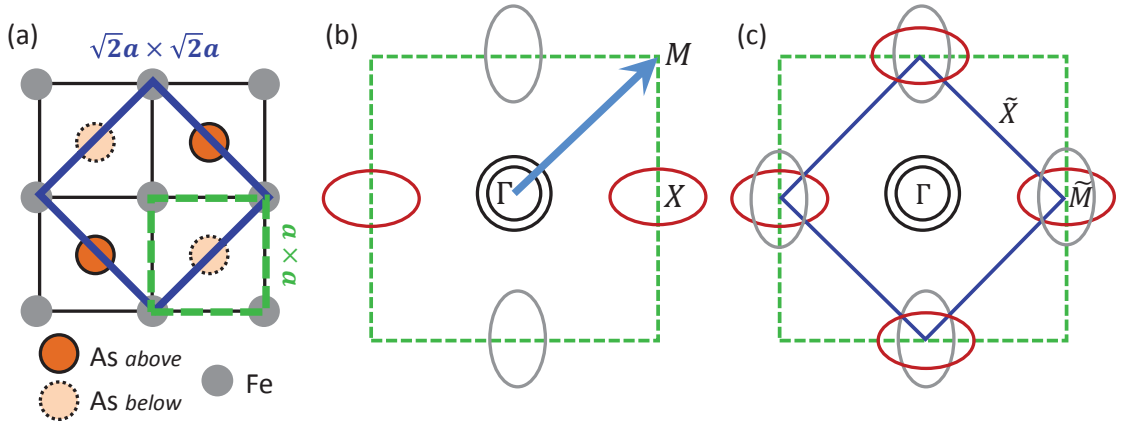


Рис. 1.7. (a) Решётка FeAs, где отмечены положения As выше и ниже плоскости Fe. Пунктирным зелёным и сплошным синим квадратами отмечены элементарные ячейки, содержащие один и два атома Fe, соответственно. (b) Схематичная двумерная Ферми-поверхность в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe (1-FeBZ), чьи границы отмечены зелёным пунктирным квадратом. Стрелкой обозначен волновой вектор свёртки $\mathbf{Q}_F$. (c) Ферми-поверхность в “свёрнутой” зоне Бриллюэна (2-FeBZ), чьи границы обозначены синим сплошным квадратом.

Минимальные зонные модели

На основе зонной структуры из DFT-расчётов можно сформулировать упрощённые модели, которые затем можно изучать сложными теоретическими методами, как, например, формализм функций Грина. Всегда существует баланс между сложностью модели и физическими эффектами, которые она описывает. Далее мы обсудим несколько наиболее популярных моделей в порядке увеличения их сложности.

Итак, согласно DFT, соединения железа являются существенно многозонными системами и минимальная модель должна включать дырочные и электронные зоны. Первая сложность возникает от наличия As, расположение плоскостей которого над и под плоскостью железа приводит к удвоению элементарной ячейки. Соответствующая 2-FeBZ в два раза меньше 1-FeBZ и называется “свёрнутой зоной Бриллюэна”, см. Рисунок 1.7. В простейшем случае однослойных соединений железа волновой вектор свёртки двумерный и равен $\mathbf{Q}_F = (\pi, \pi)$. Большинство экспериментальных результатов и зонных структур

в DFT приводятся в 2-FeBZ (“свёрнутая зона”), поскольку она и является правильной с кристаллографической точки зрения. Однако, результаты некоторых экспериментов, чувствительных к позициям Fe, как, например, нейтронное рассеяния на моментах железа, могут иметь смысл в 1-FeBZ (“несвёрнутая зона”). С точки зрения теории, достоинство использования этой зоны в простоте, поскольку число зон в два раза меньше. С точки зрения симметрии, можно думать о высоте мышьяка как о возмущении: если $z_{As} = 0$, то электронная структура корректно воспроизводится в 1-FeBZ, а при увеличении z_{As} процедура “развёртки” становится всё менее и менее обоснованной со структурной точки зрения. Несмотря на то, что смещение атомов As от плоскости Fe не мало, использование зонной структуры только для Fe в 1-FeBZ часто является хорошим приближением, поскольку DFT-расчёты говорят, что зонная структура вблизи уровня Ферми в основном происходит от d -зон железа, а p -зоны мышьяка лежат примерно на 2 эВ ниже [190, 192].

Самой простой моделью, в которой учитываются различные электронные и дырочные Ферми-поверхности, будет модель параболической дисперсии в 1-FeBZ [193, 194],

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{i=\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2} \varepsilon_{\mathbf{k}}^i c_{i\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{i\mathbf{k}\sigma}. \quad (1.18)$$

Здесь $c_{i\mathbf{k}\sigma}$ - это оператор уничтожения электрона с импульсом $\mathbf{k}$, спином σ и зонным индексом i , $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha_{1,2}} = -\frac{\mathbf{k}^2}{2m_{1,2}} + \mu$, $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\beta_1} = \frac{(k_x - \pi/a)^2}{2m_x} + \frac{k_y^2}{2m_y} - \mu$, and $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\beta_2} = \frac{k_x^2}{2m_x} + \frac{(k_y - \pi/a)^2}{2m_y} - \mu$ - это дисперсии дырочной α_i и электронной β_i зон.

Электронные карманы должны отличаться, поскольку они расположены в различных точках зоны Бриллюэна. Но так как два дырочных кармана вблизи точки Γ близки по размеру, можно описать некоторую физику, если рассматривать их приближённо как одну зону. После процедуры “свёртки” в такой модели получается топология Ферми-поверхности, которая согласуется с результатами DFT-расчётов, см. Рисунок 1.7. Двухзонная модель полезна для качественного описания физики вблизи уровня Ферми такой, как, например, магнитная

восприимчивость или формирование волны спиновой плотности. Простейшие обобщения включают модели сильной связи в 2-FeBZ [24] или в 1-FeBZ [195]. В таких моделях корректно воспроизводятся Ферми-поверхности и Ферми-скорости, но не орбитальный характер зон.

Как показали ещё самые первые DFT-расчёты [190, 191, 196], весьма неплохо согласующиеся с результатами ARPES и измерений квантовых осцилляций, вблизи уровня Ферми доминируют $3d^6$ состояния Fe^{2+} . Притом, все пять орбиталей, $d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$, d_{xy} , d_{xz} и d_{yz} лежат вблизи или на поверхности Ферми. Такая ситуация приводит помимо многозонности к существенной “многоорбитальности” низкоэнергетической электронной структуры, которую в однозонной и приведённой выше двухзонной моделях описать уже невозможно.

Возможная минимальная модель содержит две орбитали - d_{xz} и d_{yz} [197]. Достоинства её в том, что будучи относительно простой, она довольно хорошо воспроизводит орбитальный характер Ферми-поверхности: карманы $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$ имеют доминирующий вклад орбиталей d_{xz} и d_{yz} , соответственно, а дырочные карманы являются смесью этих орбиталей. Недостатков у неё, к сожалению, довольно много - неправильные величины Ферми-скоростей и неправильная дисперсия зон вблизи и вдали от уровня Ферми, отсутствие вырождения зон в точке $(0, 0)$ в противоречии с симметрией волновых функций в DFT, а также отсутствие вклада от d_{xy} -орбиталей.

Следующим шагом в получении более реалистичной модели был учёт всех пяти t_{2g} -орбиталей железа [199, 200]. Так, например, в пятиорбитальной модели из работы [200], довольно хорошо воспроизводящей результаты DFT-расчётов [201], Ферми-поверхность состоит из четырёх карманов, двух дырочных в районе точки $(0, 0)$, и двух электронных в районе точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$, см. Рисунок 1.8. Такая геометрия в $\mathbf{k}$ -пространстве приводит к возможности возникновения волны спиновой плотности (SDW - Spin-Density Wave) из-за нестингга между дырочной и электронной Ферми-поверхностями на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ или $(0, \pi)$. Недопированный материал имеет полностью заполненные

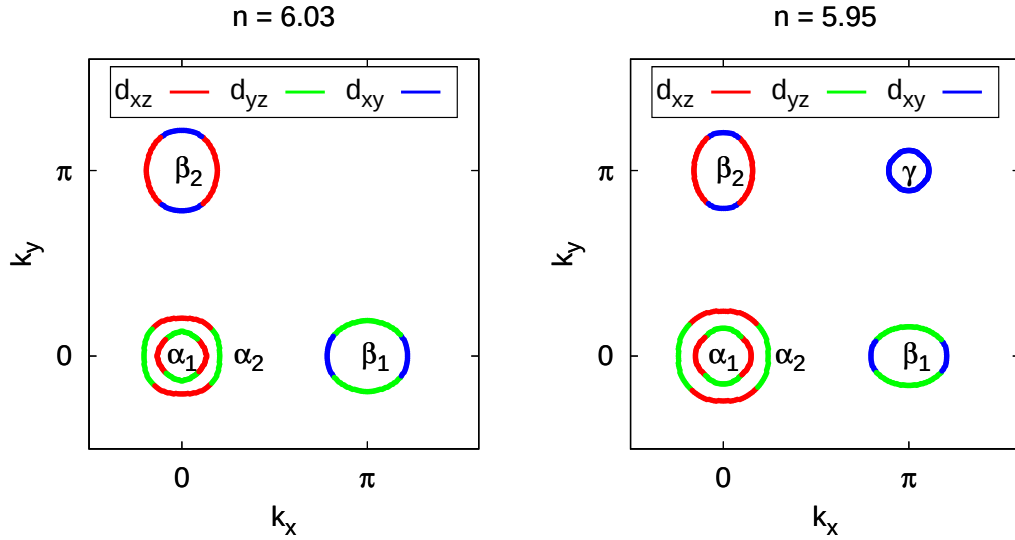


Рис. 1.8. Ферми-поверхность в пятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe на ячейку, при заполнении $n = 6.03$ (слева) и $n = 5.95$ (справа). разные цвета отражают главный орбитальный вклад (красный= d_{xz} , зелёный= d_{yz} , синий= d_{xy}). Дырочная Ферми-поверхность γ возникает при $\sim 1\%$ допирования дырками [198].

орбитали d^6 , что в этой модели соответствует числу электронов $n = 6$. Отметим, что при дырочном допировании с $n = 5.95$, также показанном на Рисунке 1.8, возникает дополнительная Ферми-поверхность γ вокруг точки (π, π) . При увеличении допирования x дальний SDW порядок исчезает. Если это электронное допирование, то выше определённого x дырочные карманы исчезнут и останутся только электронные, что соответствует $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ и монослоям FeSe [178]. При увеличении концентрации дырок сначала возникает новый дырочный карман вокруг точки (π, π) , а затем исчезают электронные Ферми-поверхности. Представителем этой ситуации является KFe_2As_2 . То, что максимальные вклады в зоны на Ферми-поверхности дают $d_{xz,yz}$ и d_{xy} орбитали подтверждается спектрами ARPES [202–204]. При этом наличие нескольких карманов и много-орбитальный характер зон существенно влияют на картину сверхпроводящего спаривания.

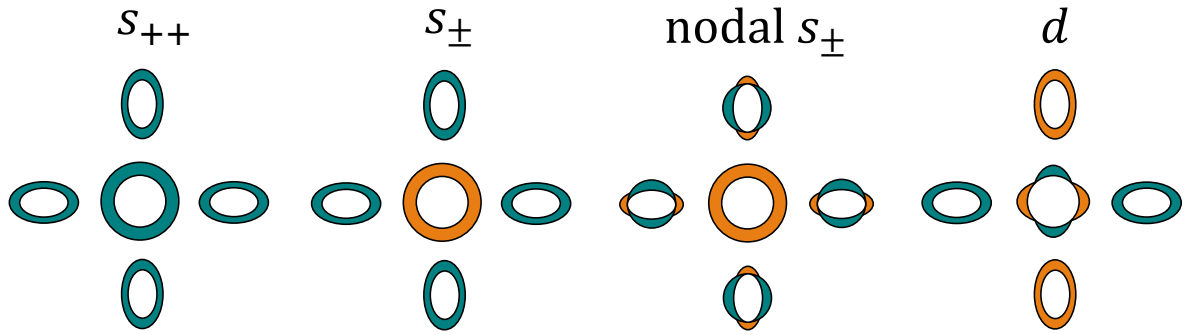


Рис. 1.9. Схематическое изображение обсуждаемых в соединениях железа вариантов параметра порядка, представленных в двумерной зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe на элементарную ячейку. Различные цвета означают различные знаки параметра порядка.

1.3.2. Симметрия и структура параметра порядка

Далее мы сосредоточимся на вопросе симметрии и структуры параметра порядка сверхпроводящего состояния. При изучении купратов $d_{x^2-y^2}$ -симметрия параметра порядка со структурой $\cos k_x - \cos k_y$ эмпирически была установлена довольно быстро после появления образцов высокого качества с помощью измерений глубины проникновения, ARPES, ЯМР и фазочувствительных джозефсоновских туннельных экспериментов. А после нескольких лет интенсивных исследований соединений железа так и не был достигнут подобный консенсус относительно универсальной структуры параметра порядка. Более того, существуют свидетельства того, что относительно небольшие изменения зонной структуры могут привести к разнообразным структурам параметра порядка, включая состояния с линиями нулей и полной щелью на Ферми-поверхности. В большинстве соединений железа класс симметрии вполне может относиться к представлению A_{1g} (обобщённый s -тип симметрии) с возможным изменением знака параметра порядка между различными Ферми-поверхностями. Выяснение характера симметрии сверхпроводящего основного состояния и детальной структуры параметра порядка должны указать на микроскопический механизм спаривания в соединениях железа и, следовательно, показать дорогу к более глубокому пониманию явления высокотемпературной сверхпроводимости.

Групповая теоретическая классификация параметра порядка в необычных сверхпроводниках достаточно сложна и приведена, например, в работе [205]. Здесь мы представим самую простую картину, относящуюся к обсуждению симметрии и структуры параметра порядка в соединениях железа. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия полный спин куперовской пары хорошо определён и может быть либо $S = 1$, либо $S = 0$. Самый простой и наиболее точный способ проверить, является ли состояние спин-триплетным - это измерение сдвига Найта. Такие эксперименты были сделаны на различных соединениях железа, включая $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ [206], $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ [207], $\text{PrFeAsO}_{0.89}\text{F}_{0.11}$ [208], $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ [209, 210], LiFeAs [211, 212] и $\text{BaFe}_2(\text{As}_{0.67}\text{P}_{0.33})_2$ [213], и было обнаружено, что сдвиг Найта уменьшается во всех кристаллографических направлениях. Такое наблюдение исключает возможность существования триплетной симметрии, такой, как p -тип или f -тип. Также существует несколько способов определить нарушающую симметрию по отношению к обращению времени состояние и киральность, но самым простым является, вероятно, μSR -спектроскопия. В киральных сверхпроводниках при нарушении баланса между двумя сопряжёнными состояниями, что должно происходить вблизи кристаллографических дефектов, возникают спонтанные орбитальные токи, которые должны наблюдаться в μSR . Такие эффекты были обнаружены, например, в Sr_2RuO_4 [214], но не в соединениях железа [215]. В принципе, киральное состояние можно получить из двух одномерных представлений, например, так называемое состояние $d + id'$ (отметим, что в принципе возможное состояние $s + id$ нарушает симметрию по отношению к обращению времени, но не является киральным). Однако, при этом необходимо существование различных температур перехода для каждого из представлений, а поскольку это не наблюдалось, мы далее не будем обсуждать такую возможность.

Исключив спин-триплетные и киральные состояния сфокусируемся теперь на простой тетрагональной точечной группе симметрии. В трёхмерной тетра-

гональной системе теория групп разрешает только пять одномерных неприводимых представлений в соответствии с тем, как параметр порядка преобразуется при вращении на 90° и других операциях тетрагональной группы: A_{1g} (“ s -волна”), B_{1g} (“ d -волна”, $x^2 - y^2$), B_{2g} (“ d -волна”, xy), A_{2g} (“ g -волна”, $xy(x^2 - y^2)$) и E_g (“ d -волна”, xz, yz). На Рисунке 1.9 показаны две из таких симметрий: s -тип и $d_{x^2-y^2}$ -тип. Отметим, что состояния s_{++} и $s_{\pm}$ представляют одну и ту же симметрию, т.е. ни одно из них не меняет знак при вращении кристаллической оси на 90° . С другой стороны, состояния d -типа меняют знак при вращении на 90° . Отметим также, что само существование дырочных и электронных карманов приводит к дополнительной неоднозначности в структуре знаков для различных состояний. В дополнение к глобальному изменению знака, что эквивалентно калибровочному преобразованию, могут быть индивидуальные вращения каждого кармана, которые сохраняют симметрию. Например, если в случае d -симметрии из Рисунка 1.9 вращать параметр порядка на дырочном кармане на 90° , но фиксировать знаки на электронных карманах, то это всё ещё будет состояние B_{1g} . Состояния B_{2g} , не показанные на Рисунке, также разрешены по симметрии и имеют нули на электронных карманах. Более сложные функциональные зависимости параметра порядка с различными относительными фазами становятся возможны при наличии большего количества карманов и при учёте трёхмерия.

Перечисленные свойства *симметрии* стоит отличать от *структуры* параметра порядка. Последний термин мы используем для обозначения $\mathbf{k}$ -зависимости параметра порядка в данном классе симметрии. Параметры порядка одной и той же симметрии могут иметь различные структуры, что также показано на Рисунке 1.9, где показаны три различных типа s -симметрии. Изотропные, с полной щелью состояния s_{++} и $s_{\pm}$ отличаются только относительной фазой π между дырочными и электронными состояниями в последнем случае. С другой стороны, в нодальном s -состоянии параметр порядка равен нулю в отдельных точках на электронных карманах. Это состояние, которое мы в

дальнейшем иногда будем называть “нодальным $s_{\pm}$ -состоянием”, характеризуется тем, что знак параметра порядка на дырочных карманах противоположен знаку усреднённого параметра порядка на электронных карманах. Нули такого типа иногда называют “случайными”, поскольку их возникновение не обусловлено симметрией, а деталями куперовского взаимодействия. Следовательно, они могут исчезнуть непрерывным образом, приводя к s_{++} - или к $s_{\pm}$ -состоянию.

***d* или *s*?**

Стоит отметить, что хотя d -тип не обязательно подразумевает существование нулей щели, вместе с квазидвумерной Ферми-поверхностью, центрированной на линии $\Gamma - Z$, такие нули неизбежны: либо вертикальные линии нулей для симметрий A и B , либо горизонтальные для симметрии E -типа. Такие поверхностно-чувствительные методы, как ARPES и туннельные эксперименты, показывают наличие полной щели без линий нулей и, по крайней мере некоторые, объёмно-чувствительные методы показывают экспоненциальное поведение при низких температурах, что также указывает на полную щель.

Существуют также прямые эксперименты, противоречащие d -типу. В представлениях d -типа, B_{1g} и B_{2g} , по симметрии не должен возникать джозефсоновский ток, когда они находятся в слабой связи со сверхпроводником s -типа, если ток течёт точно в направлении оси z . Однако, такой ток наблюдался в кристаллах системы 122 [216].

Ещё одно доказательство происходит из так называемого аномального эффекта Мейсснера или эффекта Воллебена. Этот эффект предсказали ещё в начале эры купратов [217] и он с тех пор всегда наблюдался в сверхпроводниках d -типа. Кратко, этот эффект возникает в поликристаллических образцах со случайно ориентированными гранулами. В сверхпроводнике d -типа ожидается, что примерно 50% слабых связей будут иметь нулевой фазовый сдвиг, а 50% будут иметь фазовый сдвиг π . Можно показать, что в этом случае отклик на слабое магнитное поле будет парамагнитным, т.е. противоположен стандартному

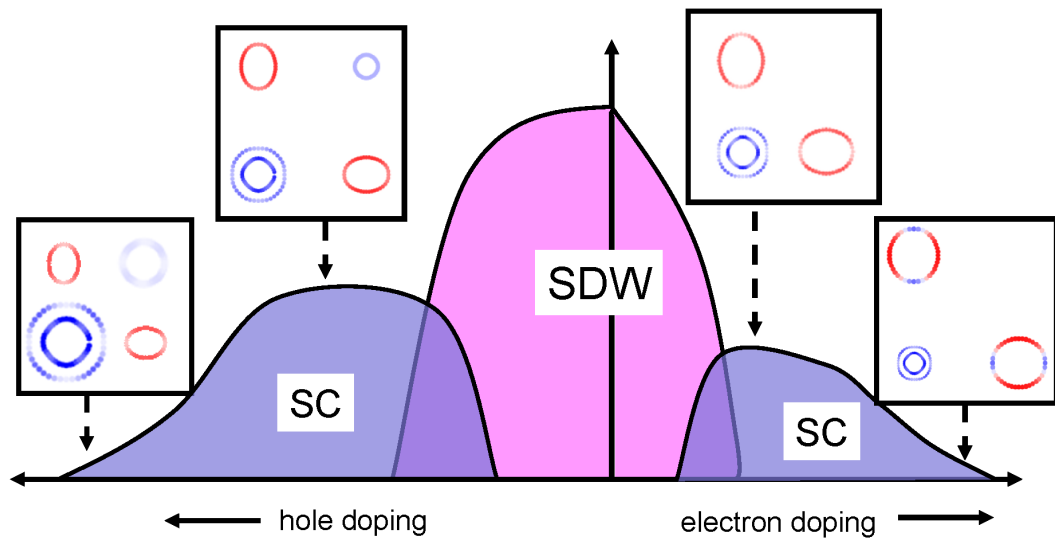


Рис. 1.10. Схематическая фазовая диаграмма соединений железа, где при различных уровнях допирования показаны параметры порядка, получающиеся из двумерной теории спаривания за счёт спиновых флуктуаций. Знак параметра порядка на Ферми-поверхности отмечен цветом: красный=+, синий=−.

диамагнитному отклику сверхпроводника. Этот эффект искали в соединениях железа [218], но не нашли.

Описанный набор доказательств однозначно указывает на то, что симметрия скорее *s*-типа, а не *d*-типа. Однако, стоит отметить, что прямой тест, подобный сделанному в купратах, а именно, эксперимент на монокристаллах с 90° джозефсоновскими контактами, формирующими замкнутый круг, всё ещё отсутствует, хотя он крайне желателен, чтобы поставить точку в этом вопросе. Также стоит иметь в виду, что нет такого закона природы, который бы запрещал различным соединениям железа иметь различные симметрии параметра порядка, хотя предыдущий опыт с другими сверхпроводниками не подтверждает такое заключение. Действительно, существуют теории, говорящие о том, что хотя большинство соединений железа имеют симметрию *s*-типа, материалы с необычной Ферми-поверхностью только с одним типом карманов могут иметь *d*-тип симметрии параметра порядка.

1.3.3. Краткий обзор теорий сверхпроводящего спаривания

На раннем этапе после открытия сверхпроводимости пниктидов были проведены оценки возможности спаривания за счёт электрон-фононного взаимодействия. Константа связи оказалась даже меньше, чем у алюминия [219], хотя T_c в соединениях железа значительно выше. Это привело к выводам что вряд ли следующее из электрон-фононного взаимодействия спаривание является доминирующим, хотя, возможно, требуется более тщательный анализ, учитывающий специфичные особенности зонной структуры [220]. Такая ситуация сразу, в свою очередь, привела к поискам альтернативных теорий сверхпроводящего спаривания. Используемые в теориях взаимодействия варьируются от спиновых и орбитальных флуктуаций до сильно коррелированных Мотт-Хаббардовских и хундовских обменных констант. Описать и даже упомянуть все теории в данном обзоре не представляется возможным и поэтому мы приведём некоторые из них, сгруппировав их по тому, какую симметрию параметра порядка они предсказывают в качестве доминирующей. Симметрии мы запишем в терминах непрерывных функций импульса функцию $\Delta(\mathbf{k})$ в зоне Бриллюэна, соответствующей двум и одному атомам Fe на ячейку (2-FeBZ и 1-FeBZ, соответственно):

1. Одна из возможных $s_{\pm}$ симметрий, которую можно назвать “чистой $s_{\pm}$ симметрией”, или изотропной $s_{\pm}$, или, как её называли в некоторых работах, s^+ состояние [221, 222]. В ней параметр порядка имеет противоположные знаки на дырочных и электронных карманах, но не имеет линий нулей на Ферми-поверхности. Такой ситуации соответствует зависимость $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta (\cos k_x + \cos k_y) / 2$ в 2-FeBZ и $\Delta(\mathbf{q}) = \Delta \cos q_x \cos q_y$ в 1-FeBZ. Эта симметрия впервые была предложена в работах, основанных на картине делокализованных электронов [191, 223–225], а затем в моделях локализованных спинов [226].
2. Орбитальные флуктуации, усиленные электрон-фононным взаимодействием, могут приводить к знакопостоянному решению, которое в мно-

гозонном случае называют s_{++} состоянием [227, 228].

3. Анизотропное $s_{\pm}$ состояние, также относящееся к расширенному s -типу, был получен в качестве доминирующей симметрии из спин-флуктуационной теории спаривания для пятиорбитальной модели Хаббарда в RPA [200]. Он имеет следующую зависимость от импульса: $\Delta(\mathbf{k}) \approx \Delta \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2}$ в 2-FeBZ и $\Delta(\mathbf{q}) \approx \Delta (\cos q_x + \cos q_y) / 2$ в 1-FeBZ.
4. В той-же работе конкурирующим с $s_{\pm}$, но менее выгодным, является $d_{x^2-y^2}$ состояние с $\Delta(\mathbf{k}) \approx \Delta \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}$ в 2-FeBZ и $\Delta(\mathbf{q}) \approx \Delta (\cos q_x - \cos q_y) / 2$ в 1-FeBZ.

Первые три кандидата относятся к A_{1g} представлению тетрагональной группы D_{4h} , последний - к B_{1g} . С нашей точки зрения наиболее перспективной является спин-флуктуационная теория сверхпроводящего спаривания. Перспективной она является по ряду причин: 1) она основана на модели делокализованных электронов, что является хорошей отправной точкой описания соединений железа; 2) сверхпроводящая фаза возникает сразу после или сосуществует с антиферромагнитной, притом спин-решеточная релаксация $1/T_1T$ постепенно меняет характер поведения от Кюри-Вейсовского к Паулиевскому при увеличении допирования и снижении T_c [206], что говорит об уменьшении роли спиновых флуктуаций; 3) для описания разнообразия наблюдаемых свойств пниктидов и халькогенидов не требуется вводить дополнительные параметры в теорию, а нужно учитывать особенности зонной структуры и взаимодействий в различных классах соединений железа [10]. Так, даже если учитывать только изменение зонной структуры с допированием в пятиорбитальной модели пниктидов, то из спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания получается нетривиальная зависимость структуры параметра порядка от допирования, см. Рисунок 1.10.

1.3.4. Сводка экспериментальных данных по разным материалам

Здесь мы проанализируем экспериментальные данные с точки зрения определения симметрии и деталей структуры параметра порядка.

Если говорить о гетеровалентно-допированных материалах BaFe_2As_2 , на которых на сегодняшний день сделано большинство экспериментов, то их термодинамические свойства подтверждают полную щель вблизи оптимального допирования, увеличивающуюся анизотропию и возникновение нулей щели вдали от него, что согласуется с предсказаниями спин-флуктуационной теории спаривания. Хотя семейство 122 может и является типичным представителем соединений железа, но стоит отметить, что оно наименее коррелировано и наиболее трёхмерно из всех. Следовательно, стоит рассмотреть различные семейства соединений железа и сравнить их друг с другом. В Таблице 1.1 мы попытались сгруппировать различные материалы в три категории в соответствии с тем, проявляют ли они (только в термодинамических экспериментах) полную щель (как минимум несколько мэВ), глубокий минимум щели или “слабые” нули, или чёткое поведение с нулями щели. Вторая категория, очевидно, самая деликатная, поскольку она содержит материалы, которые очень интенсивно исследовали, а также такие, которые были обделены вниманием экспериментаторов. Кроме того, отличие между глубоким минимумом щели и “слабыми” нулями (ситуация, когда щель меняет знак только очень малой части Ферми-поверхности) не очень чёткое, поскольку в A_{1g} -симметрии минимум щели может быть адиабатически переведён в ситуацию со “слабыми” нулями и наоборот всего лишь небольшими изменениями зонной структуры, примесями, и т.д. Отметим, что мы намеренно не привели данные по AFe_2Se_2 , поскольку он ещё недостаточно хорошо изучен.

Сначала рассмотрим изовалентно-допированную систему $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$, которая чётко демонстрирует поведение с линиями нулей. Этот материал интересен тем, что его фазовая диаграмма в зависимости от концентрации P очень похожа на фазовую диаграмму $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$, несмотря на изовалентную

Таблица 1.1. Структура параметра порядка в соединениях железа, полученная на основе термодинамических и транспортных измерений. В квадратных скобках приведены величины T_c и использованы следующие обозначения: OD=передопированные, OP=оптимально допированные, UD=недодопированные материалы. Символом “*” отмечены возможные доказательства “нулей вдоль оси c ”.

Семейство	Полная щель	Сильная анизотропия	Линии нулей
1111	PrFeAsO _{1-y} [52K] [229] SmFeAs(O,F) [55K] [234]	LaFeAs(O,F) [26K] [230] NdFeAs(O,F) [230]	LaFePO [6K] [231–233]
122	(Ba,K)Fe ₂ As ₂ [40K] [210, 235–237] Ba(Fe,Co) ₂ As ₂ [OP, 23K] [241, 242]	(Ba,K)Fe ₂ As ₂ [UD] [237] Ba(Fe,Ni) ₂ As ₂ [243]* Ba(Fe,Co) ₂ As ₂ [UD] [245]* Ba(Fe,Co) ₂ As ₂ [OD] [241, 245]*	KFe ₂ As ₂ [4K] [238–240] BaFe ₂ (As,P) ₂ [OP,31K] [213, 244]
111	LiFeAs [18K] [246, 247]		LiFeP [6K] [248]
11		Fe(Se,Te) [27K] [249, 250]	

природу замены As на P [251]. В этой системе наибольшая критическая температура (31K при оптимальном допировании) из всех соединений с подтверждёнными нулями щели (T_c для LaFePO и KFe₂As₂ равны 6K и 4K, соответственно). Также интересен тот факт, что три допированных с помощью P сверхпроводника BaFe₂(As_{1-x}P_x)₂, LaFePO и LiFeP все имеют нули щели, а их допированные с помощью As аналоги Ba_{1-x}K_xFe₂As₂, Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂, LaFeAsO и LiFeAs имеют либо полную щель, либо анизотропны.

Как указано в Таблице 1.1, часть материалов семейства 1111, основанных на As, относятся к имеющим полную щель, а часть - к имеющим минимум щели или “слабые” нули. Именно эта разрозненность в измерениях на ранних образцах привела к изначальному разнообразию низкотемпературных результатов и впечатлению о неуниверсальности сверхпроводящего состояния в этих материалах. Известно, что замещение редкоземельного иона влияет на параметры решётки, в частности, на константу c , которая уменьшается при росте T_c . Сопутствующие изменения электронной структуры были приписаны в основном высоте мышьяка в работе [252], где они были параметризованы в попытке описать зависимость T_c в этом семействе. Важно, что более изотропные материалы имеют большие значения T_c , как в общем случае и ожидается из спин-флукту-

ационной теории, но необходимы кристаллы более высокого качества и другие эксперименты, чтобы подтвердить указанное в Таблице распределение.

В последние годы был достигнут прогресс в синтезе монокристаллов LiFeAs высокого качества ($T_c = 17\text{K}$). Поскольку эти кристаллы хорошо раскалываются на неполяризованной поверхности Li, можно ожидать отличную поверхность и хорошие данные STM и ARPES. Однако, в ранних ARPES-экспериментах [253] была получена Ферми-поверхность, сильно отличающаяся от предсказанной в DFT. Последующие работы по измерению эффекта де Гаазаван Альфена [254] показали хорошее согласие с расчётами в DFT [255]. Что точно можно сказать феноменологически, так это то, что в этой системе имеется полная щель [247, 248, 253, 256].

Ещё одна система, заслуживающая отдельного комментария, это экстремально допированное дырками соединение KFe_2As_2 с $T_c = 4\text{K}$, которое можно рассматривать как последнюю точку серии $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$, где барий полностью заменён калием. Вычисленная в DFT Ферми-поверхность не должна иметь электронных карманов, а эксперименты показывают большую плотность квази-частиц при низких температурах, что согласуется с нулями щели [238, 239, 257].

Глава 2

Зависящая от допирования зонная структура купратов в эффективной $t - t' - t'' - J^*$ модели и фазовые переходы с изменением поверхности Ферми

В этой главе построена теория среднего поля для спин-жидкостной парамагнитной несверхпроводящей фазы р- и п-типа ВТСП купратов. Эта теория применяется для эффективной $t - t' - t'' - J^*$ модели с трёхцентровыми слагаемыми и вычисленными из первых принципов параметрами. Статические спин-спиновые и кинематические корреляционные функции вычислены самосогласованно за пределами приближения Хаббард-1. Для широкой области концентраций допирования x получена эволюция Ферми-поверхности и дисперсии зон. Для купратов р-типа найдено три различных типа поведения системы, переходы между которыми связаны с изменением топологии Ферми-поверхности. Эти переходы являются квантовыми фазовыми переходами при $x = 0.15$ и $x = 0.23$. Из-за отличающейся топологии Ферми-поверхности в купратах п-типа мы обнаружили только одну квантовую критическую концентрацию, $x = 0.2$. Также вычислены зависимости нодальной Ферми-скорости и эффективной массы от допирования, которые оказались в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Сначала мы обсудим параметры, модель и используемые приближения в разделах 2.1 и 2.2. Результаты для р-типа купратов представлены в разделе 2.3. Там же сделано сравнение $t - t' - t'' - J^*$ и $t - t' - t'' - J$ моделей и обсуждается роль ближнего магнитного порядка. В разделе 2.4 содержатся результаты для п-типа купратов, а их частный случай обсуждается в разделе 2.5. Далее приведено обсуждение результатов.

2.1. Параметры моделей

ВТСП купраты принадлежат классу систем с сильными электронными корреляциями, в которых стандартное приближение локальной плотности (local density approximation, LDA) и подходы теории возмущений слабой связи дают неправильные результаты. Чтобы преодолеть эту трудность, нами был разработан метод LDA+GTB [34]. Там первопринципные расчёты LDA используются для конструирования функций Ванье и получения одноэлектронных и Кулоновских параметров в многозонных моделях хаббардаовского типа. В этих моделях электронная структура в режиме сильных электронных корреляций рассчитывается обобщённым методом сильной связи (Generalized Tight-Binding, GTB) [79, 80, 258], где комбинируются точная диагонализация модельного гамильтониана на малых кластерах (элементарная ячейка) и теория возмущений по межкластерным перескокам и взаимодействиям. Для недопированных и слабодопированных $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) и $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) методом LDA+GTB описаны состояния диэлектрика с переносом заряда с корректным значением щели и дисперсией зон в согласии и экспериментальными данными ARPES (см. работу [34]).

Так, методом LDA+GTB были получены одноэлектронные энергии дырок ϵ и параметры перескока на ближайшие (t) и на следующие за ближайшими (t') соседи для купрата р-типа La_2CuO_4 и п-типа Nd_2CuO_4 . Сравнение этих параметров с подгоночными параметрами, использованными ранее в методе GTB [80, 258], приведено в Таблице 2.1. Подбор параметров в методе GTB [80, 258] осуществлялся под данные ARPES для купратов р-типа [259] и п-типа [260]. С подгоночными параметрами был описан ряд наблюдаемых свойств купратов (см. подробности в работах [34, 80, 258]). Поэтому то, что между параметрами в Таблице есть некоторое согласие, говорит, во-первых, в пользу разумности значений параметров метода LDA+GTB, а во-вторых, о том, что ряд наблюдаемых свойств купратов также может быть описан с па-

Таблица 2.1. Одноэлектронные энергии дырок ε и параметры перескока на ближайшие (t) и на следующие за ближайшими (t') соседи для р- и п-типа купратов, полученные в методе LDA+GTB [19, 34] и путём подгонки зонной структуры GTB под экспериментальные данные [80, 258] (все значения в эВ).

	р-тип, La_2CuO_4		п-тип, Nd_2CuO_4		п-тип, Sm_2CuO_4
	подгонка	LDA+GTB	подгонка	LDA+GTB	LDA+GTB
$\varepsilon_{d_{x^2-y^2}}$	0	0	0	0	0
ε_{p_x}	1.5	0.91	1.4	1.38	1.39
$\varepsilon_{d_{3z^2-r^2}}$	0.2	0.14	0.5	0.79	3
ε_{p_z}	0.45	-0.26	0.45	0.31	3
t_{pd}	1	1.36	1	1.18	1.26
t_{pp}	0.46	0.86	0.56	0.67	0.88
t'_{pd}	0.58	0.77	0	0.10	0
t'_{pp}	0.42	0.39	0.1	0.02	0

параметрами метода LDA+GTB. Отметим, что для Sm_2CuO_4 параметры из LDA вычислялись методом NMTO для трёхзонной $p-d$ модели [19]. Так как в этом веществе нет апического кислорода, то вблизи уровня Ферми роль орбиталей $d_{3z^2-r^2}$ и p_z минимальна и нет смысла использовать пятизонную модель. Поэтому в Таблице перескоки с участием этих орбиталей отсутствуют, $t'_{pd} = t'_{pp} = 0$, и их энергии искусственно положены равными 3 эВ, чтобы они не участвовали в низкоэнергетической физике.

Величину щели с переносом заряда мы положили равной 2 эВ, $E_{ct} = 2$ эВ. Кулоновские параметры, входящие в многозонную $p-d$ модель, были взяты следующими:

$$\begin{aligned}
 U_d = V_d = 9, U_p = V_p = 4, \\
 J_d = 1, J_p = 0, V_{pd} = 1.5.
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Далее мы, используя первопринципные одноэлектронные энергии и параметры перескока, получили энергии многозонной модели Хаббарда (1.17) и мат-

ричные элементы перехода (1.16) от операторов рождения-уничтожения к операторам Хаббарда. Для La_2CuO_4 они равны (энергии в эВ):

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= -2.768, \epsilon_{2S} = -3.650, \epsilon_{2T} = -2.275, \\ u &= -0.684, v = -0.729, \gamma_x = -0.647, \\ \gamma_b &= -0.980, \gamma_a = 0.005, \gamma_p = 0.944, \gamma_z = 0.304.\end{aligned}\tag{2.2}$$

Для Nd_2CuO_4 получены следующие значения:

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= -2.069, \epsilon_{2S} = -2.031, \epsilon_{2T} = -0.684, \\ u &= -0.738, v = -0.675, \gamma_x = 0.645, \\ \gamma_b &= 0.980, \gamma_a = -0.014, \gamma_p = 0.997, \gamma_z = 0.046,\end{aligned}\tag{2.3}$$

а для Sm_2CuO_4 эти параметры равны:

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= -2.364, \epsilon_{2S} = -2.716, \epsilon_{2T} = 0.926, \\ u &= -0.715, v = -0.699, \gamma_x = -0.648, \\ \gamma_b &= -0.980, \gamma_a = -0.932, \gamma_p = 0, \gamma_z = 0.334.\end{aligned}\tag{2.4}$$

Из первопринципных параметров (Таблица 2.1) были получены параметры перескока (1.18) многозонной модели Хаббарда и обменные интегралы $J_{fg} = 2(t_{fg}^{0S})^2/E_{ct}$ для La_2CuO_4 , Nd_2CuO_4 и Sm_2CuO_4 , которые приведены в Таблицах 2.2, 2.3 и 2.4, соответственно.

Из-за частичной делокализации функций Ванье при нашем построении многозонной модели Хаббарда возникает зависимость параметров перескока t_{fg} от расстояния. Мы проанализировали зависимость дисперсии от числа учитываемых координационных сфер и обнаружили следующее [34]: существует большое различие в дисперсии когда отличны от нуля перескоки на 1-е, 2-е и 3-и ближайшие соседи и пренебрежимо малые отличия дисперсий при учёте перескоков на 3-и, 4-е и 5-е соседи. Это является микроскопическим доказательством необходимости учитывать t' и t'' в $t - t' - t'' - J$ модели поскольку все интегралы перескока и обмена были вычислены из первых принципов методом LDA.

Таблица 2.2. Параметры многозонной модели Хаббарда (1.17) и обменные интегралы J для La_2CuO_4 , полученные методом LDA+GTB (все величины в эВ). Перескоки, дающие основной вклад на вершине валентной зоны выделены жирным шрифтом.

ρ	t_{ρ}^{00}	t_{ρ}^{SS}	t_{ρ}^{0S}	t_{ρ}^{TT}	t_{ρ}^{ST}	J_{ρ}
(0,1)	0.628	0.932	0.769	0.0007	0.100	0.296
(1,1)	-0.048	-0.120	-0.077	-0.0002	0	0.003
(0,2)	0.095	0.152	0.121	0.0003	0.016	0.007
(2,1)	0.003	-0.005	0	0	0.003	0

Таблица 2.3. То же, что и в Таблице 2.2, но для Nd_2CuO_4 . Жирным шрифтом выделены перескоки, дающие основной вклад в дно зоны проводимости.

ρ	t_{ρ}^{00}	t_{ρ}^{SS}	t_{ρ}^{0S}	t_{ρ}^{TT}	t_{ρ}^{ST}	J_{ρ}
(0,1)	0.496	0.770	-0.625	-0.0001	-0.0058	0.195
(1,1)	-0.019	-0.087	0.044	0	0	0.001
(0,2)	0.071	0.123	-0.094	0	0.0002	0.004
(2,1)	0.005	-0.002	-0.003	0	-0.0007	0

Таблица 2.4. То же, что и в Таблице 2.3, но для Sm_2CuO_4 .

ρ	t_{ρ}^{00}	t_{ρ}^{SS}	t_{ρ}^{0S}	t_{ρ}^{TT}	t_{ρ}^{ST}	J_{ρ}
(0,1)	0.589	0.911	0.738	-0.355	0.166	0.544
(1,1)	-0.046	-0.131	-0.079	0.164	0	0.006
(0,2)	0.09	0.152	0.117	-0.072	-0.073	0.014

Отметим, что так как зонная структура в LDA зависит от параметров кристаллической структуры, а она при допировании изменяется, то будут изменяться и параметры, получаемые в LDA. Однако, как нами было продемонстрировано в работе [33], эти изменения незначительны по сравнению с изменениями, вносимыми в зонную структуру за счёт многочастичных эффектов из-за сильных электронных корреляций. В частности, важную роль играют рассеяние на ближнем магнитном порядке и перераспределение спектрального веса. Поэтому мы можем для различных уровней допирования использовать параметры моделей, полученных для недопированных купратов.

Следующим шагом является проектирование гамильтониана многозонной модели Хаббарда на эффективную низкоэнергетическую модель [34]. В допированных купратах химический потенциал сдвигается либо в валентную зону (верхняя Хаббардовская зона для дырок, Upper Hubbard Band, UHB), либо в зону проводимости (нижняя Хаббардовская зона дырок, Lower Hubbard Band, LHB). Эти случаи соответствуют случаю p- и n-типу купратов. Из-за того, что другая зона (LHB или UHB) напрямую не участвует в низкоэнергетической физике, можно спроектировать её состояния на зону, формирующую Ферми-поверхность. Таким образом можно построить более простую модель используя унитарное преобразование многозонной модели Хаббарда (1.17) и следя за выполнением ограничения на отсутствие двойного заполнения одного узла [261, 262]. Таким методом получается $t - t' - t'' - J^*$ модель ($t - t' - t'' - J$ модель с трёхцентровыми коррелированными перескоками) для n-типа купратов и синглет-триплетная $t - t' - t'' - J^*$ модель для p-типа. Однако, при $x < 0.7$ в фазе без дальнего магнитного порядка роль триплетного состояния и синглет-триплетной гибридизации пренебрежимо мала [263]. Следовательно, триплетное состояние можно отбросить и далее мы будем описывать низкоэнергетические возбуждения в однослойных купратах p- и n-типа в рамках $t - t' - t'' - J^*$ модели. Параметры эффективной модели, естественно, получаются напрямую из первопринципных параметров многозонной модели Хаббарда.

2.2. Формулировка эффективных моделей и приближений

Далее для описания зависимости от допирования низкоэнергетических возбуждений нами будет построена сильнокоррелированная теория среднего поля в парамагнитной несверхпроводящей фазе ВТСП купратов. Чтобы выйти за пределы приближения Хаббард-1, мы будем учитывать самосогласованно вычисленные статические спин-спиновые и кинематические корреляционные функции. В этом приближении в эффективной $t - t' - t'' - J^*$ модели с параметрами, вычисленными из первых принципов, мы получим эволюцию с допированием Ферми-поверхности, эффективной массы и нодальной Ферми-скорости. Анализ поведения низкоэнергетических возбуждений в р-типе купратов показывает, что там возникают два квантовых фазовых перехода с изменением топологии Ферми-поверхности. Ключевым моментом при этом является адекватный учёт рассеяния электронов на флуктуациях ближнего магнитного порядка и трёх-центровых слагаемых.

Для записи модельного гамильтониана мы используем X -операторы Хаббарда (1.6): $X_f^\alpha \leftrightarrow X_f^{n,n'} \equiv |n\rangle \langle n'|$. Здесь индекс $\alpha \leftrightarrow (n, n')$ соответствует квазичастицам с энергиями $\omega_\alpha = \varepsilon_n(N+1) - \varepsilon_{n'}(N)$, где ε_n - это n -ый уровень энергии в системе из N электронов. В таких обозначениях гамильтониан $t - t' - t'' - J^*$ модели в дырочном представлении имеет вид:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{f,\sigma} (\varepsilon_0 - \mu) X_f^{\sigma,\sigma} + \sum_{f \neq g, \sigma} t_{fg} X_f^{\sigma,0} X_g^{0,\sigma} + \\ & + \sum_{f \neq g} J_{fg} \left(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right) + H_3. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здесь μ - химпотенциал, $\mathbf{S}_f$ - спиновый оператор, $S_f^+ = X_f^{\sigma,\bar{\sigma}}$, $S_f^- = X_f^{\bar{\sigma},\sigma}$, $S_f^z = \frac{1}{2} (X_f^{\sigma,\sigma} - X_f^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}})$, $n_f = \sum_{\sigma} X_f^{\sigma,\sigma}$ - оператор числа частиц, $J_{fg} = 2\tilde{t}_{fg}^2/E_{ct}$ - обменный параметр, а $U_{eff} = E_{ct}$ - эффективный хаббардовский параметр, определяемый щелью с переносом заряда. В обозначениях работы [34] матрич-

ные элементы перескока t_{fg} соответствуют t_{fg}^{SS} и $-t_{fg}^{00}$ для р- и п-типа купратов, соответственно, а $\tilde{t}_{fg} = t_{fg}^{0S}$. В импульсном пространстве Фурье-образ t_{fg} есть $t_{\mathbf{k}} = 2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y + 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y)$, где $t = t_{01}$ - перескок между ближайшими соседями, $t' = t_{11}$ - перескок между следующими за ближайшими соседями, $t'' = t_{02}$ - перескок между следующими за следующими ближайшими соседями. При этом $\tilde{t}_{\mathbf{k}} = 2\tilde{t}(\cos k_x + \cos k_y) + 4\tilde{t}' \cos k_x \cos k_y + 2\tilde{t}''(\cos 2k_x + \cos 2k_y)$ - это Фурье-образ межзонного перескока $\tilde{t}_{fg}$.

Гамильтониан H_3 содержит трёхцентровые слагаемые:

$$H_3 = \sum_{f \neq g \neq m, \sigma} \frac{\tilde{t}_{fm} \tilde{t}_{mg}}{E_{ct}} \left(X_f^{\sigma,0} X_m^{\bar{\sigma},\sigma} X_g^{0,\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma,0} X_m^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}} X_g^{0,\sigma} \right). \quad (2.6)$$

Существует простое соотношение между X -операторами и одноэлектронными операторами рождения-уничтожения: $a_{f\lambda\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{\lambda\sigma}(\alpha) X_f^{\alpha}$, где коэффициенты $\gamma_{\lambda\sigma}(\alpha)$ определяют вес квазичастицы α со спином σ и орбитальным индексом λ . Эти коэффициенты, входящие, например, в уравнение (1.16), вычисляются в схеме LDA+GTB. В рассматриваемом случае существует только одна квазичастица фермиевского типа $\alpha = (0, \sigma)$ с $\gamma_{\lambda\sigma}(\alpha) = 1$ и гамильтониан в импульсном пространстве имеет вид:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\varepsilon_0 - \mu) X_{\mathbf{k}}^{\sigma,\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha, \beta} t_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} X_{\mathbf{k}}^{\alpha\dagger} X_{\mathbf{k}}^{\beta} + \\ & + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \sum_{\alpha, \beta, \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{pq}}^{\alpha\beta, \sigma\sigma'} X_{\mathbf{p}}^{\alpha\dagger} X_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^{\sigma, \sigma'} X_{\mathbf{q}}^{\beta}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Здесь $t_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$ и $V_{\mathbf{pq}}^{\alpha\beta, \sigma\sigma'}$ - Фурье-образы $\delta_{\alpha\beta} t_{fg}$ и $-\frac{\sigma}{\sigma'} \frac{\tilde{t}_{fm} \tilde{t}_{mg}}{E_{ct}}$, соответственно.

Фурье-образ двухвременной запаздывающей функции Грина в энергетическом представлении $G_{\lambda}(\mathbf{k}, E) = \left\langle \left\langle a_{\mathbf{k}\lambda\sigma} \left| a_{\mathbf{k}\lambda\sigma}^{\dagger} \right\rangle \right\rangle_E$ может быть переписан через матричную функцию Грина $\left[\hat{D}(\mathbf{k}, E) \right]_{\alpha\beta} = \left\langle \left\langle X_{\mathbf{k}}^{\alpha} \left| X_{\mathbf{k}}^{\beta\dagger} \right\rangle \right\rangle_E$:

$$G_{\lambda}(\mathbf{k}, E) = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\lambda\sigma}(\alpha) \gamma_{\lambda\sigma}^*(\beta) D^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, E). \quad (2.8)$$

Для X -операторов Хаббарда существует диаграммная техника [264, 265], в рамках которой обобщённое уравнение Дайсона [84] в парамагнитной фазе

$(\langle X_0^{\sigma,\sigma} \rangle = \langle X_0^{\bar{\sigma},\bar{\sigma}} \rangle)$ выглядит следующим образом:

$$\hat{D}(\mathbf{k}, E) = \left[\hat{G}_0^{-1}(E) - \hat{P}(\mathbf{k}, E) \hat{t}_{\mathbf{k}} - \hat{P}(\mathbf{k}, E) \hat{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{\sigma\sigma} \langle X_0^{\sigma,\sigma} \rangle + \hat{\Sigma}(\mathbf{k}, E) \right]^{-1} \hat{P}(\mathbf{k}, E). \quad (2.9)$$

Здесь $\hat{G}_0^{-1}(E)$ - точная локальная функция Грина $G_0^{\alpha\beta}(E) = \delta_{\alpha\beta} / [E - (\varepsilon_n - \varepsilon_{n'})]$, $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, E)$ и $\hat{P}(\mathbf{k}, E)$ - собственно-энергетическая часть и силовой оператор, соответственно. Наличие силового оператора обусловлено перераспределением спектрального веса между хаббардовскими подзонами, что является неотъемлемым свойством систем с сильными корреляциями. Также необходимо отметить, что $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, E)$ в уравнении (2.9) - это собственно-энергетическая часть в представлении X -операторов и, следовательно, она существенно отлична от собственно-энергетической части, входящей в уравнение Дайсона в обычной теории возмущений для функции Грина $G_\lambda(\mathbf{k}, E)$.

В приближении Хаббард-1 [266] собственная энергия $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, E)$ равна нулю и силовой оператор $\hat{P}(\mathbf{k}, E)$ заменяется на $P^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, E) \rightarrow P^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} F_\alpha$, где $F_{\alpha(n,n')} = \langle X_f^{n,n} \rangle + \langle X_f^{n',n'} \rangle$ - факторы заполнения.

Учитывая, что в рассматриваемом парамагнитном случае $\langle X_f^{\sigma,\sigma} \rangle = \frac{1-x}{2}$ и $\langle X_f^{0,0} \rangle = x$, а также включая все $\mathbf{k}$ -независящие члены в перенормировку химпотенциала, после всех подстановок обобщённое уравнение Дайсона для гамильтониана (2.5) принимает вид:

$$D(\mathbf{k}, E) = \frac{(1+x)/2}{E - (\varepsilon_0 - \mu) - \frac{1+x}{2} t_{\mathbf{k}} - \frac{1+x}{2} \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^2}{E_{ct}} \frac{1-x}{2} + \Sigma(\mathbf{k}, E)}. \quad (2.10)$$

Чтобы выйти за пределы приближения Хаббард-1, мы должны вычислить $\Sigma(\mathbf{k}, E)$. Для этого мы используем уравнения движения для X -операторов [267]. Точное уравнение движения для X_k^α есть:

$$\begin{aligned} i\dot{X}_{\mathbf{k}}^\alpha &= [X_{\mathbf{k}}^\alpha, H] = (\varepsilon_0 - \mu) X_{\mathbf{k}}^\alpha + L_{\mathbf{k}}^\alpha = \\ &= (\varepsilon_0 - \mu) X_{\mathbf{k}}^\alpha + L_{\mathbf{k}}^{\alpha(0)} + (L_{\mathbf{k}}^\alpha - L_{\mathbf{k}}^{\alpha(0)}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Здесь $L_{\mathbf{k}}^{\alpha(0)}$ - это линейризованный и расцепленный в Хаббард-1 оператор $L_{\mathbf{k}}^{\alpha}$,

$$L_{\mathbf{k}}^{\alpha(0)} = \frac{1+x}{2}t_{\mathbf{k}} + \frac{1+x}{2}\frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^2}{E_{ct}}\frac{1-x}{2}. \quad (2.12)$$

Определим $\tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha} = L_{\mathbf{k}}^{\alpha} - L_{\mathbf{k}}^{\alpha(0)}$ и линейризуем его по $X_{\mathbf{k}}^{\alpha}$: $\tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \sum_{\beta} T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} X_{\mathbf{k}}^{\beta} + \tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha(irr)}$,

где $T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \frac{\langle\{\tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha}, X_{\mathbf{k}}^{\beta\dagger}\}\rangle}{\langle\{X_{\mathbf{k}}^{\beta}, X_{\mathbf{k}}^{\beta\dagger}\}\rangle}$ - коэффициенты линейризации. Всё, что связано с конеч-

ным временем жизни квазичастиц содержится в неприводимой части $\tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha(irr)}$.

Далее мы пренебрегаем ей: $\tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha(irr)} \rightarrow 0$.

Поскольку точное уравнение на функцию Грина есть $E \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\alpha} | X_{\mathbf{k}}^{\beta\dagger} \rangle\rangle_E = \langle\{X_{\mathbf{k}}^{\alpha}, X_{\mathbf{k}}^{\beta\dagger}\}\rangle + \langle\langle i\dot{X}_{\mathbf{k}}^{\alpha} | X_{\mathbf{k}}^{\beta\dagger} \rangle\rangle_E$, то легко увидеть, что в нашем приближении $T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$ соответствует статической части собственной энергии:

$$\hat{\Sigma}(\mathbf{k}) = -\hat{T}_{\mathbf{k}}. \quad (2.13)$$

Введём обозначения для статических спин-спиновых корреляционных функций:

$$C_{\mathbf{q}} = \sum_{f,g} e^{-i(f-g)\mathbf{q}} \langle X_f^{\sigma,\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma},\sigma} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{r}\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{r}}^z S_0^z \rangle \quad (2.14)$$

и для кинематических корреляционных функций:

$$K_{\mathbf{q}} = \sum_{f,g} e^{-i(f-g)\mathbf{q}} \langle X_f^{\sigma,0} X_g^{0,\sigma} \rangle. \quad (2.15)$$

Тогда выражение для собственной энергии квазичастиц примет вид:

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \frac{2}{1+x} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left[Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) K_{\mathbf{q}} - Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \frac{3}{2} C_{\mathbf{q}} \right], \quad (2.16)$$

где N - это число $\mathbf{k}$ -векторов в импульсном пространстве, а коэффициенты $Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ и $Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ определяются следующими выражениями:

$$Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = t_{\mathbf{q}} - \frac{1-x}{2} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - x \frac{\tilde{t}_{\mathbf{q}}^2}{E_{ct}} - \frac{1+x}{2} \frac{2\tilde{t}_{\mathbf{k}}\tilde{t}_{\mathbf{q}}}{E_{ct}},$$

$$Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{1-x}{2} \left(J_{\mathbf{q}} - \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2}{E_{ct}} \right) - \frac{1+x}{2} \frac{2\tilde{t}_{\mathbf{k}}\tilde{t}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{E_{ct}}.$$

До сих пор мы сделали два приближения. Во-первых, мы пренебрегли неприводимой частью собственной энергии $\tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha(irr)}$, таким образом позволяя квазичастицам жить бесконечно долго. При низких температурах спиновые флуктуации значительно медленнее, чем вариации плотности электронов, поэтому можно пренебречь частотной зависимостью спиновых корреляционных функций и, следовательно, частотной зависимостью собственно-энергетической части электронов (см. обсуждение в работе [23]). Мы предполагаем, что пространственная зависимость ближнего АФМ порядка может быть описана моделью изотропной спиновой жидкости с нулевыми локальными спиновыми компонентами $\langle S_f^\alpha \rangle = 0$, $\alpha = x, y, z$, и ненулевыми корреляционными функциями $\langle S_f^x S_g^x \rangle = \langle S_f^y S_g^y \rangle = \langle S_f^z S_g^z \rangle$ при $f \neq g$. Следуя методу из работы [268], эти корреляционные функции будут вычислены самосогласованно совместно с химическим потенциалом и электронной структурой.

Во-вторых, силовой оператор $\hat{P}(\mathbf{k}, E)$ взят нами в нуль-петлевом приближении в диаграммной технике для X -операторов, $P^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, E) \approx \delta_{\alpha\beta}(1 + x)/2$. Такой-же вид силовой оператор имеет в приближении Хаббард-1. Отличие силового оператора от единицы отражает тот важный факт, что в системах с сильными электронными корреляциями происходит перераспределение спектрального веса между хаббардовскими подзонами. Ранее результаты приближения Хаббард-1 при низких температурах в случае половинного заполнения и дальнего АФМ порядка [269] сравнивались с результатами метода квантового Монте-Карло (Quantum Monte-Carlo, QMC) [270]. Оказалось, что вычисленные спектральные функции и перераспределение спектрального веса находится в качественном согласии с результатами QMC. Это является, в некотором роде, косвенным обоснованием применения нуль-петлевого приближения в данной задаче, где рассматривается ближний АФМ порядок. Отметим, что поправки за пределами нуль-петлевого приближения приводят к конечному времени жизни квазичастиц [264]. Поскольку мы используем теорию возмущений с малыми параметрами перескоком t и обменом J , то поправки к полученным результатам

должны быть малы в меру малости высших степеней t/E_{ct} и J/E_{ct} .

Кинематические корреляционные функции (2.15) мы вычислим используя спектральную теорему, чтобы получить $\langle X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} \rangle$ из функции Грина (2.10):

$$\langle \langle X_{\mathbf{k}}^{0,\sigma} | X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} \rangle \rangle_E = \frac{(1+x)/2}{E - (\varepsilon_0 - \mu) - \frac{1+x}{2} t_{\mathbf{k}} - \frac{1-x^2}{4} \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^2}{E_{ct}} + \Sigma(\mathbf{k})}. \quad (2.17)$$

Спин-спиновые корреляционные функции в $t - J$ модели с трёхцентровыми перескоками H_3 были получены в работе [268]. Там уравнения движения для спин-спиновой функции Грина $\langle \langle X_f^{\sigma \bar{\sigma}} | X_g^{\bar{\sigma} \sigma} \rangle \rangle_\omega$ были расцеплены во вращательно-инвариантной спин-жидкостной фазе подобно работе [271, 272]. Этот подход приводит к статической магнитной восприимчивости в $t - J$ модели подобной получаемой другими методами [273, 274]. Высшие корреляционные функции, возникающие из-за члена H_3 , расцепляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \langle X_m^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} X_n^{\sigma 0} X_l^{0 \bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma} \sigma} \rangle \rangle_\omega &\rightarrow \langle X_m^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} \rangle \langle \langle X_n^{\sigma 0} X_l^{0 \bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma} \sigma} \rangle \rangle_\omega \\ \langle \langle X_m^{\sigma \bar{\sigma}} X_l^{\sigma 0} X_n^{0 \sigma} | X_j^{\bar{\sigma} \sigma} \rangle \rangle_\omega &\rightarrow \langle X_l^{\sigma 0} X_n^{0 \sigma} \rangle \langle \langle X_m^{\sigma \bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma} \sigma} \rangle \rangle_\omega \end{aligned}$$

Таким образом, высшие кинематические и спин-спиновые корреляционные каналы рассеяния оказываются независимы.

После того, как пренебрегают всеми членами порядка $x (2\tilde{t}_{01}/E_{ct})^2$, выражение для Фурье-образа спин-спиновой функции Грина принимает вид:

$$\langle \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma, \bar{\sigma}} | X_{\mathbf{q}}^{\bar{\sigma}, \sigma} \rangle \rangle_\omega = \frac{A_{\mathbf{q}}(\omega)}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad (2.18)$$

где

$$A_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(-2t_{\mathbf{k}} + \frac{1-x}{2} \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^2}{E_{ct}} \right) (K_{\mathbf{k}} - K_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}) + 4J_{\mathbf{k}} (C_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} - C_{\mathbf{k}}) \right], \quad (2.19)$$

а спектр магнитных возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ даётся уравнением (26) работы [268].

Следующие далее результаты получены при самосогласованном вычислении химпотенциала μ , спин-спиновой корреляционной функции (2.14) с помощью функции Грина (2.18) и кинематических корреляционных функций (2.15) используя функцию Грина (2.10) с собственно-энергетической частью (2.16).

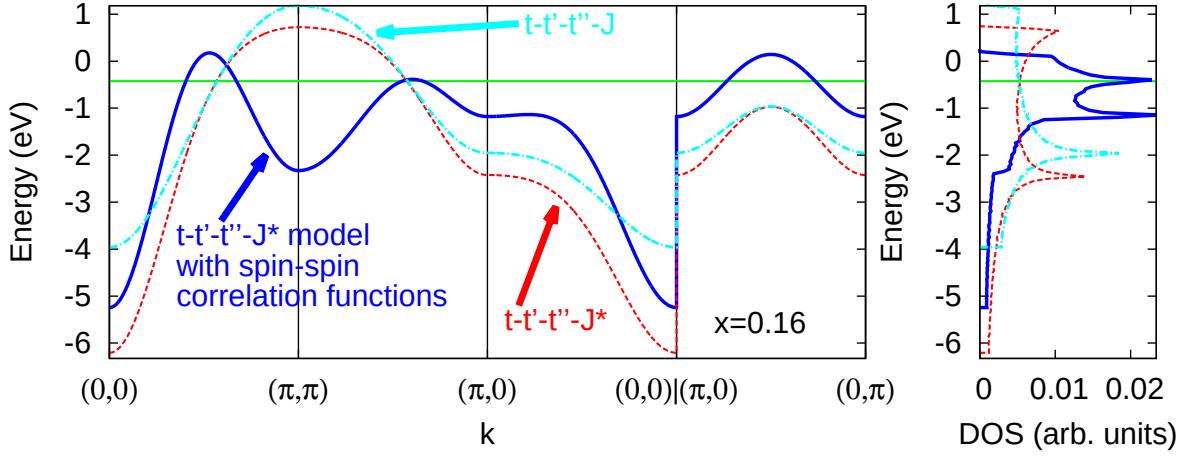


Рис. 2.1. Дисперсия квазичастиц (слева) и плотность состояний (density of states, DOS, справа) в парамагнитной фазе р-типа купратов при допировании $x = 0.16$. Позиция химпотенциала показана горизонтальной зелёной линией. Результаты в приближении Хаббард-1 показаны штрихованной красной и штрих-пунктирной голубой линиями для $t - t' - t'' - J^*$ и $t - t' - t'' - J$ моделей, соответственно. Жирной сплошной синей линией показаны результаты для $t - t' - t'' - J^*$ модели с учётом ближнего магнитного порядка.

2.3. Результаты для р-типа купратов

Методом LDA+GTB для LSCO были получены следующие параметры (см. Таблицу 2.2, все значения в эВ): $t \equiv t_{01} = 0.93$, $t' \equiv t_{11} = -0.12$, $t'' \equiv t_{02} = 0.15$, $J \equiv J_{01} = 0.295$, $J' \equiv J_{11} = 0.003$, $J'' \equiv J_{02} = 0.007$, $\tilde{t}_{01} = 0.77$, $\tilde{t}_{11} = -0.08$, $\tilde{t}_{02} = 0.12$, $E_{ct} = 2$. Все Рисунки далее приводятся в электронном представлении.

Сначала стоит отметить важную роль трёхцентровых коррелированных перескоков H_3 и перенормировок за счёт ближнего магнитного порядка. Ранее важность трёхцентровых слагаемых в нормальной и сверхпроводящей фазах была продемонстрирована в работах [268, 275, 276]. А важность этого члена в АФМ фазе была продемонстрирована сравнением результатов точной диагонализации модели Хаббарда и $t - J$ модели в работе [277]. На Рисунке 2.1 представлены результаты наших расчётов в разных приближениях для 16%-го дырочного допирования. Очевидно, что учёт трёхцентровых слагаемых приводит к сдвигу положения вершины валентной зоны. Следовательно, это важно при малых x . В $t - J$ модели в АФМ фазе существует симметрия относительно

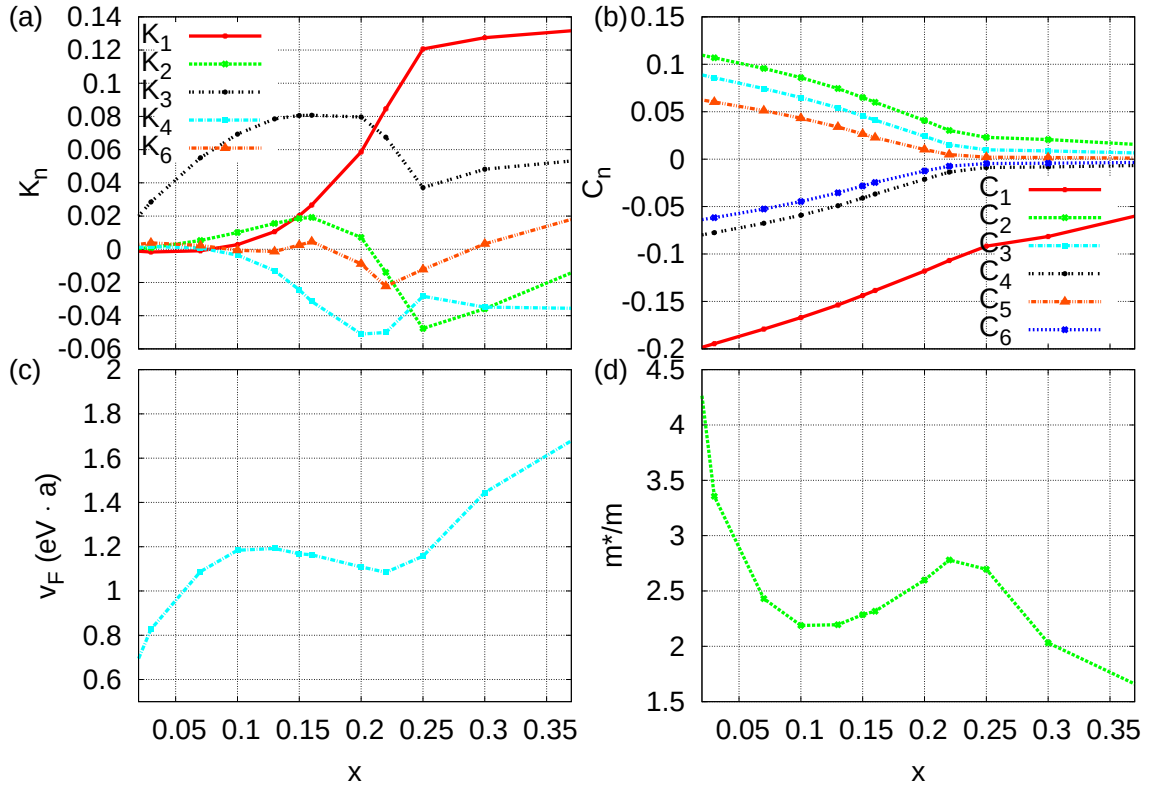


Рис. 2.2. Зависимость от допирования кинематических (а) и спин-спиновых (б) корреляционных функций в $t - t' - t'' - J^*$ модели для р-типа купратов. Индекс n нумерует вектора в реальном пространстве, соединяющие соседние узлы: $n = 1$ для ближайших соседей, $n = 2$ для следующих за ближайшими соседями и т.д. На панелях (с) и (д) показаны зависимости от допирования нодальной Ферми-скорости (в единицах $\text{эВ} \cdot a$, где a - постоянная решётки) и эффективной массы.

но точки $(\pi/2, \pi/2)$. В парамагнитной фазе такая симметрия отсутствует. Из-за рассеяния на флуктуациях ближнего магнитного порядка, максимально рассеивающих на антиферромагнитном волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, состояния около точки (π, π) выталкиваются под уровень Ферми (см. Рисунок 2.1), таким образом кардинально меняя форму Ферми-поверхности. Другими словами, ближний магнитный порядок “старается” восстановить утраченную в парамагнитной фазе симметрию вблизи точки $(\pi/2, \pi/2)$. В наших расчётах АФМ флуктуации учтены посредством спин-спиновых корреляционных функций (2.14).

Рассчитанная зависимость спин-спиновых и кинематических корреляционных функций от допирования показан на Рисунке 2.2. Отметим, что кинематические корреляторы K_n проявляют очень нетривиальную зависимость от x .

При малых концентрациях дырок $x < 0.15$ из-за сильных ближних магнитных корреляций перескоки на ближайшие и следующие за ближайшими соседями подавлены, что приводит к малым значениям K_1 и K_2 , в то время как K_3 не подавляется. При увеличении допирования выше $x \approx 0.15$ магнитные корреляции существенно уменьшаются и кинематический коррелятор ближайших соседей K_1 увеличивается. Следующее важное изменение происходит при $x \approx 0.23$, когда система показывает практически Ферми-жидкостное поведение: K_1 становится самым большим из всех K_n , в то время как магнитные корреляционные функции C_n и кинематический коррелятор K_3 существенно подавлены.

Итак, мы можем выделить две точки кроссовера, а именно $x \approx 0.15$ и $x \approx 0.23$. Поведение системы существенно различается по разные стороны этих точек, хотя фазовых переходов с нарушением симметрии не происходит. Чтобы понять природу этих кроссоверов, рассмотрим эволюцию Ферми-поверхности с допированием, представленную на Рисунке 2.3. При малых x Ферми-поверхность имеет форму малых дырочных карманов вокруг точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$. Затем эти карманы увеличиваются и при $x = 0.15$ их края соприкасаются и все карманы сливаются, образуя два Ферми-контура. До $x = 0.23$ Ферми-поверхность топологически эквивалентна двум концентрическим окружностям, малая из которых сжимается к точке $(0, 0)$ с увеличением допирования. При $x = 0.23$ малый контур сжимается до точки и исчезает и остаётся только большая Ферми-поверхность дырочного типа, центрированная в точке (π, π) .

Получается, топология Ферми-поверхности существенно изменяется при допировании. В частности, это происходит при $x = 0.15$ и при $x = 0.23$. Первые “электронный переход”, сопровождающийся изменением Ферми-поверхности, или переход Лифшица, был описан в работе [278]. Сейчас такие переходы называют квантовыми фазовыми переходами со-размерности = 1 (см., например, работу [279]). Заметим, что когда Ферми-поверхность изменяется при квантовых критических концентрациях $x_1 = 0.15 \approx x_{opt}$ и $x_2 = 0.23$, плотность состояний на уровне Ферми также претерпевает существенные изменения. Это

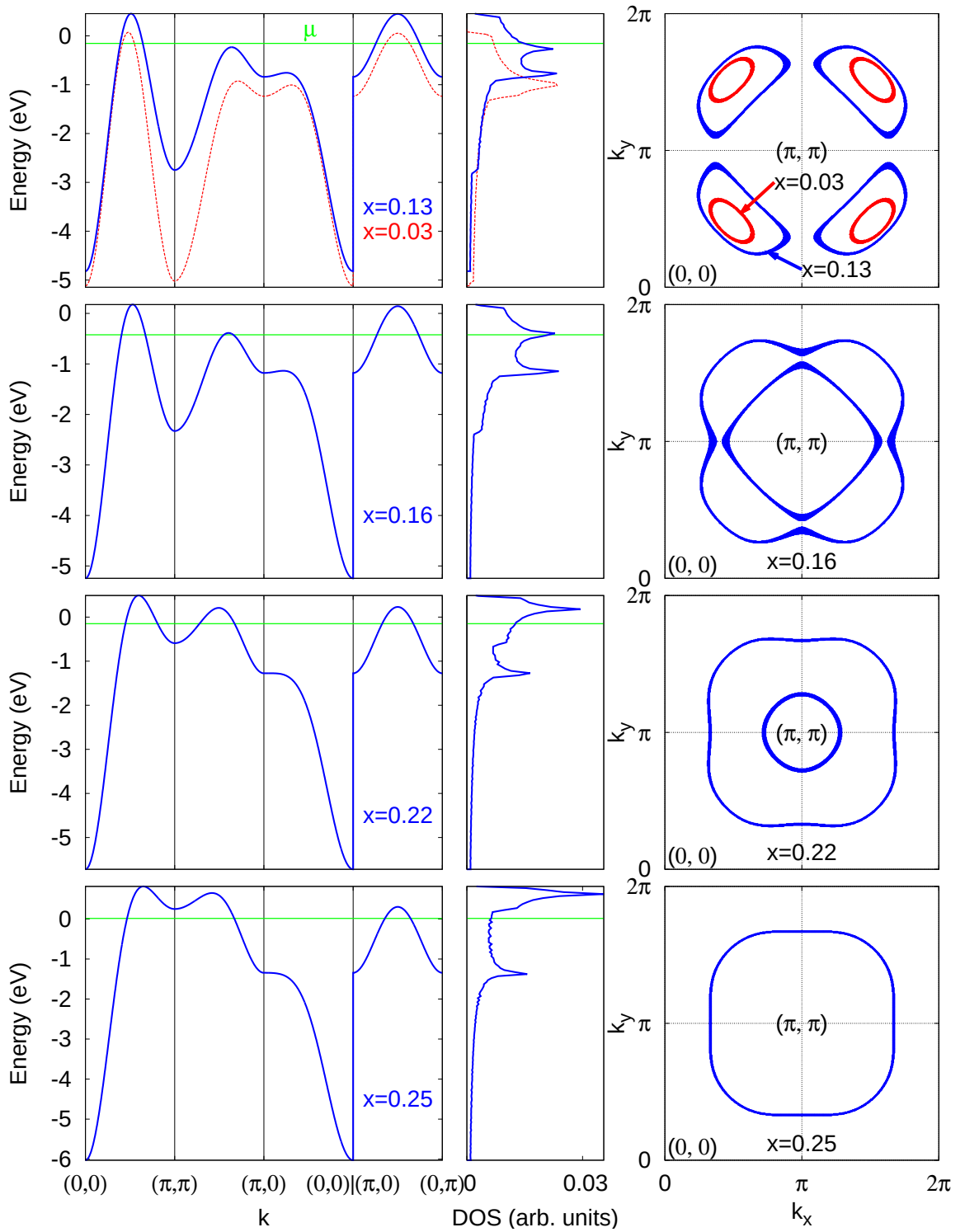


Рис. 2.3. Зонная структура (слева), плотность состояний (в середине) и Ферми-поверхность (справа) для различных уровней допирования x в $t-t'-t''-J^*$ модели для р-типа купратов.

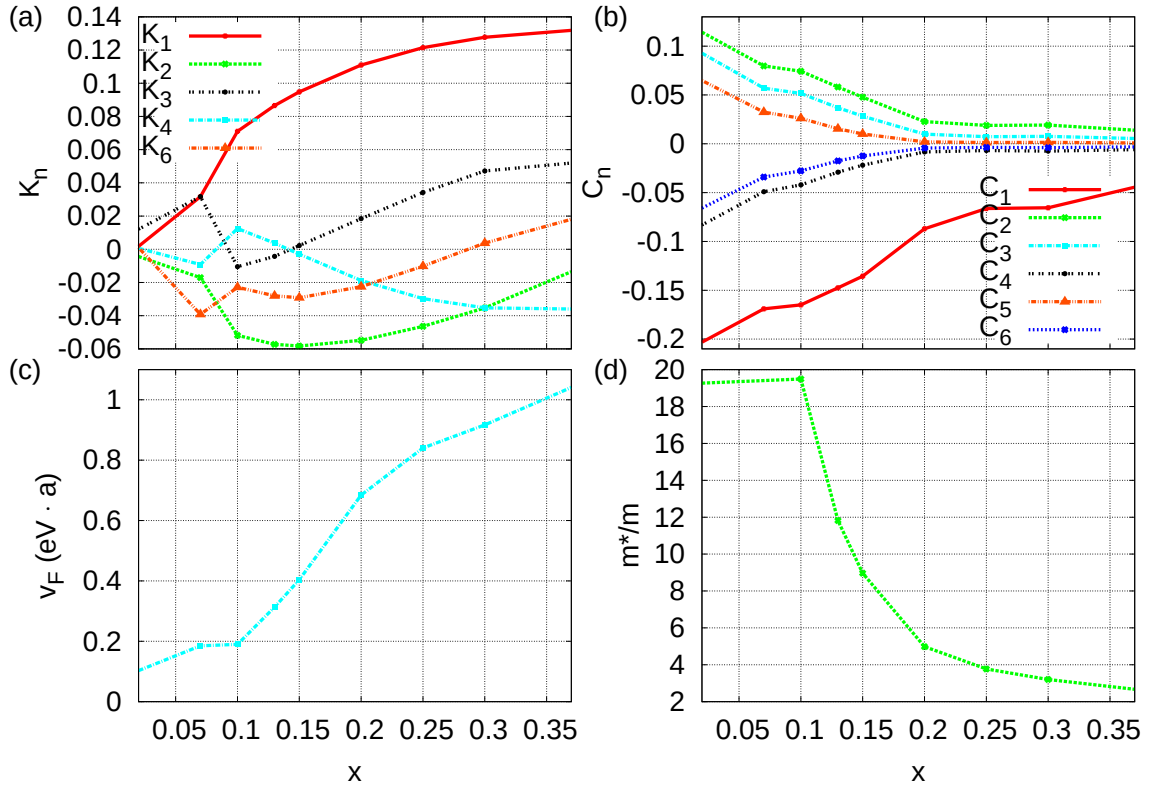


Рис. 2.4. То же, что и на Рисунке 2.2, но для модели р-типа купратов без трёхцентровых членов, т.е. в $t - t' - t'' - J$ модели.

приводит к существенно разному поведению кинематических и магнитных корреляционных функций по разные стороны точек кроссовера. Также, изменение в плотности состояний на уровне Ферми приведёт к существенным изменениям таких наблюдаемых величин, как проводимость и теплоёмкость.

Из полученной дисперсии квазичастиц мы вычислили зависимость от допирования нодальной Ферми-скорости v_F и эффективной массы m^*/m , Рисунок 2.2(c) и (d). Нодальная Ферми-скорость не показывает скачкообразных изменений, что находится в согласии с ARPES-экспериментами [52, 53]. Эффективная масса m^* увеличивается с уменьшением x и проявляет тенденцию к локализации вблизи перехода металл-диэлектрик. Но это увеличение не очень велико и общая зависимость m^*/m от допирования довольно хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемой [54]. Отметим, что немонотонное поведение зависимости от допирования обеих этих величин отражает присутствие критических концентраций x_1 и x_2 .

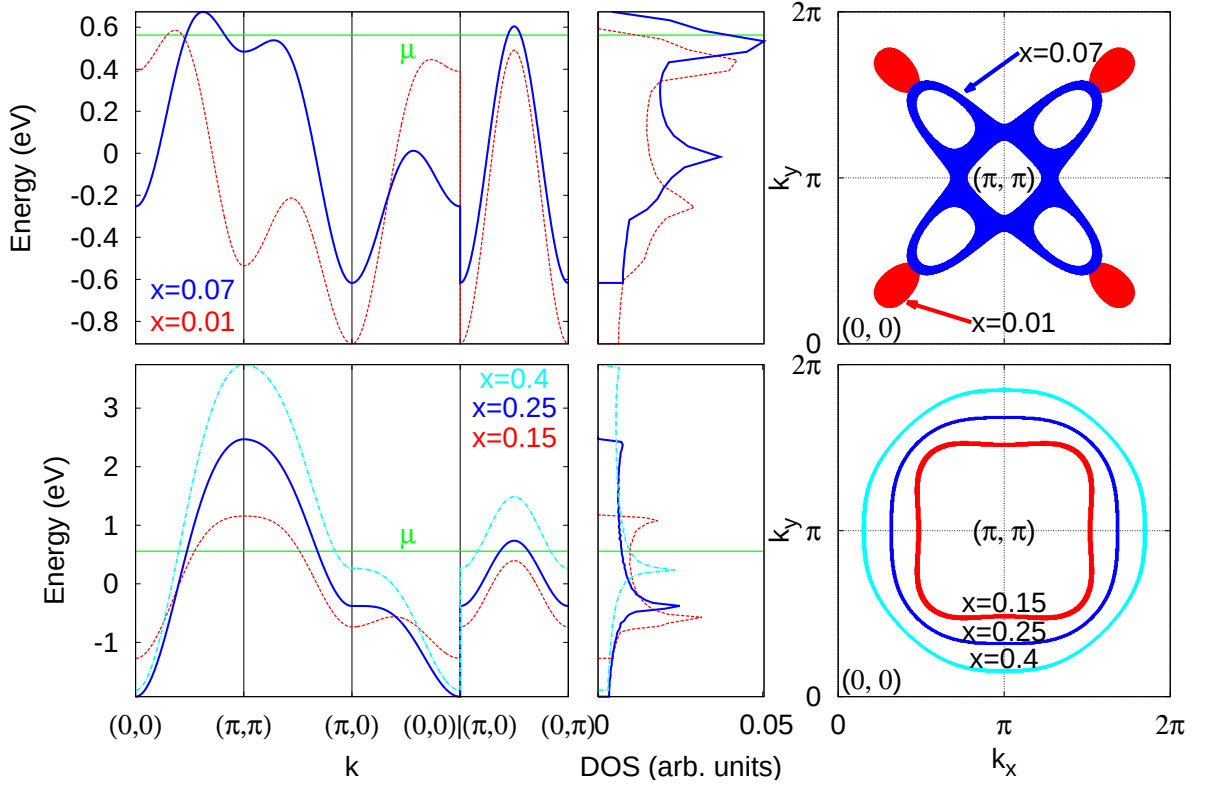


Рис. 2.5. То же, что и на Рисунке 2.3, но для модели р-типа купратов без трёхцентровых членов, т.е. в $t - t' - t'' - J$ модели.

Чтобы проанализировать влияние трёхцентровых слагаемых H_3 мы также вычислили зонную структуру и Ферми-поверхность при различном допировании в $t - t' - t'' - J$ модели. Поведение кинематических и спин-спиновых корреляционных функций, представленное на Рисунке 2.4, существенно отличается от того, что было получено в $t - t' - t'' - J^*$ модели. Присутствует только одна квантовая критическая точка при $x \approx 0.08$ и эффективная масса становится очень большой при стремящемся к нулю x . При $x > 0.1$ эволюция Ферми-поверхности и плотности состояний около уровня Ферми очень плавная и без существенных изменений, см. Рисунок 2.5. Большая часть отличий от результатов для $t - t' - t'' - J^*$ модели происходит из роли H_3 в энергии состояний вблизи точки (π, π) , что определяет топологию Ферми-поверхности физику при малом допировании (см. Рисунок 2.1).

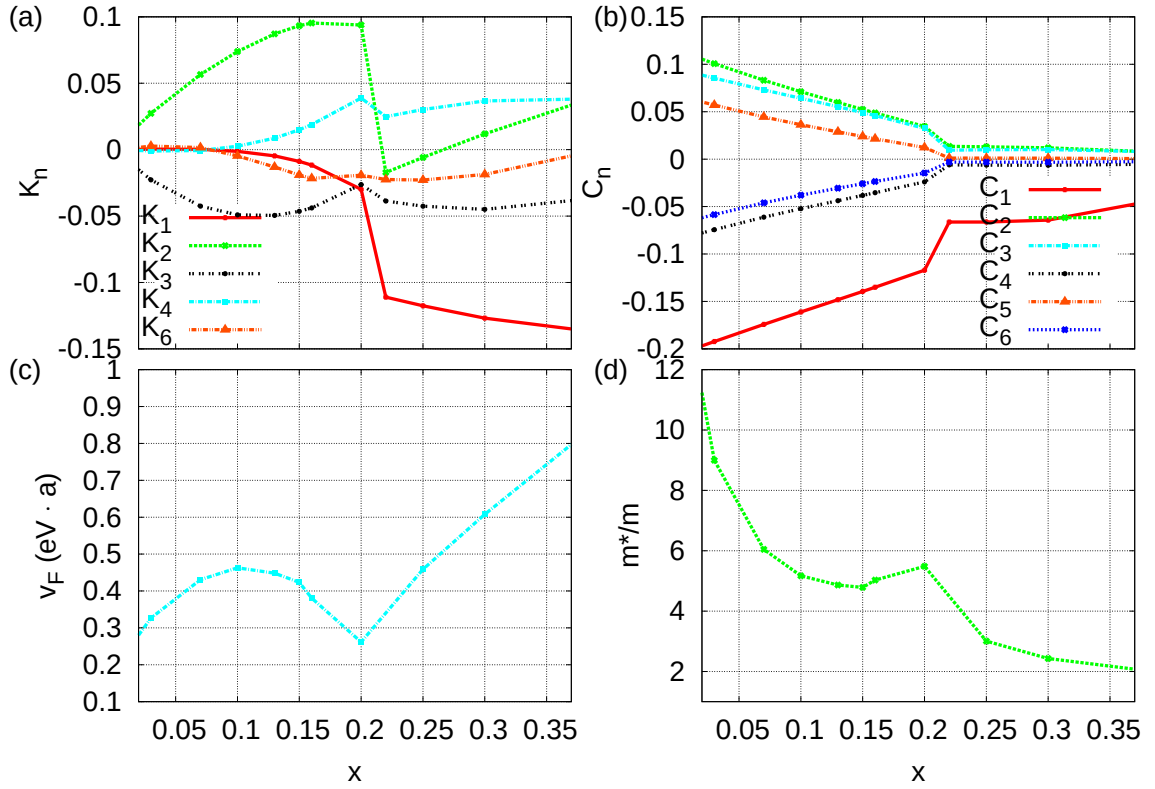


Рис. 2.6. То же, что и на Рисунке 2.2, но в $t - t' - t'' - J^*$ модели для п-типа купратов.

2.4. Результаты для п-типа купратов

Рассмотрим п-тип купратов в $t - t' - t'' - J^*$ модели. Методом LDA+GTB для NCCO были вычислены следующие параметры (см. Таблицу 2.3, все значения в эВ): $t \equiv t_{01} = -0.50$, $t' \equiv t_{11} = 0.02$, $t'' \equiv t_{02} = -0.07$, $J \equiv J_{01} = 0.195$, $J' \equiv J_{11} = 0.001$, $J'' \equiv J_{02} = 0.004$, $\tilde{t}_{01} = -0.63$, $\tilde{t}_{11} = 0.04$, $\tilde{t}_{02} = -0.09$, $E_{ct} = 2$.

Полученные зависимости от допирования кинематических и магнитных корреляционных функций представлены на Рисунке 2.6. Присутствует только одна точка кроссовера при $x \approx 0.2$. Также, в отличие от результатов для р-типа допирования, самым большим кинематическим коррелятором слева от этой точки является K_2 , а не K_3 . При $x > 0.2$ система демонстрирует Ферми-жидкостное поведение, для которого характерно уменьшение кинематических и магнитных корреляторов с расстоянием и малая величина магнитных корреляторов.

Роль ближнего магнитного порядка и трёхцентровых перескоков в п-типе купратов подобна той, что они играют в р-типе. В частности, из-за рассеяния на

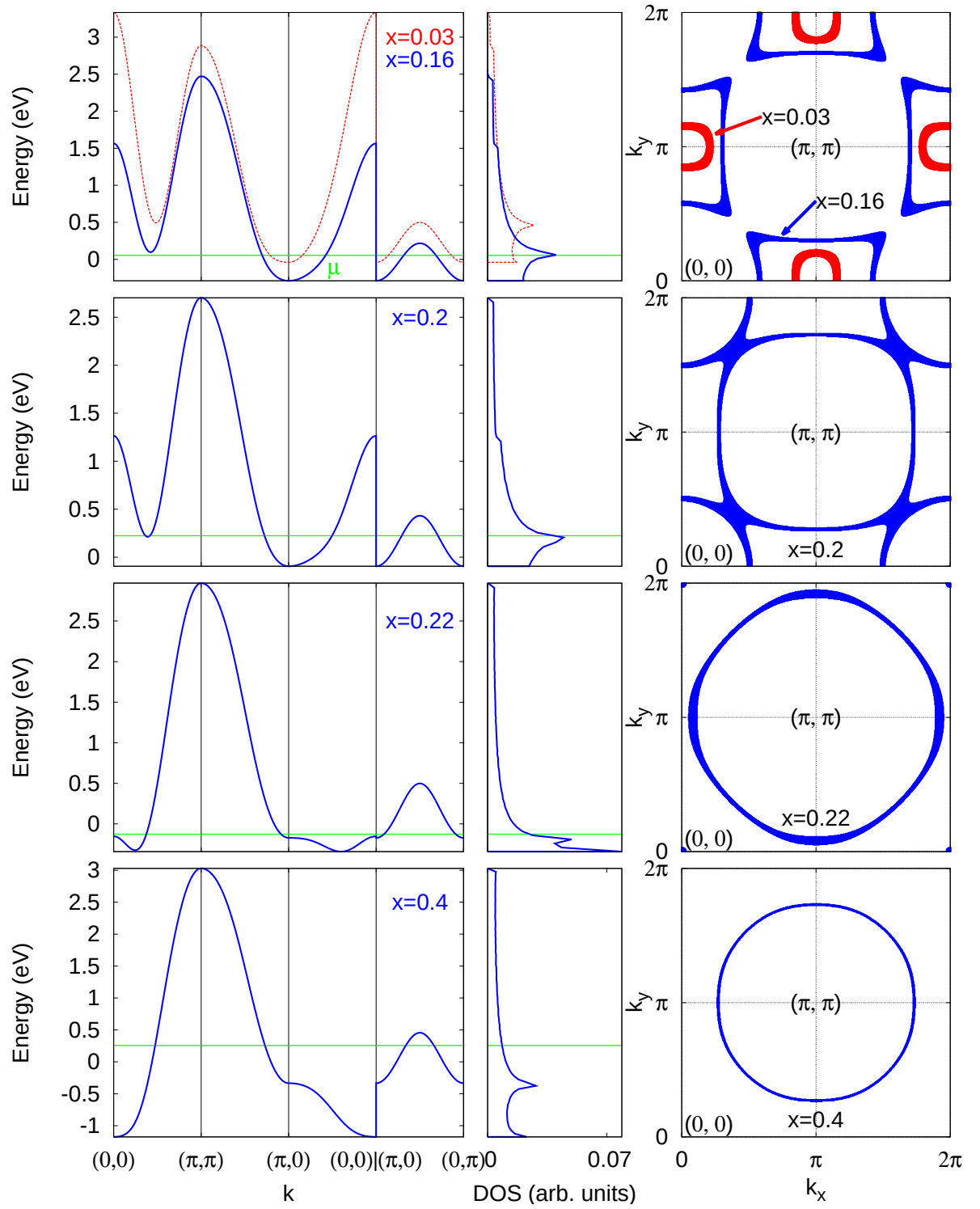


Рис. 2.7. То же, что и на Рисунке 2.3, но в $t - t' - t'' - J^*$ модели для n-типа купратов.

магнитных возбуждениях состояния вблизи точки (π, π) выталкиваются *выше* уровня Ферми и локальная симметрия в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ восстанавливается, “напоминая” о флуктуациях ближнего магнитного порядка (см. Рисунок 2.7).

Вместо дырочных карманов вокруг точки $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$, как в р-типе, здесь при малых x присутствуют электронные карманы вокруг точек $(\pm\pi, 0)$ и $(0, \pm\pi)$. При увеличении допирования эти карманы становятся больше и сливаются при $x = 0.2$. При большем допировании Ферми-поверхность становится одним большим дырочным карманом, сжимающимся к точке (π, π) . Следовательно, никаких других изменений топологии Ферми-поверхности, кроме как при $x = 0.2$, не происходит. Используя те же аргументы, что и в предыдущем разделе, мы утверждаем что имеем дело с квантовой критической точкой при $x_n = 0.2$ в п-типе купратов. Немонотонное изменение эффективной массы и nodальной Ферми-скорости также присутствует на этой концентрации, как видно из Рисунков 2.6(c) и (d). Квантовый фазовый с изменением Ферми-поверхности в NCCO был обнаружен в эксперименте по квантовым осцилляциям [280] при другой, хотя и очень близкой, критической концентрации $x \approx 0.17$.

2.5. Ферми-поверхность в $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$

Из Таблицы 2.4, где приведены полученные в методе LDA+GTB результаты, получаем следующие параметры для $t - t' - t'' - J^*$ модели Sm_2CuO_4 : $t = -0.59$ эВ, $t' = -0.08t$, $t'' = 0.15t$, $J = 0.92|t|$, $J' = 0.01|t|$, $J'' = 0.02|t|$, $\tilde{t} = -0.74$ эВ, $\tilde{t}' = -0.11\tilde{t}$, $\tilde{t}'' = 0.16\tilde{t}$.

Отметим, что, хотя значение обменного интеграла между ближайшими соседями J достаточно велико, спиновая щель в АФМ фазе будет определяться не только им, но и вкладом от трёхцентровых слагаемых. Этот вклад уменьшает величину спиновой щели, как мы обсудим далее.

На Рисунке 2.8 изображены результаты в спин-жидкостной фазе $t - t' -$

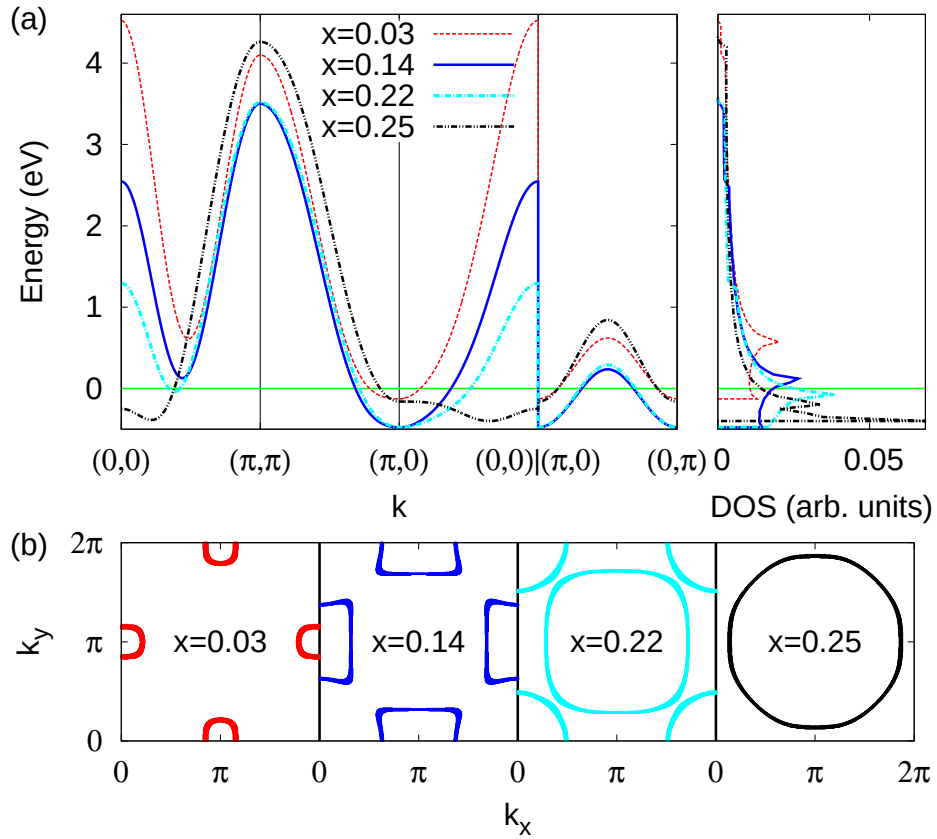


Рис. 2.8. Зонная структура и плотность состояний (a) и Ферми-поверхность (b) в спин-жидкостной фазе $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ при различном допировании x . В панели (a) нуль соответствует уровню Ферми.

$t'' - J^*$ модели. При малом допировании $x = 0.03$, из-за рассеяния на магнитных флуктуациях зонная структура имеет локальную АФМ симметрию вблизи точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ и Ферми-поверхность состоит из четырёх электронных карманов, расположенных вблизи точек $(0, \pm\pi)$ и $(\pm\pi, 0)$. Величины спин-спиновых корреляционных функций $C_{\mathbf{q}}$ достаточно велики, чтобы такая топология выжила до $x \approx 0.22$, где происходит квантовый фазовый переход. После него Ферми-поверхность имеет вид одного большого дырочного кармана вокруг точки (π, π) и одного маленького вокруг точки $(0, 0)$. Последний уменьшается при увеличении электронного допирования и при $x = 0.25$ остаётся только один большой карман. В целом, эволюция системы с допированием очень похожа на описанный ранее случай NCCO. Учитывая, что параметры моделей отличаются не сильно, это и не удивительно.

Сравнение полученной Ферми-поверхности с ARPES-данными [281] пока-

зывает, что наша теория в спин-жидкостной фазе не воспроизводит экспериментальную картину. Так, в ARPES Ферми-поверхность состоит из трёх частей - два электронных кармана вокруг точек $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$ и один вытянутый дырочный вокруг точки $(\pi/2, \pi/2)$. Из Рисунка 2.8(b) сразу видно, что в нашей спин-жидкостной теории карман вблизи точки $(\pi/2, \pi/2)$ отсутствует и нет никаких деталей зонной структуры, которые могли бы к нему привести.

Особенностью $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ по сравнению с, например, $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, где АФМ фаза заканчивается при $x \approx 0.15$, является то, что он антиферромагнетик до $x \sim 0.3$. Поэтому мы вычислим зонную структуру и Ферми-поверхность в АФМ фазе $t - t' - t'' - J^*$ [19]. Расчёт подобен приведённому в работах [282, 283], где энергетический спектр $t - t' - t'' - J$ модели получали в приближении Хаббард-1 с заданным разбиением на АФМ подрешётки, но здесь мы также учитываем трёхцентровые слагаемые.

На Рисунке 2.9(b) показано сравнение полученной Ферми-поверхности с данными ARPES [281]. Между ним наблюдается хорошее согласие. Отметим, что спиновая щель в $t - J$ модели определяется исключительно обменным параметром J [282]. Здесь, однако, импульсная зависимость щели пропорциональна $t' \cos k_x \cos k_y$. Причина состоит в том, что в отсутствие спиновых флуктуаций перескок частицы без переворота спина возможен только по одной и той-же подрешётке. Из-за функциональной формы $\cos k_x \cos k_y$ спиновая щель максимальна в точке $(\pi/2, \pi/2)$ и минимальна в точке $(\pi, 0)$, что и наблюдается на Рисунке 2.9(a). Трёхцентровый перескок вовлекает три узла (f , m и g) и пропорционален $\tilde{t}_{fm}\tilde{t}_{mg}/E_{ct}$, т.е. по порядку соответствует J и может приводить к перескоку частицы (двум последовательным перескокам) без переворота спина по одной и той-же подрешётке. Из-за этого он также вносит вклад в спиновую щель. Как видно, это приводит к уменьшению щели в районе точки $(\pi, 0)$, делая её ещё более анизотропной.

Стоит отметить существенную разницу нашего подхода, и подхода в работе [281], где приведены простые вычисления в классическом сценарии волны

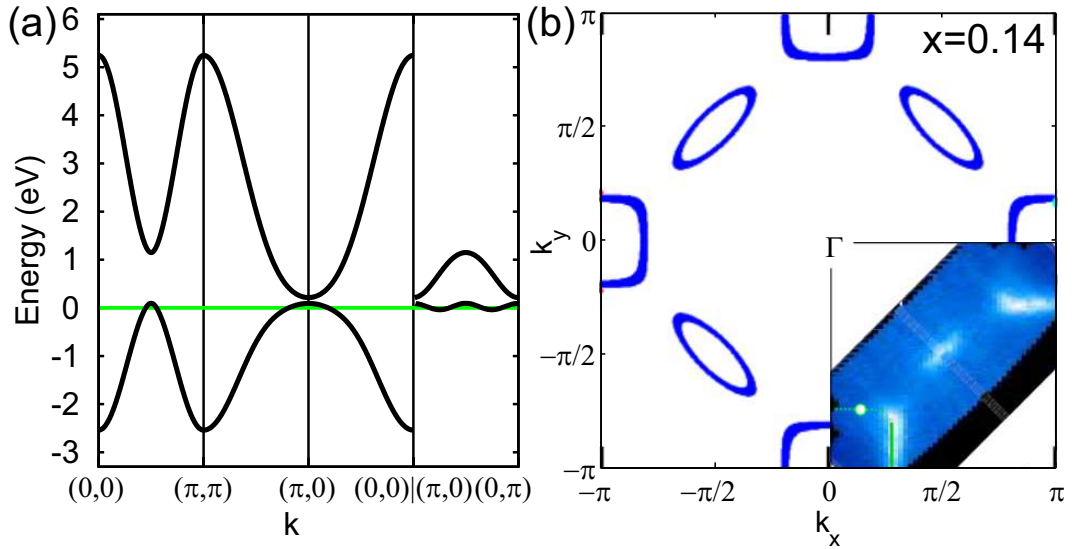


Рис. 2.9. Зонная структура (a) и Ферми-поверхность (b) в АФМ фазе $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, полученная методом LDA+GTB для $x = 0.14$. В (a) нуль соответствует уровню Ферми. Вставка в (b) представляет данные ARPES для Ферми-поверхности [281].

спиновой плотности (Spin-Density Wave, SDW). Этот подход, однако, не применим к таким сильно-коррелированным системам, как купраты. В нём в отсутствие дальнего порядка основное состояние будет металлическим даже при нулевом допировании, что не соответствует купратам. С другой стороны, наш подход подходит для описания сильно-коррелированных систем и приводит к диэлектрическому состоянию при $x = 0$.

Наши результаты для Ферми-поверхности в АФМ фазе очень похожи на результаты численных расчётов других групп для $x \approx 0.14$ [284, 285], хотя и делали они их другими методами. Такое совпадение подчёркивает тот факт, что АФМ корреляции очень сильны в оптимально допированных купратах n-типа и они играют главную роль в формировании зонной структуры и Ферми-поверхности.

2.6. Обсуждение

Мы исследовали зависящую от допирования эволюцию низкоэнергетических возбуждений в эффективных моделях p- и n-типе ВТСП купратов в режи-

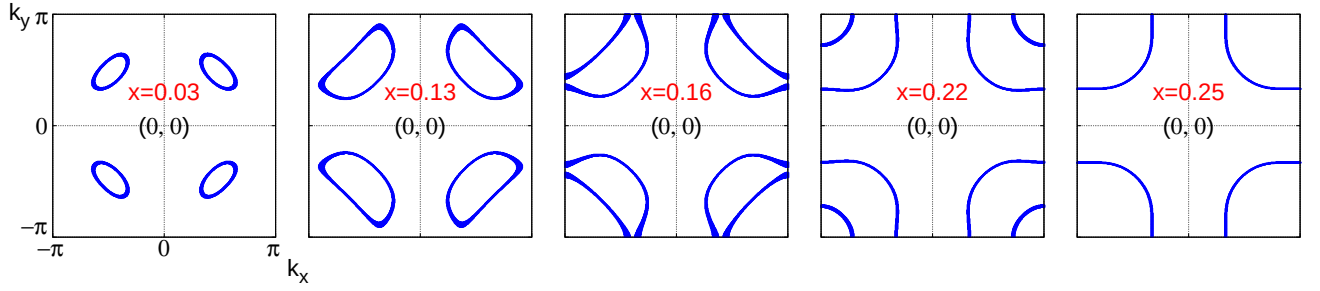


Рис. 2.10. Ферми-поверхность для различных уровней допирования x в $t - t' - t'' - J^*$ модели для р-типа купратов.

ме сильных электронных корреляций. Показано, что из-за изменения топологии Ферми-поверхности с допированием происходят существенные изменения низкоэнергетической физики. А именно, в р-типе купратов существуют две критические концентрации $x_1 \approx 0.15$ и $x_2 \approx 0.23$. По разные стороны этих концентраций наблюдается существенно различное поведение плотности состояний вблизи уровня Ферми, кинематических и магнитных корреляторов, эффективной массы и нодальной Ферми-скорости. Это позволяет говорить о кроссовере или, принимая во внимание сопутствующие изменения топологии Ферми-поверхности, показанные на Рисунке 2.10, о квантовых фазовых переходах при этих квантовых критических концентрациях.

Анализ низкотемпературных аномалий, вызванных квантовыми фазовыми переходами, и сравнение с экспериментальными данными (ARPES, квантовые осцилляции, транспортные изменения) содержится в работах [23, 286]. Совпадение x_{c1} и x_{opt} для купратов р-типа не случайно. Логарифмическая расходимость плотности состояний на уровне Ферми при x_{c1} приводит к увеличению критической температуры сверхпроводника d -типа. Второй квантовый фазовый переход связан с переходом от Ферми-жидкостного поведения при $x > x_{c2}$ к не-Ферми-жидкостному при $x < x_{c2}$ [286].

Для п-типа купратов из-за специфики их топологии Ферми-поверхности, мы получили только одну квантовую критическую концентрацию $x_n \approx 0.2$.

Отметим, что стандартная теорема Латтинжера не справедлива для Хаббардовских фермионов, поскольку часть их спектрального веса уходит в другую

хаббардовскую зону. Сам вес определяется силовым оператором $\hat{P}(\mathbf{k}, E) = F_{0\sigma}$ и каждое квантовое состояние содержит $2F_{0\sigma} = 1 - x$ электронов.

Сначала мы хотели бы прокомментировать приближения, сделанные в представленных расчётах. Поскольку мы используем применимую в режиме сильных корреляций теорию возмущений по таким малым параметрам, как перескок t и обмен J , действительная часть поправок к нашим результатам будет мала в меру малости высших степеней t/E_{ct} и J/E_{ct} . Эти поправки приведут к малым изменениям зонной структуры и деталей Ферми-поверхности, при этом не изменяя ничего на качественном уровне.

Большее беспокойство вызывает мнимая часть отброшенных поправок к силовому оператору $\hat{P}(\mathbf{k}, E)$ и к собственной энергии $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, E)$. Эти поправки возникают из неприводимой части $\tilde{L}_{\mathbf{k}}^{\alpha(irr)}$. Применение метода расщеплений уравнений движения к модели Хаббарда в приближении, дающем конечное время жизни квазичастиц [287, 288], показало, что результаты теорий типа среднего поля качественно верны. Количественно, при малом допировании мнимая часть собственной энергии приводит к исчезновению части Ферми-поверхности за границами антиферромагнитной зоны Бриллюэна (линия $(\pi, 0) - (0, \pi)$). Это приводит к Ферми-аркам вместо дырочных карманов при $x < x_{opt}$ (см. Рисунок 2.3). Аналогичный результат получается из рассмотрения флуктуаций псевдощели [289–291] и динамических поправок к силовому оператору в однопетлевом приближении [292].

Также мы можем сравнить наши результаты с результатами численных методов, в частности, точной диагонализацией [293]. Дисперсию квазичастиц в $t - t' - J$ модели из работы [293] можно рассматривать как состоящую из двух зон. Для р-типа купратов очень малы интенсивности спектральных пиков, соответствующих зоне, сосредоточенной в основном выше уровня Ферми (в электронном представлении). Эту зону часто называют “теневой” зоной и возникает она из-за рассеяния на антиферромагнитных флуктуациях. Полученная нами дисперсия зон из Рисунков 2.3 и 2.7 очень хорошо воспроизводит форму другой

(“нетеневой”) зоны. Эта та зона, где сосредоточена большая часть спектрального веса. Следовательно, именно она определяет низкоэнергетические свойства кроме таких тонких эффектов, как так называемый “кинк” в дисперсии [52].

В ARPES-экспериментах наблюдается, что квазичастицы сильно подавляются вдали от уровня Ферми. Т.о. “эффективная” ширина зоны, получаемая из ARPES, значительно меньше, чем в среднеполевых теориях. Тот факт, что мы пренебрегли мнимой частью силового оператора и собственной энергии, не позволяет напрямую сравнивать вычисленную ширину зоны с данными ARPES. Отметим ещё раз, что полученные нами зоны это не одноэлектронные зоны, а сложные зоны квазичастиц, несущих не-целый спектральный вес.

Все перенормировки, которые не включены в нашу среднеполевую теорию, изменят точные значения критических концентраций x_1 , x_2 и x_n . Сравнение с результатами более точной теории из работ [287, 288] приводит к выводу, что эти значения уменьшатся.

Итак, мы можем заключить, что наша теория ухватывает наиболее важную часть низкоэнергетической физики в рассматриваемой модели купратов. Это утверждение подкрепляется качественным согласием с наблюдаемыми в транспортных [46, 47] и в оптических [48–50] экспериментах критическими концентрациями кроссоверов, а также качественным согласием с наблюдаемыми зависимостями от допирования нодальной Ферми-скорости и эффективной массы [52–54]. Хотя мы и используем теорию среднего поля, согласие с экспериментальными данными не удивительно, поскольку мы включили в неё необходимые для описания ВТСП купратов ингредиенты. А именно, учёт сильных электронных корреляций, спиновые флуктуации (ближний магнитный порядок) и трёхцентровые перескоки. Первое и второе являются неотъемлемыми свойствами купратов, которые имеют дальний магнитный порядок при малых x и диэлектрическое состояние в недопированном случае, в то время как последний ингредиент проистекает из последовательного получения низкоэнергетической эффективной модели.

Подобные реконструкции Ферми-поверхности ранее были получены методом проектирования Мори с $\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, E) = 0$ [294], с $\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, E) \neq 0$ [287] и в многоэлектронном квантовохимическом подходе [295]. Недавно кластерным DMFT, использующем метод точной диагонализации (CDMFT+ED), была изучена электронная структура допированного Мотт-Хаббардовского диэлектрика [296, 297]. Результаты по Ферми-поверхности очень похожи на наши. Также аналогичные результаты были получены в рамках кластерной теории возмущений с контролируемым спектральным весом (Norm Conserving Cluster Perturbation Theory, NC-CPT) с точным учётом ближнего магнитного порядка в кластерах 2×2 [298]. Последовательность изменений Ферми-поверхности с допированием подобна нашей, несмотря на некоторые отличия в деталях.

2.7. Заключение

Методом LDA+GTB определены параметры низкоэнергетических эффективных моделей для недопированных ВТСП купратов р-типа (La_2CuO_4) и п-типа (Nd_2CuO_4 и Sm_2CuO_4). Эффективные модели имеют вид $t - t' - t'' - J$ модели с трёхцентровыми слагаемыми. В р-типе купратов обнаружены два квантовых фазовых перехода с изменением поверхности Ферми (переходы Лифшица) в обобщённом приближении среднего поля, учитывающем рассеяние на спиновых флуктуациях за пределами расщепления Хаббард-1. Для купрата п-типа $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ поверхность Ферми в области оптимального допирования характерна для допированного двумерного антиферромагнитного моттовского диэлектрика.

Глава 3

Эволюция магнитного отклика с допированием в кобальтитах $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$

Основываясь на зонной структуре Na_xCoO_2 , полученной из первых принципов, получен эффективный гамильтониан сильной связи для описания t_{2g} зон [31]. Из-за наличия перескоков на следующие за ближайшими соседями формируется локальный минимум в электронной дисперсии вблизи точки $\Gamma = (0, 0)$. Соответственно, при высоком уровне допирования кроме большой Ферми-поверхности появляется маленький электронный карман около точки Γ , что приводит к новому каналу рассеяния. А именно, при $x > 0.56$ магнитная восприимчивость имеет пики на малых импульсах вблизи $\mathbf{Q}_{FM} = (0, 0)$. Это говорит о доминирующих внутривоскостных ферромагнитных флуктуациях при концентрациях допирования больше критической концентрации x_m , что находится в согласии с данными по рассеянию нейтронов. При $x < x_m$ магнитная восприимчивость показывает тенденцию системы к антиферромагнитным флуктуациям. А именно, при $x < 0.56$ восприимчивость имеет хорошо определённые пики на АФМ волновом векторе $\mathbf{Q}_{AFM} = \left\{ \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right), \left(\frac{4\pi}{3}, 0 \right) \right\}$, что и показывает тенденцию к внутривоскостному 120° АФМ порядку. Затем мы анализируем влияние многочастичных эффектов на электронную и магнитную структуру в различных приближениях по соотношению U/t : Хаббард-1 и приближение Гутцвиллера [30]. В приближении Гутцвиллера также будет рассмотрено корреляционное уменьшение бислойного расщепления [15]. Это может объяснить, почему бислойное расщепление не наблюдалось в ARPES, хотя в зонной структуре LDA оно сильно выражено.

Для недавно синтезированных монокристаллов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ исследована магнитная восприимчивость в приближении RPA и указаны причины, которые могут привести к наблюдаемой при низких температурах тенденции к

внутриплоскостному ферромагнетизму [6].

3.1. Эффективная модель сильной связи

Для построения эффективной модели мы воспользуемся результатами первопринципных расчётов. Так, в работе [31] зонная структура $\text{Na}_{0.61}\text{CoO}_2$ была получена в LDA в рамках схемы TB-LMTO-ASA [85]. Это вещество кристаллизуется при 12 К в гексагональной структуре (группа $P6_3/mmc$) с параметрами решётки $a = 2.83176 \text{ \AA}$ и $c = 10.84312 \text{ \AA}$ [105]. В кобальтитах при комнатных и низких температурах наблюдается смещение атомов Na из их идеальных позиций $2d$ ($1/3, 2/3, 3/4$) на примерно $0.2 \text{ \AA}$. Это, вероятно, происходит из-за отталкивания случайно распределённых атомов Na, локально нарушая гексагональную симметрию [105]. В работе [31] атомы Na были сдвинуты назад в их симметричные позиции $2d$. Расстояние Co-O было $1.9066 \text{ \AA}$, что хорошо согласуется с наблюдаемым расстоянием $1.9072(4) \text{ \AA}$ [105]. Такая элементарная ячейка была использована при всех концентрациях допирования. Допирование учитывалось в приближении виртуального кристалла, где каждый узел кобальта имеет шесть ближайших виртуальных атомов с дробным зарядом валентных электронов x и остальным зарядом равным $10+x$. Валентными состояниями были выбраны $4s, 4p, 3d$ состояния Co, $2s, 2p, 3d$ состояния O и $3s, 3p, 3d$ состояния Na в схеме вычислений TB-LMTO-ASA.

Для нахождения подходящего базиса матрица чисел заполнения была диагонализирована и её собственные функции использовались как новые локальные орбитали. Такая процедура учитывает реальные искажения кристаллической решётки. Новые орбитали не являются чистыми тригональными a_{1g} и e'_g орбиталями, но далее всё равно используются такие обозначения из соображения удобства. Для расчётов зонной структуры в зоне Бриллюэна использовалось 288 k -точек ($12 \times 12 \times 2$ решётка для k_x, k_y и k_z , соответственно).

Зоны, пересекающие уровень Ферми, показаны на Рисунке 3.1. Они в основ-

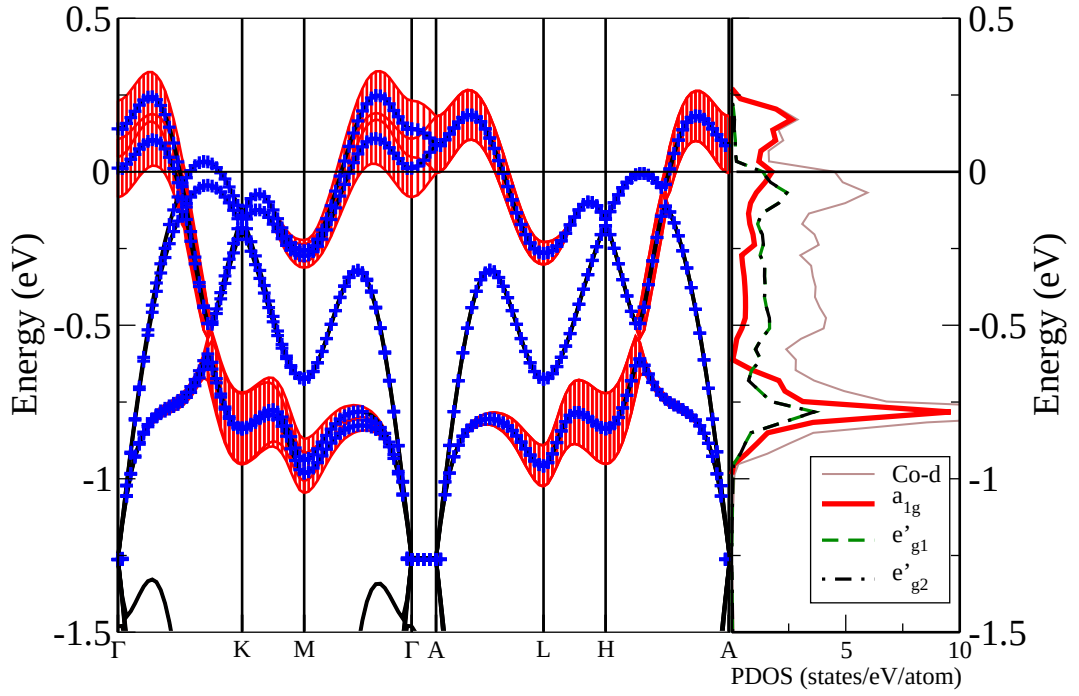


Рис. 3.1. Вычисленные в LDA зоны вблизи уровня Ферми и парциальные плотности состояний (partial density of states, PDOS) в $\text{Na}_{0.33}\text{CoO}_2$ [31]. Вклад состояний $\text{Co-}a_{1g}$ обозначен вертикальным уширением зон с высотой, пропорциональной весу вклада. Крестики показывают дисперсию зон, полученных проектированием на t_{2g} орбитали. Нуль соответствует уровню Ферми.

ном имеют характер a_{1g} , что согласуется с предыдущими расчётами в LDA [117]. Отметим, что малые карманы вблизи точки К с симметрией e'_g присутствуют при $x = 0.33$, см. Рисунок 3.2(b), но исчезают при более высоком допировании поскольку соответствующая зона “нырнёт” под уровень Ферми. Различие дисперсий по направлениям К – М и L – Н происходит из непренебрежимого взаимодействия между соседними плоскостями CoO_2 . Маленькая щель между состояниями $\text{Co-}3d$ и $\text{O-}2p$, расположенная на примерно -1.25 эВ, существует при $x = 0.61$ и исчезает при $x = 0.33$ из-за сдвига d -зоны на низкие энергии при уменьшении числа электронов.

Для описания внутриплоскостного магнитного порядка в дальнейшем мы ограничимся моделью с внутриплоскостными перескоками в слое CoO_2 . Мы пренебрежём связующе-антисвязующим (бислойным) расщеплением, присутствующим в зонах LDA. Это приближение может быть обосновано тем, что са-

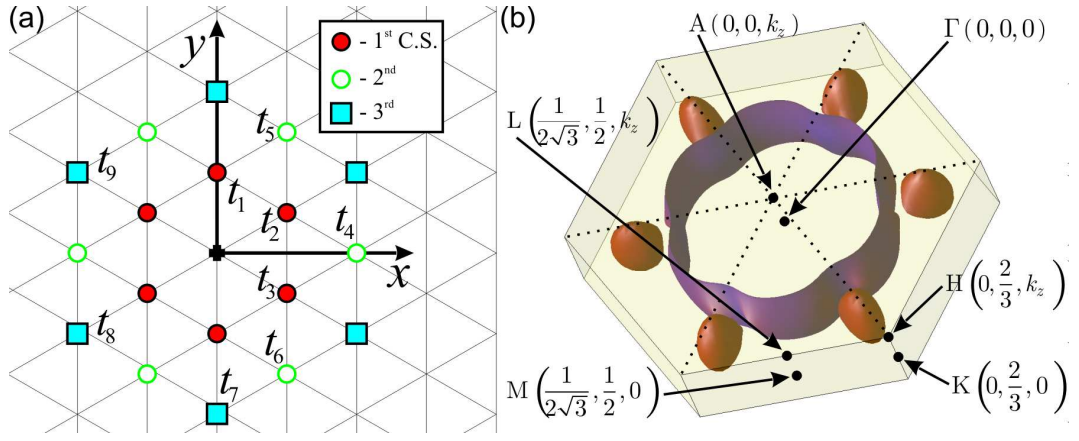


Рис. 3.2. (a) Схема кристаллической структуры слоя Co в Na_xCoO_2 с обозначенными перескоками в первых трёх координационных сферах (Coordination Spheres, C.S.). (b) Ферми-поверхность, вычисленная в LDA [31]. Центральная цилиндрическая часть имеет в основном характер a_{1g} , а шесть дырочных карманов вокруг имеют в основном e'_g характер. Координаты симметричных точек k_x и k_y даны в единицах $2\pi/a$, где a - постоянная решётки в плоскости.

мый большое межслойный перескок на порядок меньше чем внутрислоистной (0.012 эВ против 0.12 эВ).

Чтобы получить эффективную модель и $t_{fg}^{\alpha\beta}$ - эффективные параметры перескока Co-Co для t_{2g} зон в работах [30, 31] использовалась проекционная процедура [86, 299]. Здесь $(\alpha\beta)$ обозначает пару орбиталей: a_{1g} , e'_{g1} или e'_{g2} . Индексы f и g соответствуют узлам Co в треугольной решётке. Полученные перескоки и одноэлектронные энергии приведены в Таблице 3.1 для трёх различных уровней допирования. Сравнение зон, полученных при проектировании и зон LDA приведено на Рисунке 3.1. Зоны совпадают очень хорошо, подтверждая, что зоны вблизи уровня Ферми имеют Co- t_{2g} природу [117, 120]. Для простоты мы пронумеровали перескоки индексом $n = 0, 1, 2, \dots$ так, что $t_{fg}^{\alpha\beta} \rightarrow t_n^{\alpha\beta}$; см. Рисунок 3.2(a) и Таблицу 3.1 на предмет соответствия между вектором в плоскости и индексом n . Симметрия C_3 решётки приводит к следующим соотношениям: $|t_3^{\alpha\beta}| = |t_1^{\alpha\beta}|$, $|t_5^{\alpha\beta}| = |t_4^{\alpha\beta}|$, $|t_9^{\alpha\beta}| = |t_7^{\alpha\beta}|$. Также $t_1^{\alpha\beta} = t_2^{\alpha\beta}$ для перескока $a_{1g} \rightarrow a_{1g}$, что, однако, не справедливо для $e'_{g1,2}$ орбиталей. Поскольку гибридизация между зонами a_{1g} и e'_g не мала, упрощённое описание зон, пересекающих уровень Ферми только зонами a_{1g} (пренебрегая зонами e'_g и соответствующей

Таблица 3.1. Одноэлектронные энергии ϵ^α (относительно $\epsilon^{a_{1g}}$) и внутриплоскостные перескоки $t_n^{\alpha\beta}$ для Na_xCoO_2 при $x = 0.33, 0.61, 0.7$. (все значения в эВ) [30]

		вектор:	(0, 1)	$(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$	$(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$	$(\sqrt{3}, 0)$	$(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2})$	$(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{3}{2})$	(0, 2)	$(\sqrt{3}, 1)$	$(\sqrt{3}, -1)$
α	ϵ^α	$\alpha \rightarrow \beta$	$t_1^{\alpha\beta}$	$t_2^{\alpha\beta}$	$t_3^{\alpha\beta}$	$t_4^{\alpha\beta}$	$t_5^{\alpha\beta}$	$t_6^{\alpha\beta}$	$t_7^{\alpha\beta}$	$t_8^{\alpha\beta}$	$t_9^{\alpha\beta}$
$x = 0.33$											
a_{1g}	0.000	$a_{1g} \rightarrow a_{1g}$	0.123	0.123	0.123	-0.022	-0.022	-0.021	-0.025	-0.025	-0.025
e'_{g1}	-0.053	$a_{1g} \rightarrow e'_{g1}$	-0.044	0.089	-0.044	0.010	0.010	-0.021	-0.021	0.042	-0.021
		$a_{1g} \rightarrow e'_{g2}$	-0.077	0.000	0.077	0.018	-0.018	0.000	-0.036	0.000	0.036
e'_{g2}	-0.053	$e'_{g1} \rightarrow e'_{g1}$	-0.069	-0.005	-0.069	0.018	0.018	-0.026	-0.017	-0.085	-0.017
		$e'_{g1} \rightarrow e'_{g2}$	0.037	0.000	-0.037	-0.026	0.026	0.000	-0.039	0.000	0.039
		$e'_{g2} \rightarrow e'_{g2}$	-0.026	-0.090	-0.027	-0.011	-0.011	0.033	-0.062	0.006	-0.062
$x = 0.61$											
a_{1g}	0.000	$a_{1g} \rightarrow a_{1g}$	0.110	0.110	0.110	-0.019	-0.019	-0.019	-0.023	-0.023	-0.023
e'_{g1}	-0.028	$a_{1g} \rightarrow e'_{g1}$	-0.050	0.100	-0.050	0.008	0.008	-0.016	-0.017	0.035	-0.017
		$a_{1g} \rightarrow e'_{g2}$	0.087	0.000	-0.087	-0.014	0.014	0.000	0.030	-0.000	-0.030
e'_{g2}	-0.028	$e'_{g1} \rightarrow e'_{g1}$	-0.069	-0.031	-0.069	0.015	0.015	-0.022	-0.016	-0.076	-0.016
		$e'_{g1} \rightarrow e'_{g2}$	-0.022	0.000	0.022	0.021	-0.021	0.000	0.035	0.000	-0.035
		$e'_{g2} \rightarrow e'_{g2}$	-0.044	-0.081	-0.044	-0.009	-0.009	0.027	-0.056	0.005	-0.056
$x = 0.7$											
a_{1g}	0.000	$a_{1g} \rightarrow a_{1g}$	0.105	0.105	0.105	-0.018	-0.018	-0.018	-0.022	-0.022	-0.022
e'_{g1}	-0.019	$a_{1g} \rightarrow e'_{g1}$	-0.052	0.104	-0.052	0.007	0.007	-0.015	-0.016	0.033	-0.016
		$a_{1g} \rightarrow e'_{g2}$	-0.090	0.000	-0.090	0.013	-0.013	0.000	-0.028	0.000	0.028
e'_{g2}	-0.019	$e'_{g1} \rightarrow e'_{g1}$	-0.068	-0.039	-0.068	0.014	0.014	-0.020	-0.015	-0.073	-0.015
		$e'_{g1} \rightarrow e'_{g2}$	0.016	0.000	-0.016	-0.020	0.020	0.000	-0.034	0.000	0.034
		$e'_{g2} \rightarrow e'_{g2}$	-0.048	-0.077	-0.049	-0.009	-0.009	0.026	-0.054	0.005	-0.054

гибридизацией, см., например, работу [300]) может привести к неправильным результатам из-за более высокой симметрии зон a_{1g} .

Итак, гамильтониан модели плоскости CoO_2 в дырочном представлении без взаимодействия есть [30, 31]:

$$H_0 = - \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} (\epsilon^\alpha - \mu) n_{\mathbf{k}\alpha\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\alpha, \beta} t_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\beta\sigma}. \quad (3.1)$$

где $d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}$ ($d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger$) - это оператор уничтожения (рождения) дырки с импульсом $\mathbf{k}$, спином σ и орбитальным индексом α , $n_{\mathbf{k}\alpha\sigma} = d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}$ - оператор числа частиц, $t_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$ - Фурье-образ матричного элемента перескока, ϵ^α - одноэлектронные энергии, а μ - химпотенциал. Вводя матричные обозначения $(\hat{t}_{\mathbf{k}})_{\alpha\beta} = t_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$ и $(\hat{t}_n)_{\alpha\beta} = t_n^{\alpha\beta}$, матричные элементы перескока в импульсном пространстве будут

иметь вид:

$$\begin{aligned}\hat{t}_{\mathbf{k}} = & 2\hat{t}_1 \cos k_2 + 2\hat{t}_2 \cos k_3 + 2\hat{t}_3 \cos k_1 + \\ & + 2\hat{t}_4 \cos(k_1 + k_3) + 2\hat{t}_5 \cos(k_2 + k_1) + 2\hat{t}_6 \cos(k_1 - k_2) + \\ & + 2\hat{t}_7 \cos 2k_2 + 2\hat{t}_8 \cos 2k_3 + 2\hat{t}_9 \cos 2k_1,\end{aligned}\tag{3.2}$$

где $k_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}k_x - \frac{1}{2}k_y$, $k_2 = k_y$ и $k_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}k_x + \frac{1}{2}k_y$.

Отметим, что параметры не изменяются существенно при изменении допирования. На Рисунке 3.3 показаны результаты приближения жёсткой зоны в модели (3.1) с параметрами перескока из расчёта LDA для двух уровней допирования: $x = 0.33$ и $x = 0.61$ (см. Таблицу 3.1). Концентрация допирования, использованная для вычисления химпотенциала μ , в обоих случаях была фиксирована и равна $x = 0.61$. Хотя и существуют отличия в дисперсии вблизи точки М, они малы вблизи Ферми-поверхности. Поскольку большая часть физических величин определяется состояниями, лежащими вблизи уровня Ферми, мы можем спокойно пренебречь малыми отличиями в зонной структуре и описывать эволюцию с допированием в Na_xCoO_2 просто изменяя химпотенциал. Далее мы будем использовать первопринципные параметры, вычисленные для $x = 0.33$, и изменять химпотенциал для достижения нужной концентрации допирования.

В приближении жёсткой зоны дырочные e'_g карманы глубоко под уровнем Ферми при $x \geq 0.41$. Наиболее важным наблюдением, однако, является локальный минимум зоны вблизи точки Γ (см. Рисунок 3.3). Он приводит к появлению внутреннего Ферми-контура вокруг этой точки. Площадь этого электронного кармана увеличивается с увеличением допирования x . Основная причина появления локального минимума - это наличие перескоков на следующие за ближайшими соседями, которые входят в нашу модель сильной связи. Хотя данный минимум ещё не наблюдали в ARPES, отметим, что внутренний Ферми-контур уменьшает общий объём Ферми-поверхности и, следовательно, может объяснить почему наблюдаемый в ARPES объём Ферми-поверхности больше следующего из теоремы Латтинжера [128]. Более того, появление такого кар-

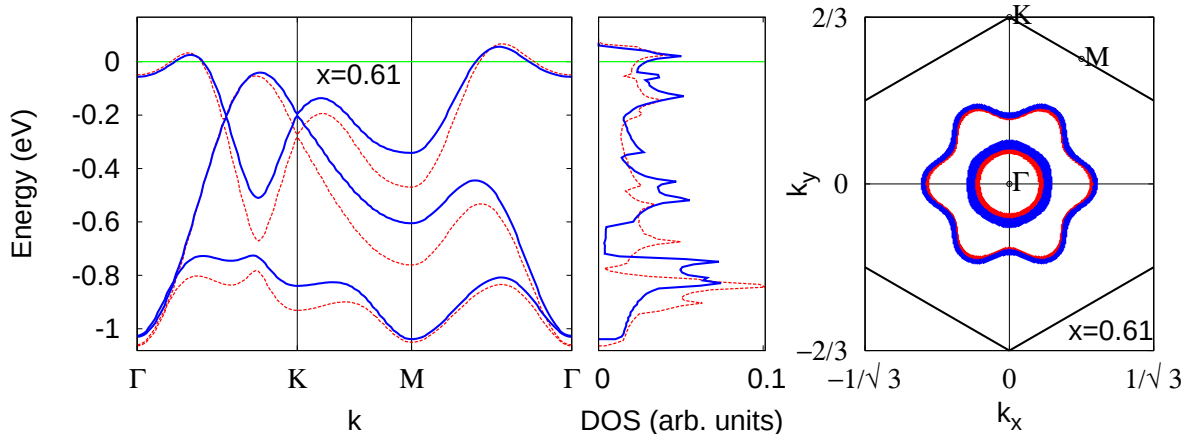


Рис. 3.3. Вычисленные в модели сильной связи дисперсия зон, плотность состояний (density of states, DOS) и Ферми-поверхность для $\text{Na}_{0.61}\text{CoO}_2$ в рамках приближения жёсткой зоны с первопринципными параметрами для $x = 0.61$ (сплошная синяя линия) и для $x = 0.33$ (красная штрихованная линия). Горизонтальная зелёная линия отмечает положение химпотенциала μ при $x = 0.61$.

мана повлияло бы на холловскую проводимость при высоких концентрациях допирования. Отметим, что появление внутреннего Ферми-контура не является эксклюзивным для нашей работы, ранее он был получен в LDA для одного слоя Co на элементарную ячейку [131].

3.2. Магнитная восприимчивость в нормальной фазе

Что касается теоретического исследования магнитных свойств, то из LSDA следует, что в Na_xCoO_2 должно быть слабое внутриплоскостное ферромагнитное состояние практически при всех концентрациях Na, $0.3 \leq x \leq 0.7$ [118]. Это противоречит наблюдаемым в нейтронном рассеянии A-типу антиферромагнетизма с ферромагнитным упорядочением в слоях Co-layer только при $0.75 \leq x \leq 0.9$ [109–112]. Здесь мы рассмотрим возможности возникновения магнетизм коллективизированных электронов.

Магнетизм коллективизированных электронов можно изучать исследуя магнитную восприимчивость $\chi_0(\mathbf{q}, \omega = 0)$, получающуюся на основе гамильтониана H_0 . Такая “голая” восприимчивость системы без взаимодействия позво-

ляет понять, какое магнитное состояние можно ожидать основываясь на рассеянии вблизи Ферми-поверхности. Включение взаимодействия может привести к расходимости восприимчивости на волновых векторах, где пикуется голая восприимчивость, т.е. к магнитному фазовому переходу.

Зависящая от допирования действительная часть восприимчивости $\text{Re}\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ показана на Рисунке 3.4. При $x = 0.41$ зоны e'_g находятся ниже уровня Ферми и Ферми-поверхность имеет форму сглаженного шестиугольника. Это приводит к ряду волновых векторов нестинга близких к АФМ вектору $\mathbf{Q}_{AFM}$. Соответствующие широкие пики в $\text{Re}\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ появляются вблизи $\mathbf{Q}_{AFM}$, что показывает тенденцию электронной системы к 120° -му антиферромагнитному состоянию волны спиновой плотности [120]. При увеличении допирования уровень Ферми пересекает локальный минимум в точке Γ , что приводит к возникновению практически круглого внутреннего Ферми-контура. Как только происходит такое изменение топологии Ферми-поверхности, рассеяние на импульсе $\mathbf{Q}_{AFM}$ сильно подавляется при $x_m \geq 0.56$. Одновременно появляется новый малый вектор рассеяния $\mathbf{Q}_1$. Соответственно, в магнитной восприимчивости появляются пики на малых импульсах, что говорит о тенденции магнитной системы к формированию волны спиновой плотности с малым волновым вектором упорядочения. Связь локального минимума в точке Γ и формирования рассеяния на малых импульсах указывалась в работе [300].

При больших x область под внутренним Ферми-контуром увеличивается, приводя к дальнейшему увеличению вектора $\mathbf{Q}_1$. При $x \approx 0.88$ топология Ферми-поверхности снова меняется и появляются шесть отстоящих друг от друга Ферми-контуров, рассеяние внутри которых приводит к уменьшению $\mathbf{Q}_1$ вплоть до нуля. Рассеяние на малых импульсах, которое мы наблюдаем в голой магнитной восприимчивости при $x > x_m$, качественно согласуется с ферромагнитным порядком на векторе $\mathbf{Q}_{FM} = (0, 0)$, наблюдаемом в экспериментах по рассеянию нейтронов [109–112].

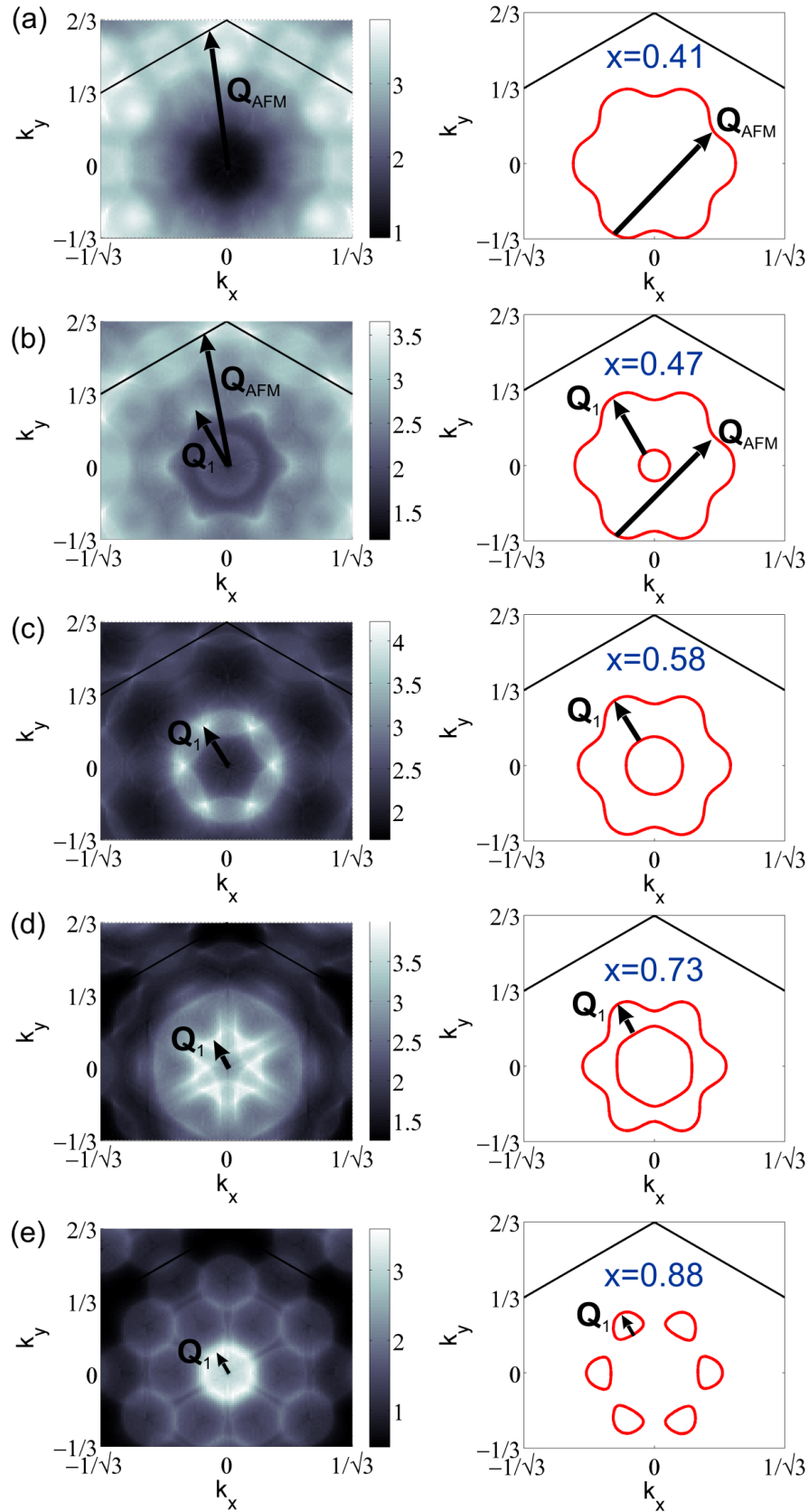


Рис. 3.4. Действительная часть магнитной восприимчивости $\text{Re}\chi_0(\mathbf{k}, \omega = 0)$ как функция импульса в единицах $2\pi/a$ (слева) и Ферми-поверхность при соответствующем допировании x (справа). Стрелками обозначены основные векторы рассеяния $\mathbf{Q}_i$.

3.3. Влияние сильных электронных корреляций на зонную структуру

Необходимо выяснить роль электронных корреляций на магнитные неустойчивости, полученные в предыдущем разделе в приближении жёсткой зоны. Поскольку полученная магнитная восприимчивость зависит в основном от топологии Ферми-поверхности, можно ожидать, что показанное на Рисунке 3.4 поведение будет справедливо даже если рассматривать восприимчивость в приближении хаотических фаз (Random Phase Approximation, RPA) со взаимодействием H_{int} , по крайней мере, если взаимодействием является одноузельное Хаббардовское отталкивание U . Единственное отличие может проявиться в сдвиге критической концентрации x_m , при которой изменяется топология Ферми-поверхности и меняется тенденция от АФМ порядка к ФМ упорядочению. Подобно работам [132, 301] мы добавим одноузельное кулоновское взаимодействие к гамильтониану (3.1):

$$H = H_0 + \sum_{f,\alpha} U n_{f\alpha\uparrow} n_{f\alpha\downarrow}, \quad (3.3)$$

где $n_{f\alpha\sigma} = d_{f\alpha\sigma}^\dagger d_{f\alpha\sigma}$ - оператор числа t_{2g} -дырок на узле кобальта f со спином σ и орбитальным индексом α .

В настоящее время нет полной ясности насколько электронные корреляции влияют на низкоэнергетические свойства Na_xCoO_2 , поскольку многоорбитальности этой системы усложняет ситуацию. Следовательно, в дальнейшем мы обсудим различные приближения, справедливые для различных соотношений U/t .

Приближение Хаббард-1

Сначала мы рассмотрим приближение Хаббард-1 и сформулируем эффективную модель Хаббарда в пределе бесконечного U . Это очень грубое приближение для описания того факта, что в кластере CoO_2 одноузельное кулоновское

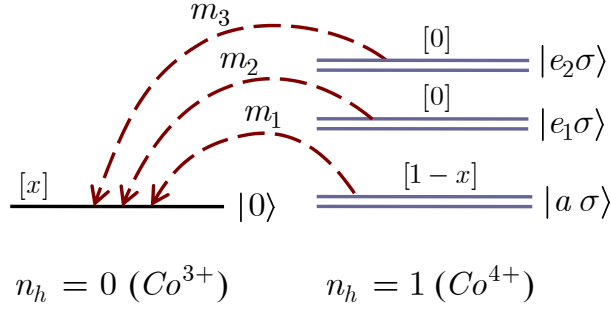


Рис. 3.5. Схема локальных атомных состояний Co и возбуждения между ними в Na_xCoO_2 . Здесь n_h - число дырок, а m_i нумерует возбуждения. Зависимость чисел заполнения состояний от допирования x приведена в квадратных скобках.

отталкивание U велико по сравнению с шириной зоны W . В атомном пределе существует следующие локальные низкоэнергетические состояния на узле Co: вакуумное состояние $|0\rangle$ и однократно заполненные дырочные состояния $|a\sigma\rangle$, $|e_1\sigma\rangle$ и $|e_2\sigma\rangle$.

Локальные атомные состояния и переходы между ними показаны на Рисунке 3.5. Самый простой способ описать квазичастичные возбуждения между этими состояниями - использовать операторы Хаббарда: $X_f^m \leftrightarrow X_f^{p,q} \equiv |p\rangle \langle q|$, где индекс $m \leftrightarrow (p, q)$ нумерует квазичастицы. Одноэлектронные операторы выражаются через X -операторы следующим образом: $d_{f\alpha\sigma} = \sum_m \gamma_{\alpha\sigma}(m) X_f^m$, где $\gamma_{\alpha\sigma}(m)$ определяет вес квазичастицы m со спином σ и орбитальным индексом α . В этих обозначениях гамильтониан модели Хаббарда в пределе $U \rightarrow \infty$ имеет вид:

$$H = - \sum_{f,p} (\varepsilon^p - \mu) X_f^{p,p} - \sum_{f \neq g} \sum_{m,m'} t_{fg}^{mm'} X_f^{m\dagger} X_g^{m'}. \quad (3.4)$$

Для изучения энергетического спектра квазичастиц системы мы используем Фурье-образ двухвременной функции Грина в энергетическом представлении, $G_{\alpha\sigma}(\mathbf{k}, E) \equiv \left\langle \left\langle d_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \left| d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger \right. \right\rangle \right\rangle_E$. Её можно выразить через матричную функцию Грина в X -представлении $D^{mm'}(\mathbf{k}, E) = \left\langle \left\langle X_{\mathbf{k}}^m \left| X_{\mathbf{k}}^{m'\dagger} \right. \right\rangle \right\rangle_E$ следующим образом: $G_{\alpha\sigma}(\mathbf{k}, E) = \sum_{m,m'} \gamma_{\alpha\sigma}(m) \gamma_{\beta\sigma}^*(m') D^{mm'}(\mathbf{k}, E)$.

Используя диаграммную технику для операторов Хаббарда можно запи-

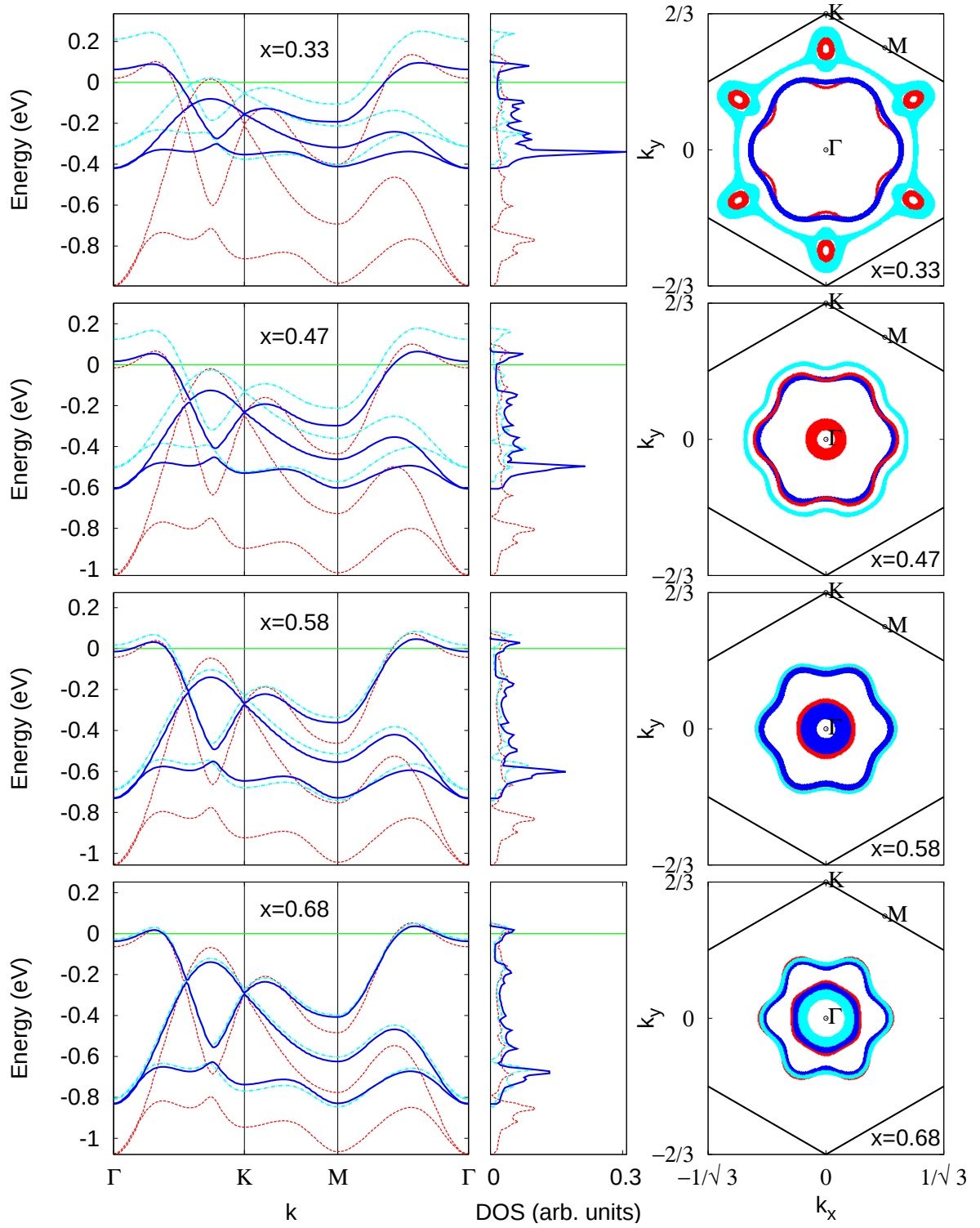


Рис. 3.6. Рассчитанная зонная структура, плотность состояний и Ферми-поверхность для Na_xCoO_2 при $x = 0.33, 0.47, 0.58, 0.68$ в модели жёсткой зоны (пунктирные красные линии), в приближении Гутцвиллера (сплошные синие линии) и в приближении Хаббард-1 (штрих-пунктирные голубые линии). Горизонтальная зелёная линия отмечает положение химпотенциала μ .

сать обобщённое уравнение Дайсона (1.13):

$$\hat{D}(\mathbf{k}, E) = \left[\hat{G}_0^{-1}(E) - \hat{P}(\mathbf{k}, E) \hat{t}_{\mathbf{k}} + \hat{\Sigma}(\mathbf{k}, E) \right]^{-1} \hat{P}(\mathbf{k}, E), \quad (3.5)$$

где $\hat{G}_0^{-1}(E)$ - это точная локальная функция Грина, $G_0^{mm'}(E) = \delta_{mm'} / [E - (\varepsilon_p - \varepsilon_q)]$. В приближении Хаббард-1 собственно-энергетическая часть $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, E)$ равна нулю и силовой оператор $\hat{P}(\mathbf{k}, E)$ заменяется суммой факторов заполнения $P^{mm'}(\mathbf{k}, E) \rightarrow P^{mm'} = \delta_{mm'} \left[\langle X_f^{p,p} \rangle + \langle X_f^{q,q} \rangle \right]$, $m = m(p, q)$, а ' $\langle \dots \rangle$ ' обозначает обычное термодинамическое усреднение. Таким образом:

$$\hat{D}^{(0)}(\mathbf{k}, E) = \left[\hat{G}_0^{-1} - \hat{P} \hat{t}_{\mathbf{k}} \right]^{-1} \hat{P}. \quad (3.6)$$

В парамагнитной фазе факторы заполнения следующие: $\langle X_f^{0,0} \rangle = x$, $\langle X_f^{a\sigma, a\sigma} \rangle = \frac{1-x}{2}$ и $\langle X_f^{e_{1,2}\sigma, e_{1,2}\sigma} \rangle = 0$. Они приводят к диагональному силовому оператору $\hat{P} = \text{diag} \left(\frac{1+x}{2}, x, x \right)$. Следовательно, зоны квазичастиц, сформированные перескоками $a_{1g} \rightarrow a_{1g}$, будут перенормированы множителем $(1+x)/2$, а зоны, сформированные перескоками с участием e'_g состояний - множителем x .

На Рисунке 3.6 изображены спектр квазичастиц, плотность состояний и Ферми-поверхность в различных приближениях. В приближении Хаббард-1 происходит уменьшение ширины зон при уменьшении допирования x из-за зависимости веса квазичастиц от допирования через силовой оператор $\hat{P}$. Однако, как видно, эволюция Ферми-поверхности с допированием качественно подобна таковой в приближении жёсткой зоны. А именно, перенормировки ширины зоны и спектрального веса не изменяют топологию Ферми-поверхности и при аналогичных концентрациях x она совпадает с топологией Ферми-поверхности невзаимодействующих электронов. Как результат, в приближении Хаббард-1 на качественном уровне не изменятся наши результаты по голой восприимчивости. Количественно, критическая концентрация x_m сдвигается на большие значения допирования, $x_m \approx 0.68$.

Теорема Латтинжера, выполняющаяся в случае разложения функции Гри-

на в ряд обычной теории возмущений, нарушается в приближении Хаббард-1. Нарушение происходит из-за перенормировки спектрального веса функции Грина факторами заполнения в силовом операторе, входящими в уравнение (3.5). Это и есть причина, по которой, несмотря на сужение e'_g зоны, дырочные e'_g карманы присутствуют на Ферми поверхности при $x = 0.33$.

Приближение Гутцвиллера

Приближение Гутцвиллера [56–59, 61] в модели Хаббарда даёт хорошее описание коррелированной металлической системы. Его многозонное обобщение было сделано в работе [133]. В этом подходе гамильтониан взаимодействующей системы (3.3) вдали от перехода металл-диэлектрик при $U \gg W$ заменяется эффективным гамильтонианом без взаимодействия:

$$H_{eff} = - \sum_{f,\alpha,\sigma} (\varepsilon^\alpha + \delta\varepsilon^{\alpha\sigma} - \mu) n_{f\alpha\sigma} - \sum_{f \neq g, \sigma} \sum_{\alpha, \beta} \tilde{t}_{fg}^{\alpha\beta} d_{f\alpha\sigma}^\dagger d_{g\beta\sigma} + C. \quad (3.7)$$

Здесь, $\tilde{t}_{fg}^{\alpha\beta} = t_{fg}^{\alpha\beta} \sqrt{q_{\alpha\sigma}} \sqrt{q_{\beta\sigma}}$ - перенормированный интеграл перескока, $q_{\alpha\sigma} = \frac{x}{1-n_{\alpha\sigma}}$, $n_{\alpha\sigma} = \langle \Psi_0 | n_{f\alpha\sigma} | \Psi_0 \rangle \equiv \langle n_{f\alpha\sigma} \rangle_0$ - факторы заполнения орбиталей, $x = 1 - \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma}$ - это уравнение на химпотенциал, а $\delta\varepsilon^{\alpha\sigma}$ - это множители Лагранжа, приводящие к сдвигу одноэлектронных энергий за счёт корреляций. Постоянная C определяется из условия равенства основных состояний для обоих гамильтонианов:

$$\langle \Psi_0 | H_{eff} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_g | H | \Psi_g \rangle, \quad (3.8)$$

где $|\Psi_0\rangle$ - это волновая функция системы свободных электронов (3.7), а $|\Psi_g\rangle$ - это волновая функция Гутцвиллера для гамильтониана (3.3).

Множители Лагранжа определяются при минимизации энергии

$$\langle \Psi_0 | H_{eff} | \Psi_0 \rangle = - \sum_{\alpha, \sigma} (\varepsilon^\alpha + \delta\varepsilon^{\alpha\sigma} - \mu) \langle n_{f\alpha\sigma} \rangle_0 - \sum_{f \neq g, \sigma} \sum_{\alpha, \beta} \tilde{t}_{fg}^{\alpha\beta} \left\langle d_{f\alpha\sigma}^\dagger d_{g\beta\sigma} \right\rangle_0 + C, \quad (3.9)$$

по отношению к факторам заполнения орбиталей $n_{\alpha\sigma}$. Здесь $C = \sum_{\alpha, \sigma} \delta\varepsilon^{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma}$, что определяется уравнением (3.8). Это приводит к следующему выражению

для перенормировок одноэлектронных энергий:

$$\delta\varepsilon^{\alpha\sigma} = \frac{1}{2(1 - n_{\alpha\sigma})} \sum_{f \neq g, \beta} \tilde{t}_{fg}^{\alpha\beta} \left\langle d_{f\alpha\sigma}^\dagger d_{g\beta\sigma} \right\rangle_0. \quad (3.10)$$

Именно эти сдвиги энергий приводят к тому, что дырочные e'_g Ферми-поверхности уходят под уровень Ферми [132], что хорошо видно на Рисунке 3.6 из зависимости от допирования дисперсии квазичастиц и Ферми-поверхности в приближении Гутцвиллера. Хотя сужение зон из-за сильных корреляций подобно тому, что получается в приближении Хаббард-1, Ферми-поверхность подчиняется теореме Латтинжера. Отметим, что в отличие от приближения Хаббард-1, на величины $\delta\varepsilon^{\alpha\sigma}$ перенормируются относительные положения t_{2g} -зон.

При $x > 0.4$ топология Ферми-поверхности в приближении Гутцвиллера качественно совпадает с топологией в приближении жёсткой зоны. Из-за этого подобные результаты будут и для зависимости голей восприимчивости от допирования, описанной в разделе 3.2. Единственная роль сильных корреляций для χ_0 в наблюдаемом сдвиге критической концентрации на более высокие значения $x_m \approx 0.6$. Это происходит из-за совместного эффекта сужения зон и зависимости от допирования относительных сдвигов a_{1g} и e'_g зон, определяемых уравнением (3.10).

Отметим, что при $x < 0.4$ из-за другой топологии Ферми-поверхности, получаемой в приближении Гутцвиллера, голая восприимчивость будет отличаться от результатов работы [120], где были отброшены сильные перенормировки зонной структуры, убирающие e'_g карманы с Ферми-поверхности.

Бислойное расщепление в приближении Гутцвиллера

До сих пор мы пренебрегали так называемым бислойным расщеплением - расщеплением на связующую и антисвязующую зоны, возникающим из-за наличия двух CoO_2 -слоёв на элементарную ячейку. Чтобы учесть это расщепление мы добавили перескоки $t_z^{\alpha\beta}$ между соседними плоскостями CoO_2 . Их значения

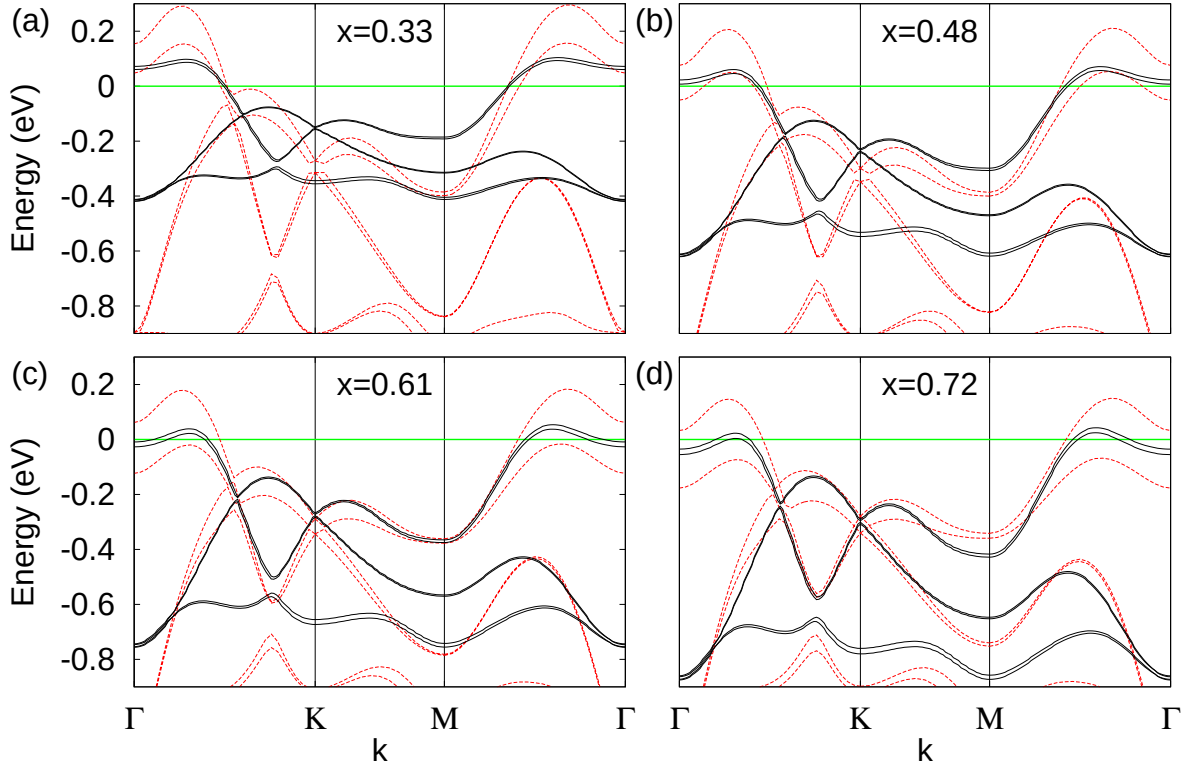


Рис. 3.7. Зонная структура Na_xCoO_2 при x равном 0.33 (a), 0.48 (b), 0.61 (c) и 0.72 (d), полученная в приближении Гутцвиллера (сплошные чёрные линии) и в LDA+U [15] (штриховые красные линии).

(в эВ) были получены из результатов LDA [15]: $t_z^{a_{1g}a_{1g}} = -0.0121$, $t_z^{e'_{g1}e'_{g1}} = 0.0080$ и $t_z^{e'_{g2}e'_{g2}} = -0.0086$.

Используя приближение Гутцвиллера мы самосогласованно решали уравнения на $\delta\varepsilon^{\alpha\sigma}$ и химпотенциал μ . Сравнение наших результатов с результатами LDA+U из работы [15] показано на Рисунке 3.7. Оно приводит к нескольким интересным выводам. Во-первых, оба приближения приводят к исчезновению e'_g карманов с Ферми-поверхности. Во-вторых, бислойное расщепление сильно зависит от допирования и существенно подавляется для гутцвиллеровских квазичастиц по сравнению с LDA+U. Это происходит из-за коэффициентов перенормировки $\sqrt{q_{\alpha\sigma}}\sqrt{q_{\beta\sigma}}$, появляющихся не только для внутриплоскостных перескоков, но и для межслойных $t_z^{\alpha\beta}$. В-третьих, когда обе связующая и антисвязующая t_{2g} -зоны не пересекают уровень Ферми вблизи точки Γ , пересечения Ферми-поверхности одинаковы в обоих приближениях, см. Рисунок 3.7(a). Это

- просто следствие теоремы Латтинжера, выполняющейся в обоих подходах. Но для больших x из-за большего бислойного расщепления в LDA+ U Ферми-поверхности отличаются, хотя теорема Латтинжера продолжает работать. С увеличением допирования x ширина зоны гутцвиллеровских квазичастиц становится близка к LDA+ U поскольку факторы перенормировки зон $\sqrt{q_{\alpha\sigma}}\sqrt{q_{\beta\sigma}}$ становятся близки к единице.

Сравним наши результаты с результатами более строгой теории, а именно, с динамической теорией среднего поля (Dynamical Mean Field Theory, DMFT). В DMFT зонная структура модели Хаббарда состоит из трёх частей: две некогерентные хаббардовские зоны и когерентная зона квазичастиц около уровня Ферми. Поскольку U не очень велико в кобальтитах, хаббардовские подзоны имеют малый спектральный вес и практически сливаются с когерентной зоной. Итак, за низкоэнергетические возбуждения отвечает эта квазичастичная зона. И именно она получается из приближения Гутцвиллера, хотя оно и формально справедливо для случая $U \gg W$.

В случае Na_xCoO_2 расчёты DMFT показывают, что при малых значениях U и ненулевом хундовском обмене J могут быть стабилизированы e'_g Ферми-карманы [140, 302]. С другой стороны, более свежие расчёты DMFT [303] подтверждают результаты приближения Гутцвиллера при условии, что расщепление кристаллического поля Δ около 50 мэВ. Это значение находится в согласии с нашим $\Delta = 53$ мэВ [30], так что наши результаты согласуются с DMFT.

3.4. Магнитный отклик в $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$

В этом разделе мы обсудим спиновую восприимчивость в приближении хаотических фаз (Random Phase Approximation, RPA) в недавно синтезированном $\text{Na}_{0.41}\text{CoO}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ [6]. В работе [6] описан ряд транспортных экспериментов над гидрированным и негидрированным монокристаллом высокого качества $\text{Na}_{0.41}\text{CoO}_2$. Обнаружено, что магнитные свойства негидрированного и

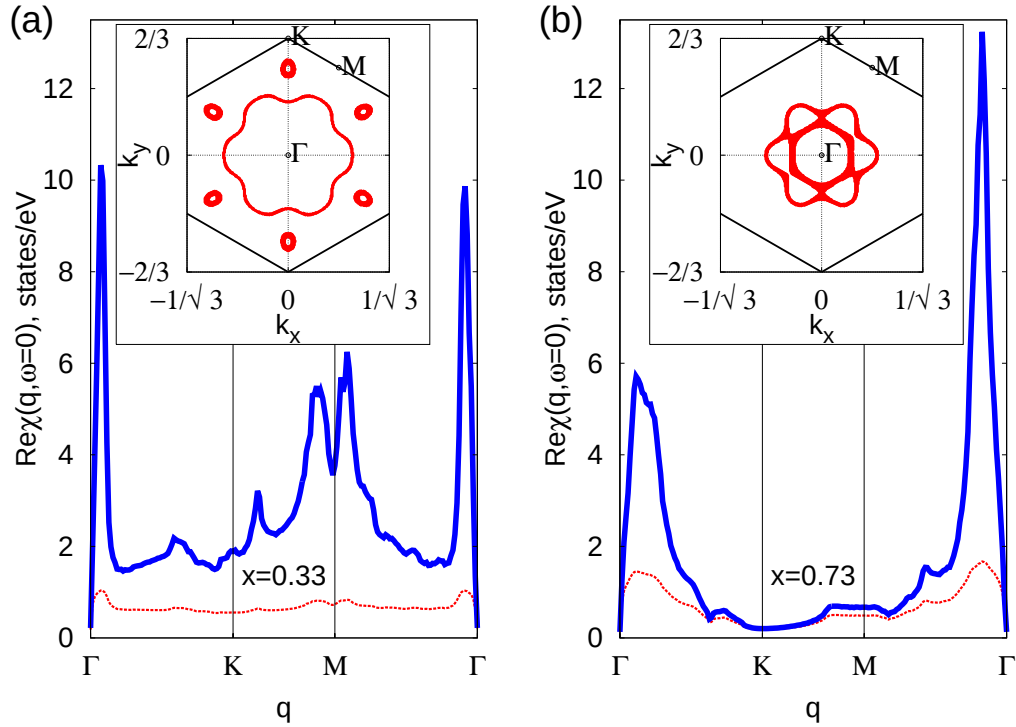


Рис. 3.8. Физическая спиновая восприимчивость $\text{Re}\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$ как функция импульса при (a) $x = 0.33$ и (b) $x = 0.73$. Голая восприимчивость ($U = J = 0$) показана тонким (красным) пунктиром, а в RPA с $U = 0.7$, $J = 0.3$ (a) и $U = 0.3$, $J = 0.1$ (b) - толстой сплошной (синей) линией. На вставках показаны соответствующие Ферми-поверхности.

частично гидрированного образцов похожи на высоких температурах, но ведут себя различно на температурах ниже ~ 50 К. Найден минимум внутриплоскостного сопротивления при $T \sim 11$ К и переход при ~ 50 К в широкой области приложенных магнитных полей в $\text{Na}_{0.41}\text{CoO}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$. Магнитные измерения говорят о ферромагнитном поведении при низких температурах.

Как указано в предыдущем разделе, электронные корреляции играют важную роль в физике кобальтитов. Они по большей части обусловлены одноузельными кулоновскими взаимодействиями. Поскольку Na_xCoO_2 является существенно многоорбитальной системой, в качестве модели мы используем гамильтониан взаимодействия, включающий одноузельные внутри- и межорбитальное хаббардовское отталкивание U и U' , хундовский обмен J и парный

перескок $J' = J$ [200, 304]

$$\begin{aligned}
H = & H_0 + U \sum_{f,\alpha} n_{f\alpha\uparrow} n_{f\alpha\downarrow} + J \sum_{f,\beta<\alpha} \sum_{\sigma,\sigma'} d_{f\alpha\sigma}^\dagger d_{f\beta\sigma'}^\dagger d_{f\alpha\sigma'} d_{f\beta\sigma} + \\
& + U' \sum_{f,\beta<\alpha} n_{f\alpha} n_{f\beta} + J' \sum_{f,\beta\neq\alpha} d_{f\alpha\uparrow}^\dagger d_{f\alpha\downarrow}^\dagger d_{f\beta\downarrow} d_{f\beta\uparrow},
\end{aligned} \tag{3.11}$$

где $n_{f\alpha} = n_{f\alpha\uparrow} + n_{f\alpha\downarrow}$ - сумма операторов числа дырок по спинам $\sigma = \uparrow, \downarrow$. В качестве одноэлектронного гамильтониана H_0 мы используем трёхорбитальную модель сильной связи (3.1) с параметрами для $\text{Na}_{0.33}\text{CoO}_2$.

Чтобы оценить, какой дальний магнитный порядок может сформироваться при определённом допировании, мы исследуем поперечную спиновую восприимчивость $\chi_{+-}^{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\mathbf{q}, \omega)$ в многоорбитальном формализме RPA [200]. Зафиксируем часть параметров взаимодействия, принимая, что в системе присутствует инвариантность относительно вращения спина. Это приводит к соотношению $U' = U - 2J$, оставляя независимыми два параметра: U и J .

При $J = 0$ и $x \lesssim 0.5$ спиновая восприимчивость имеет выраженные пики на АФМ векторе $\mathbf{Q}_{AFM} = \left\{ \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \right), \left(\frac{4\pi}{3}, 0 \right) \right\}$. Это отражает тенденцию системы к переходу во внутривекторное 120° антиферромагнитное состояние [30]. Увеличение хундовского обмена J приводит к изменению тенденции к ферромагнитному порядку, если на Ферми-поверхности присутствуют e'_g карманы [130]. Это видно из Рисунка 3.8(а). На Рисунке 3.8 показана рассчитанная действительная часть физической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2} \sum_{l,m} \chi_{+-}^{ll,mm}(\mathbf{q}, \omega)$ как функция импульса на частоте $\omega = 0$. Параметры взаимодействия выбраны так, чтобы остаться около магнитной неустойчивости, но не пересечь её. Небольшое изменение U или J приведёт к расходимости. Следовательно, позиции пиков соответствуют векторам упорядочения в магнитной фазе. При $x = 0.33$ и $x = 0.73$ пики максимальны вблизи $k = 0$, что говорит о тенденции к ферромагнитной неустойчивости. Однако, её природа различна. При $x = 0.33$ существует нестинг и, следовательно, большое рассеяние на векторе $\mathbf{Q}_{AFM}$. Но из-за большой плотности состояний от шести e'_g карманов и достаточно большой ве-

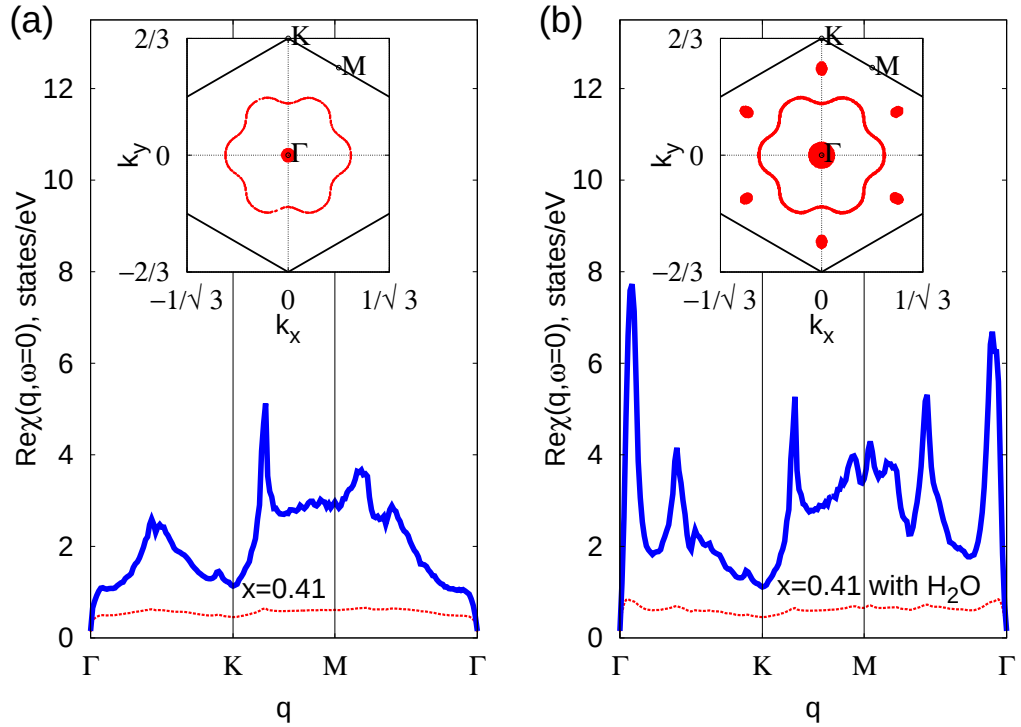


Рис. 3.9. Физическая спиновая восприимчивость $\text{Re}\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$ как функция импульса при (а) $x = 0.41$ и (б) $x = 0.41$ с изменённой энергией e'_g зоны, чтобы симулировать добавление воды. Голая восприимчивость ($U = J = 0$) показана тонким (красным) пунктиром, а в RPA ($U = 0.7$ и $J = 0.35$) - толстой сплошной (синей) линией. На вставках показаны соответствующие Ферми-поверхности.

личины $J \approx U/2$, АФМ нестабильность проигрывает нестабильности на малых импульсах, соединяющих e'_g карманы изнутри. С другой стороны, при $x = 0.73$ без e'_g карманов ферромагнитная нестабильность возникает благодаря сильно-му нестингу между внутренним и внешним Ферми-контурами, происходящими от a_{1g} зоны. Этот нестинг выражен даже в голей восприимчивости, как видно из Рисунка 3.8(b).

На Рисунке 3.9 показаны Ферми-поверхности в негидрированном и гидрированном $\text{Na}_{0.41}\text{CoO}_2$. Из ARPES-экспериментов [127] следует, что в гидрированных образцах $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ зона e'_g поднимается ближе к уровню Ферми, чем в негидрированном кобальтите. Поэтому, чтобы симулировать случай гидрированного кобальтита, мы уменьшили кристаллическое расщепление $a_{1g} - e'_g$, подвинув e'_g -зону к уровню Ферми. Расщепление было уменьшено на 10 мэВ. Вид-

но, что Ферми-поверхность в $\text{Na}_{0.41}\text{CoO}_2$ имеет форму сглаженного шестиугольника, что приводит к возникновению целого ряда волновых векторов нестинга, близких к $\mathbf{Q}_{AFM}$. При добавлении воды возникают шесть дополнительных e'_g -карманов, которые начинают поддерживать тенденцию к ферромагнетизму. Как видно из Рисунка 3.9(b), восприимчивость имеет пики вблизи $q = 0$. Аналогично случаю $x = 0.33$, большая плотность состояний от шести e'_g карманов и достаточно большая величина $J \approx U/2$ приводят к выигрышу ФМ нестабильности на малых импульсах, соединяющих e'_g карманы изнутри.

Итак, существует две причины, которые могут привести к наблюдаемой при низких температурах тенденции к внутриплоскостному ферромагнетизму [6]. Оба объяснения включают предположение, что интеркалированная вода является не только разделителем, но также или даёт дополнительное допирование, или изменяет зонную структуру таким образом, чтобы симулировать эффект допирования. Первое состоит в том, что e'_g Ферми-карманы присутствуют в $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. То, что при интеркаливании зона e'_g движется ближе к уровню Ферми, было получено в ARPES [127]. То, что она так и остаётся под уровнем Ферми может быть эффектом поверхности [22] и в образце всё-таки могут быть e'_g Ферми-карманы. Второе возможное объяснение ферромагнитного порядка состоит в том, что вода настолько изменяет допирование (или искажает зонную структуру), что Ферми-поверхность $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ становится как в образце без воды при $x = 0.73$, показанном на Рисунке 3.8(b). Это объяснение менее вероятно, поскольку такое сильное изменение зонной структуры повлияло бы на все транспортные свойства по сравнению с негидрированным образцом, а такое в эксперименте [6] не наблюдается.

3.5. Обсуждение

Мы получили зависящую от допирования магнитную восприимчивость коллективизированных электронов $\chi(q, \omega)$ в модели сильной связи с перво-

принципными параметрами. Пики в $\chi(q, \omega)$, обусловленные нестингом Ферми-поверхности, имеют существенную зависимость от допирования. Дело в том, что при малом допировании основной вклад даёт рассеяние на большом Ферми-кармане, образованном в основном a_{1g} зоной. Этот вклад связан с нестингом на векторе 120-градусного антиферромагнетизма Q_{AFM} и показывает тенденцию электронной подсистемы к этому АФМ порядку. Следовательно, если такой порядок не реализуется, будут наблюдаться АФМ флуктуации, что согласуется с экспериментом. Отмеченная тенденция существует вплоть до критической концентрации x_m , которая связана с уходом от условия нестинга благодаря изменению объёма Ферми-поверхности, а также связана со следующим фактом. Дело в том, что зонные расчёты приводят к локальному минимуму в дисперсии a_{1g} зоны в районе Γ -точки. При допировании электронами a_{1g} зона заполняется, и локальный минимум приводит к возникновению электронного кармана малого радиуса. Рассеяние на нём начинает доминировать и при $x > x_m$ система показывает тенденцию к ферромагнитным флуктуациям. Величина концентрации x_m , полученная из модели t_{2g} зон с дисперсией на основе зонных расчётов, равна 0.58. Расчёты в приближениях Хаббард-I и Гутцвиллера показали, что учёт сильных электронных корреляций не приводит к качественным изменениям, но количественно x_m сдвигается в область больших концентраций и становится порядка 0.7, что согласуется с наблюдаемыми данными [106, 108, 148]. Стоит отметить, что электронный карман малого радиуса вблизи Γ -точки не был найден в ARPES, но, как было сказано ранее, современные ARPES данные для слоистых кобальтитов не заслуживают доверия из-за чувствительности метода к поверхности образца и противоречия выводов, основанных на ARPES, экспериментальным результатам, полученным другими методами.

К аналогичному значению x_m привёл одновременный учёт электронных корреляций и потенциала, создаваемого ионами Na [305]. При этом наличие электронного кармана малого радиуса не являлось необходимым условием возникновения ферромагнитного порядка, основную роль в этом играли потенциал

разупорядоченного Na.

Отдельно стоит остановиться на вопросе присутствия или отсутствия Ферми-карманов, обусловленных e'_g -зоной. Основываясь на модели t_{2g} -зон с дисперсией из LDA расчётов, и используя многозонное приближение Гутцвиллера, мы и авторы работы [132] получили, что при концентрациях $x > 0.2$ карманы на поверхности Ферми отсутствуют, так как сильное кулоновское отталкивание сдвигает e'_g -зону ниже уровня Ферми, приводя к орбитально поляризованному состоянию с единственной цилиндрической поверхностью Ферми с центром в Γ -точке.

С другой стороны, расчёты, основанные на многоорбитальной модели Хаббарда и динамической теории среднего поля (DMFT), обнаружили, что карманы на поверхности Ферми должны быть даже больше по размерам, чем предсказывает LDA [306]. Противоречие между результатами двух теорий для сильно-коррелированных систем, теории среднего поля (приближение Гутцвиллера) и динамической теории среднего поля (DMFT), были разрешены в работе [303]. Было показано, что DMFT приводит к тому же результату, что и приближение Гутцвиллера, если изначально расщепление Δ_{ae} уровней a_{1g} и e'_g положительное, т.е. e'_g уровни расположены ниже по энергии. Отметим, что этот результат не зависит от величины хаббардовского отталкивания U и хундовского обмена J . Следовательно, знак Δ_{ae} является качественно важным. Подгонка дисперсии многоорбитальной модели сильной связи (пять d -орбиталей Co и три p -орбитали O) под LDA привела к $\Delta_{ae} = -200$ мэВ для $x = 0.3$ [120]. При проектировании LDA расчётов на модель сильной связи для Co t_{2g} -орбиталей найдено $\Delta_{ae} = 53$ мэВ [30], а альтернативная процедура получения параметра расщепления привела к значению -144 мэВ [140]. Квантово-химические методы привели к положительной величине расщепления равной 315 мэВ [307]. Для того чтобы навести порядок в вопросе вычисления параметра расщепления, в работе [308] был проведён первопринципный расчёт Δ_{ae} с учётом двух слоёв CoO_2 на элементарную ячейку и без проектирования на модель сильной связи. Как выяснилось, на

результат влияют ионы Na, учёт которых был сделан без использования приближения виртуального кристалла или какого-либо другого. В итоге авторы работы [308] получили отрицательное значение Δ_{ae} порядка -100 мэВ. Из этого следует, что даже при учёте эффектов сильных корреляций, дырочные e'_g карманы должны оставаться на Ферми-поверхности вплоть до высоких концентраций $x \approx 2/3$, если, конечно, мы верим результатам DMFT. На самом деле эта теория в двумерном случае не может быть обоснована, так обратная размерность пространства не мала. Кроме того, в приближении DMFT массовый оператор не зависит от квазиимпульса, так что описание тонких деталей закона дисперсии и поверхности Ферми не под силу этим расчётам. Приближение Гутцвиллера, использованное нами и в работе [132], является хорошим интерполяционным решением в теории металлических сильно коррелированных систем, и его результаты в данном случае более надёжны.

Мы также рассмотрели влияние корреляций на бислойное расщепление в приближении Гутцвиллера. Оно существенно уменьшилось по сравнению с результатами LDA+ U . Это может объяснить, почему бислойное расщепление не наблюдалось в ARPES, хотя в зонной структуре LDA оно очень сильно выражено.

Для недавно синтезированных монокристаллов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ указано две причины, которые могут привести к наблюдаемой при низких температурах тенденции к внутриплоскостному ферромагнетизму [6]. Оба объяснения связаны с тем, что интеркалированная вода, видимо, является не только разделителем, но также даёт дополнительное допирование или изменяет зонную структуру таким образом, чтобы симулировать эффект допирования.

3.6. Заключение

Для слоистых кобальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ получена эффективная многозонная модель, в которой исследована эволюция магнитного отклика с допиро-

ванием. Влияние сильных электронных корреляций рассмотрено в приближении Гутцвиллера. Показано, что фазовую диаграмму кобальтитов можно качественно объяснить в модели коллективизированных электронов с учётом зависящего от допирования изменения топологии Ферми-поверхности. В приближении случайных фаз исследована магнитная восприимчивость $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ и показано, что наблюдаемая при низких температурах тенденция к внутриплоскостному ферромагнетизму может возникнуть, если предполагать, что интеркалированная вода является не только разделителем, но (1) также даёт дополнительное допирование или (2) изменяет зонную структуру таким образом, чтобы симулировать эффект допирования. В случае (1) предположение состоит в том, что e'_g Ферми-карманы присутствуют в $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. В случае (2) возможное объяснение состоит в том, что вода настолько изменяет допирование или искажает зонную структуру, что Ферми-поверхность $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ становится как в образце без воды при $x = 0.73$.

Глава 4

Спиновая восприимчивость в сверхпроводящей фазе кобальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$

Спиновая динамика необычных сверхпроводников (не s -тип сверхпроводящей щели) представляет собой фундаментальный интерес из-за своих интересных и необычных свойств. Она включает как нетривиальное поведение магнитной части сдвига Найта в спин-триплетных сверхпроводниках [309], так и появление спин-резонансного пика, наблюдаемого в сверхпроводящем состоянии ВТСП купратов со спин-синглетной $d_{x^2-y^2}$ симметрией параметра порядка, см. работу [310] и ссылки в ней. Более того, магнитные возбуждения часто рассматриваются как возможный “клей” для электронов в куперовских парах в соединениях с тяжёлыми фермионами и купратах.

В слоистых кобальтитах пока нет ясности с симметрией параметра порядка. Анализ влияния сверхпроводимости на магнитную восприимчивость может быть использован для определения симметрии параметра порядка сверхпроводника. Далее мы систематически исследуем влияние симметрии сверхпроводящей щели и электронной структуры на динамическую спиновую восприимчивость в сверхпроводнике $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ в трёх разных моделях: модель a_{1g} -зоны с перескоками между ближайшими соседями, реалистичная модель t_{2g} -зон с и без e'_g -карманов на Ферми-поверхности [28]. Показано, что магнитный отклик в нормальном состоянии определяется несоизмеримыми антиферромагнитными флуктуациями на больших импульсах, что согласуется с экспериментальной температурной зависимостью скорости спин-решёточной релаксации. Также нами продемонстрировано, что присутствие или отсутствие e'_g -карманов на Ферми-поверхности не влияет существенно на это заключение. В сверхпроводящем состоянии наши результаты для $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy} симметрий параметра порядка согласуются с экспериментальными данными, а $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ симметрия

без линий нулей на Ферми-поверхности - исключается. Также мы указываем, что спин-резонансный пик, предложенный ранее, маловероятен в реалистичной зонной структуре $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. И даже если он реализуется, то ограничен антиферромагнитным волновым вектором и быстро исчезает за его пределами.

4.1. Модель a_{1g} -зоны

Сначала мы рассмотрим простую модель a_{1g} -зоны, представленной гамильтонианом модели Хаббарда на треугольной решётке:

$$H = - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (4.1)$$

где $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ ($a_{i\sigma}^\dagger$) - оператор уничтожения (рождения) дырки на a_{1g} -орбитали Co на узле i со спином σ . Здесь $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 2t[\cos k_y + 2 \cos(k_x \sqrt{3}/2) \cos(k_y/2)] - \mu$, $t = 0.123$ эВ - интеграл перескока между ближайшими соседями, а μ - химпотенциал, который самосогласованно вычислялся при $x = 0.33$. Энергетическая дисперсия $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ вдоль основных направлений гексагональной зоны Бриллюэна и Ферми-поверхность показаны на Рисунках 4.1(b) и (c), соответственно.

Чтобы получить динамическую спиновую восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, i\omega_m)$, мы используем приближение хаотических фаз (Random Phase Approximation, RPA):

$$\chi_{RPA}(\mathbf{q}, i\omega_m) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}{1 - U\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}, \quad (4.2)$$

где $\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)$ восприимчивость БКШ - голая восприимчивость в сверхпроводящем состоянии:

$$\begin{aligned} \chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m) = & \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{f(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(E_{\mathbf{k}})}{i\omega_m - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}}} C_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^+ + \right. \\ & + \frac{1 - f(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(E_{\mathbf{k}})}{2} C_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^- \times \\ & \times \left. \left(\frac{1}{i\omega_m + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{i\omega_m - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.3)$$

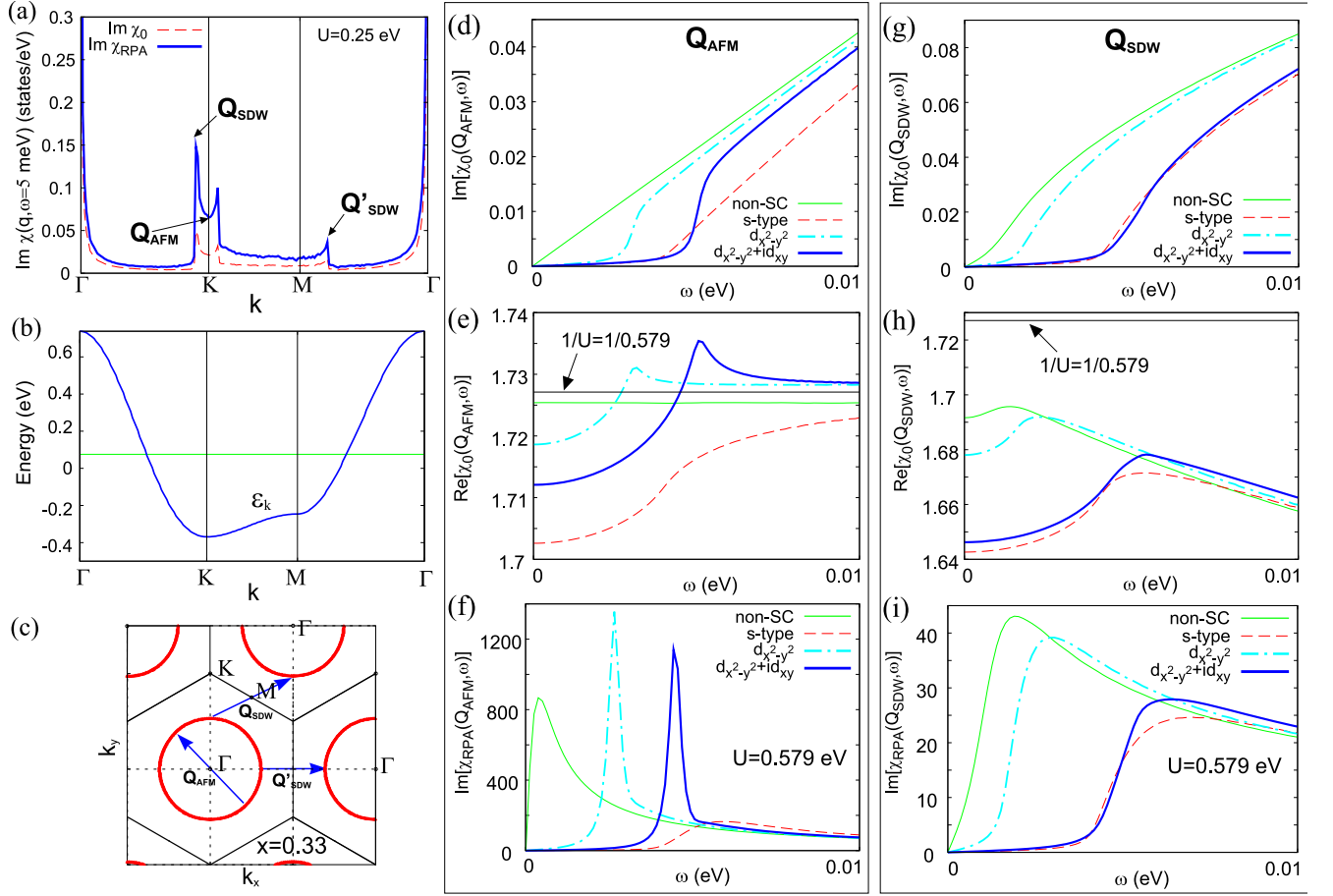


Рис. 4.1. Результаты в модели a_{1g} -зоны. (а) $\mathbf{q}$ -зависимость $\text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ и $\text{Im}\chi_{RPA}(\mathbf{q}, \omega)$ при $\omega = 5$ мэВ в нормальной (non-SC) фазе. Вектора рассеяния $\mathbf{Q}_{AFM}$, $\mathbf{Q}_{SDW}$ и $\mathbf{Q}'_{SDW}$ показаны стрелками. (б) и (с) - энергетическая дисперсия, где горизонтальная зелёная линия обозначает положения химпотенциала, и Ферми-поверхность. На панелях (д)-(ф) показаны мнимая и действительная части χ_0 и мнимая часть χ_{RPA} при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AFM}$ в нормальной и сверхпроводящей фазах для различных симметрий параметра порядка. Те-же самые величины, но на волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{SDW}$, показаны на панелях (г)-(и).

Здесь $C_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^{\pm} = 1 \pm \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \text{Re}(\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^*)}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}$ - так называемые факторы когерентности БКШ, ω_m - мацубаровская частота, $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}} + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$, а $f(E)$ - фермиевская функция. Далее мы всегда будем брать амплитуду параметра порядка $\Delta_0 = 2$ мэВ. Для численных расчётов было введено искусственное уширение функции Грина с параметром $\delta = 0.2$ мэВ.

На Рисунке 4.1(а) показаны голая восприимчивость и восприимчивость в RPA в несверхпроводящем состоянии при $\omega = 5$ мэВ и $U = 0.25$ эВ. В магнитном отклике преобладает рассеяние на *несоизмеримом* векторе $\mathbf{Q}_{SDW} =$

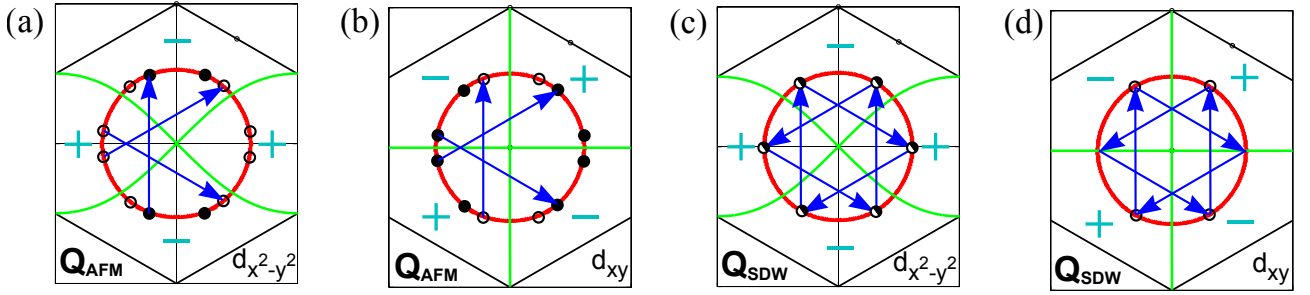


Рис. 4.2. Вычисленная Ферми-поверхность в модели a_{1g} -зоны. Положения нулей $d_{x^2-y^2}$ -типа [(a),(c)] и d_{xy} -типа [(b),(d)] сверхпроводящих щелей показаны сплошными (зелёными) линиями. Знаки плюс и минус соответствуют знакам параметра порядка. Состояния на Ферми-поверхности, связанные векторами $\mathbf{Q}_{AFM}$ и $\mathbf{Q}_{SDW}$, показаны кружками.

$(0, 0.598) \approx (0, 3/5)$. Величина $\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega)$ на соизмеримом векторе $\mathbf{Q}_{AFM} = \{(0, 2/3), (1/\sqrt{3}, 1/3)\}$ значительно меньше. Присутствует также рассеяние на ещё одном несоизмеримом векторе $\mathbf{Q}'_{SDW}$. Наличие целого набора несоизмеримых векторов с большой величиной магнитной восприимчивости говорит о тенденции делокализованных электронов на треугольной решётке к формированию неустойчивости волны спиновой плотности (Spin Density Wave, SDW).

На Рисунках 4.1(d) и (e) показаны мнимая и действительная части голой восприимчивости $\chi_0(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega)$ как функции частоты ω при $T = 1$ К. В несверхпроводящем состоянии мнимая часть линейна по ω на низких частотах, что является типичным затуханием Ландау в картине Ферми-жидкости. В сверхпроводящей фазе мнимая часть магнитной восприимчивости зашелена. Для s -типа величина щели Ω_g равна $2\Delta_0$. При частотах, больших, чем Ω_g , $\text{Im}\chi_0$ постепенно увеличивается от нуля. С другой стороны, для симметрии d -типа самое малое значение $\Omega_g = |\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}|$ лежит на Ферми-поверхности. Очевидно, что для не s -типа симметрии оно меньше, чем $2\Delta_0$. Из Рисунков 4.2(a) и (b) видно, что вектор $\mathbf{Q}_{AFM}$ соединяет части Ферми-поверхности, где $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}$, и некоторые части, где $\Delta_{\mathbf{k}} = +\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}$. Для $d_{x^2-y^2}$ -типа сверхпроводящей щели существуют четыре пары точек первого типа и две пары второго. Из-за малых значений $|\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}|$ для первого типа процессов, как видно из

Рисунка 4.2(а), $\text{Im}\chi_0$ имеет скачок на Ω_g . Это происходит из-за аномальных факторов когерентности $C_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^-$. Второй тип процессов даёт вклад на энергиях, больших чем Ω_g из-за большой величины $|\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}|$. Следовательно, всё вместе даст скачок $\text{Im}\chi_0$ на Ω_g . Соответственно, в действительной части появится логарифмическая особенность, как видно на Рисунке 4.1(е). В RPA возникает полюс (спиновый резонанс) в полной восприимчивости на частотах меньше Ω_g , если $\text{Im}\chi_0(\mathbf{q},\omega) = 0$ и при этом $1/U = \text{Re}\chi_0(\mathbf{q},\omega)$. Из-за логарифмического характера особенности это условие можно удовлетворить для любого малого значения U , что даст положение резонанса близко или прямо на Ω_g . Однако, при очень малом U даже малое число примесей “размывает” особенность и подавит резонансный пик. В $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ значение U должно быть достаточно большим, что сдвигает позицию спинового резонанса на энергии меньшие, чем Ω_g , и делает резонанс устойчивым относительно рассеяния на примесях. Вычисленная полная восприимчивость при $U_{res}=0.579$ эВ показана на Рисунке 4.1(ф). Резонанс возникает для обоих $d_{x^2-y^2}$ - и $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -типов симметрии, однако, значения Ω_g немного отличаются. Для d_{xy} -симметрии ситуация противоположна. Из Рисунка 4.2(б) видно, что по сравнению с $d_{x^2-y^2}$ -типом, существует две пары точек на Ферми-поверхности, где $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}$ и четыре пары точек, где $\Delta_{\mathbf{k}} = +\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}$. Ω_g определяется вторым типом процессов и, следовательно, не будет логарифмической особенности в $\text{Re}\chi_0$ на Ω_g . из-за первого типа процессов особенность возникает на бóльших частотах, но условие возникновения резонанса не будет удовлетворено. Следовательно, для d_{xy} -типа симметрии не ожидается возникновение спинового резонанса.

Значение U_{res} очень мало для того, чтобы быть одноузельным кулоновским отталкиванием, которое порядка нескольких эВ. Эффективное взаимодействие U , входящее в модель (4.1), может происходить от хундовского обмена J_H . в слоистых кобальтитах значение J_H порядка 1 эВ [15]. Как недавно было показано, даже такое маленькое значение может существенно повлиять на заполнение орбиталей a_{1g} и e'_g [140, 302, 306]. Принимая во внимание такое значение мы

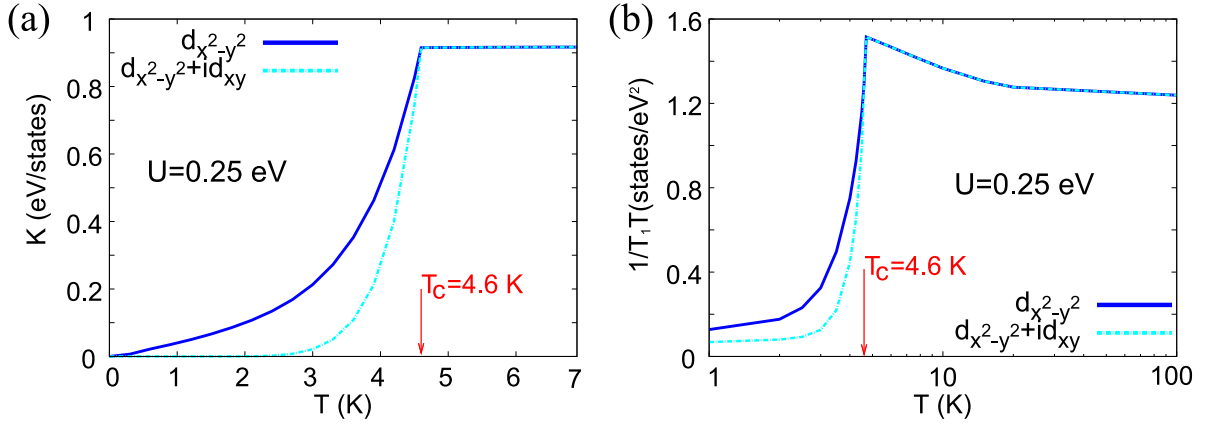


Рис. 4.3. Вычисленная температурная зависимость сдвига Найта $K(T)$ (a) и скорость спин-решёточной релаксации $1/T_1T$ (b) в модели a_{1g} -зоны. В (b) использована логарифмическая шкала температур. Здесь мы предполагали обычную температурную зависимость щели БКШ: $\Delta_0(T) = \Delta_0 \sqrt{1 - T/T_c}$.

можем предположить, что $U \propto J_H$. Большие значения U приводят в наших вычислениях к магнитно нестабильности волны спиновой плотности. Отметим, что в многоорбитальной модели (3.11), строго учитывающей матричные элементы перехода от орбитальной к зонной картине, значение U , соответствующее переходу в фазу SDW, больше, чем в упрощённом однозонном описании, используемом нами сейчас. Поэтому низкие значения U , используемые в этом разделе, могут быть просто величиной эффективного хаббардовского отталкивания для ограниченного используемого набора орбиталей и упрощённой модели взаимодействия (4.1).

Ситуация изменяется для волнового вектора $\mathbf{Q}_{SDW}$, см. Рисунки 4.1(g)-(i). Присутствует одно существенное отличие в низкоэнергетическом поведении $\text{Im}\chi_0(\mathbf{Q}_{SDW}, \omega)$. А именно, в нормальном состоянии рассеяние нелинейно на малых ω . Это, очевидно, является следствием нестабильности $2\mathbf{k}_F$ и приводит к “неландаусскому” затуханию на этом волновом векторе. В сверхпроводящем состоянии ситуация также существенно отличается от случая $\mathbf{Q}_{AFM}$. Как видно из Рисунков 4.2(c) и (d) существует равное количество вкладов, для которых $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{SDW}}$ и для которых $\Delta_{\mathbf{k}} = +\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{SDW}}$. Как результат, в мнимой части скачок не возникает и действительная часть χ_0 в сверхпроводящем состо-

янии меньше, чем в нормальном. Следовательно, при разумных значениях U не будет спин-резонансного пика в χ_{RPA} , см. Рисунок 4.1(i).

Формирование резонансного пика ниже T_c в необычных сверхпроводниках — это давно известное следствие знакопеременности сверхпроводящего параметра порядка. Изначально его обсуждали в контексте ВТСП купратов [311]. В слоистых кобальтитах появление спин-резонансного пика для нескольких симметрий параметра порядка было проанализировано в простой однозонной модели в работе [312]. В отличие от работы [312], мы обнаружили, что резонансный пик, даже в простой модели a_{1g} -зоны, очень чувствителен к малым изменениям U и к беспорядку. Как результат, резонансный пик ограничено вектором $\mathbf{Q}_{AFM}$ и исчезает при $|\mathbf{q}| < |\mathbf{Q}_{AFM}|$.

Температурная зависимость сдвига Найта $K(T)$ и спин-решёточной релаксации $1/T_1T$ вычислим с помощью следующих выражений:

$$K(T) \propto \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \text{Re} \chi(\mathbf{q}, \omega = 0), \quad (4.4)$$

$$1/T_1T \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)}{\omega}. \quad (4.5)$$

На Рисунке 4.3 эти величины показаны как функции температуры. В нормальном состоянии $1/T_1T$ увеличивается с уменьшением температуры, что отражает наличие несоизмеримых антиферромагнитных флуктуаций в системе. В то же время, сдвиг Найта является константой, что говорит об отсутствии флуктуаций с малыми $\mathbf{q}$. Ниже T_c обе наблюдаемые величины начинают уменьшаться из-за открытия сверхпроводящей щели в энергетическом спектре. Как и ожидалось, уменьшение экспоненциально для $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -типа симметрии из-за отсутствия нулей в $E_{\mathbf{k}}$. Для $d_{x^2-y^2}$ -типа поведение $1/T_1T$ и $K(T)$ следует стандартной степенной температурной зависимости из-за наличия линий нулей на Ферми-поверхности. В следующем разделе мы сравним наши результаты с экспериментальными данными в рамках более реалистичной модели сверхпроводящих кобальтитов.

4.2. Модель t_{2g} -зон

Модель a_{1g} -зоны чрезмерно упрощена для описания физики $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ поскольку расщепление уровней $a_{1g}-e'_g$, которое мы обозначим $\delta\epsilon$, всего лишь 53 мэВ [30]. Как результат, возникает существенная гибридизация зон a_{1g} и e'_g , полностью отсутствующая в модели a_{1g} -зоны. Зоны e'_g могут формировать дырочные карманы на Ферми-поверхности помимо большого кармана a_{1g} [117]. Чтобы учесть все эти детали мы далее рассмотрим магнитный отклик в полной трёхзонной модели t_{2g} -зон, включающей состояния кобальта a_{1g} и e'_g .

Гамильтониан свободных электронов модели t_{2g} -зоны в дырочном представлении даётся выражением (3.1). Самосогласованный расчёт с параметрами из LDA при $x = 0.33$ приводят к Ферми-поверхности и дисперсии, показанным на Рисунках 4.4(b) и (c), соответственно.

Из-за ненулевых матричных элементов межорбитального перескока зоны a_{1g} и e'_g гибридизуются и только одна из гибридизованных зон пересекает уровень Ферми давая основной вклад в низкоэнергетическую физику. Мы будем обозначать эту зону $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Отметим, что она существенно отличается от простой a_{1g} -зоны. Далее мы используем именно эффективную зону $\epsilon_{\mathbf{k}}$ для расчётов динамической спиновой восприимчивости с эффективным хаббардовским взаимодействием U .

Ферми-поверхность имеет более сложную структуру, чем в модели a_{1g} -зоны. Во-первых, e'_g состояния присутствуют на Ферми-поверхности и сильно гибридизуются с состояниями a_{1g} . В то же время, центральная часть Ферми-поверхности форме “сглаженного” шестиугольника обязана перескокам на следующие за ближайшими соседними узлами, которые включены в модель t_{2g} -зон и отсутствовали в рассмотренной выше модели a_{1g} -зон. Сложная форма Ферми-поверхности приводит к целому ряду дополнительных векторов рассеяния и соответствующих им пиков в χ_0 , см. Рисунок 4.4(a). В частности, есть че-

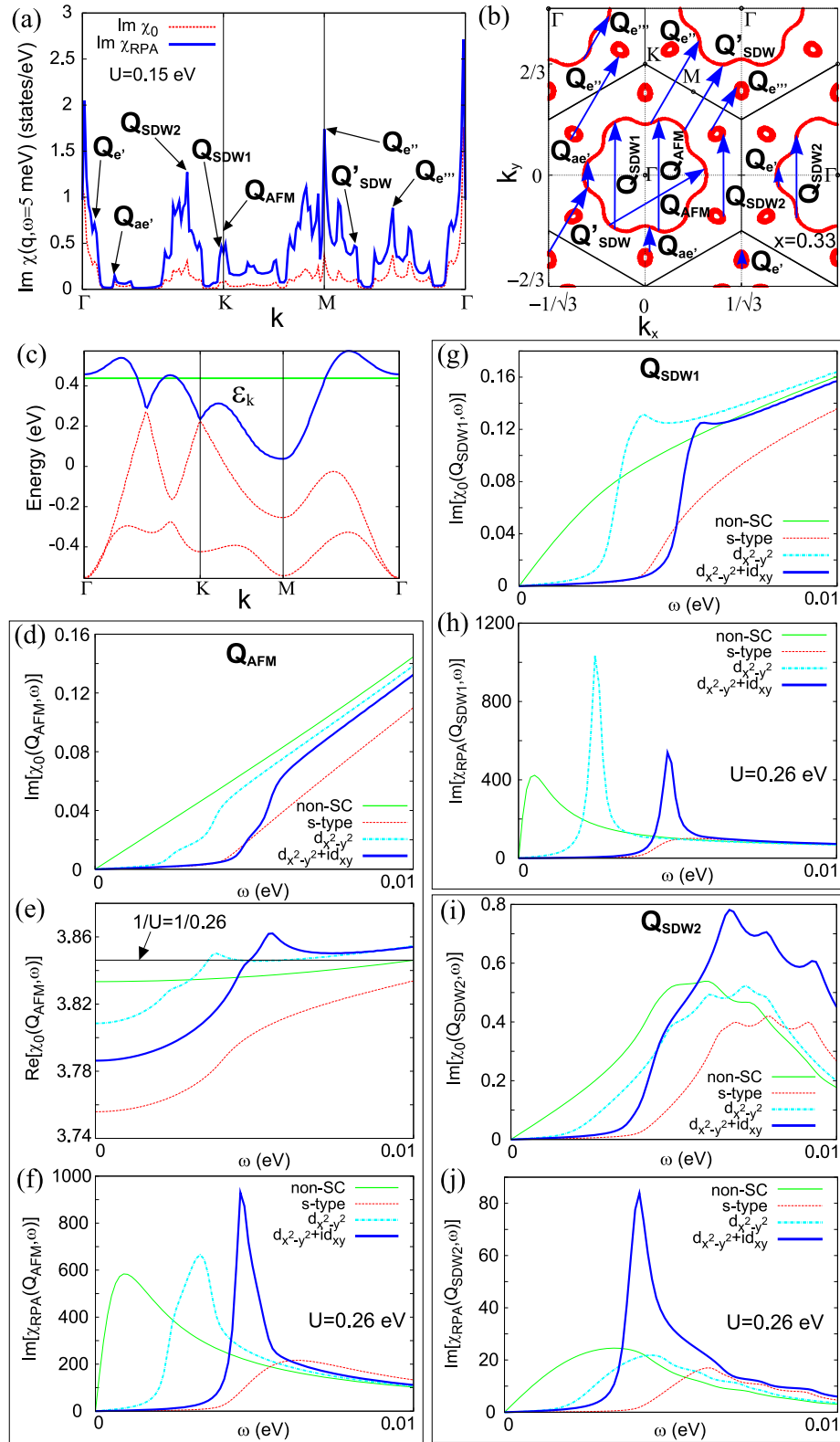


Рис. 4.4. Результаты в модели t_{2g} -зон. (a) $\mathbf{q}$ -зависимость $\text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ и $\text{Im}\chi_{RPA}(\mathbf{q}, \omega)$ при $\omega = 5$ мэВ в нормальной (non-SC) фазе. Вектора рассеяния показаны стрелками. (b) Ферми-поверхность и вектора рассеяния. На панели (c) показана энергетическая дисперсия, где толстой синей линией отмечена зона, использованная для вычисления восприимчивости, а горизонтальная зелёная линия обозначает положения химпотенциала. На панелях (c)-(e), (g)-(h) и (i)-(j) показаны χ_0 и χ_{RPA} в нормальной и сверхпроводящей фазах для различных симметрий параметра порядка при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AFM}$, $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{SDW1}$ и $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{SDW2}$, соответственно.

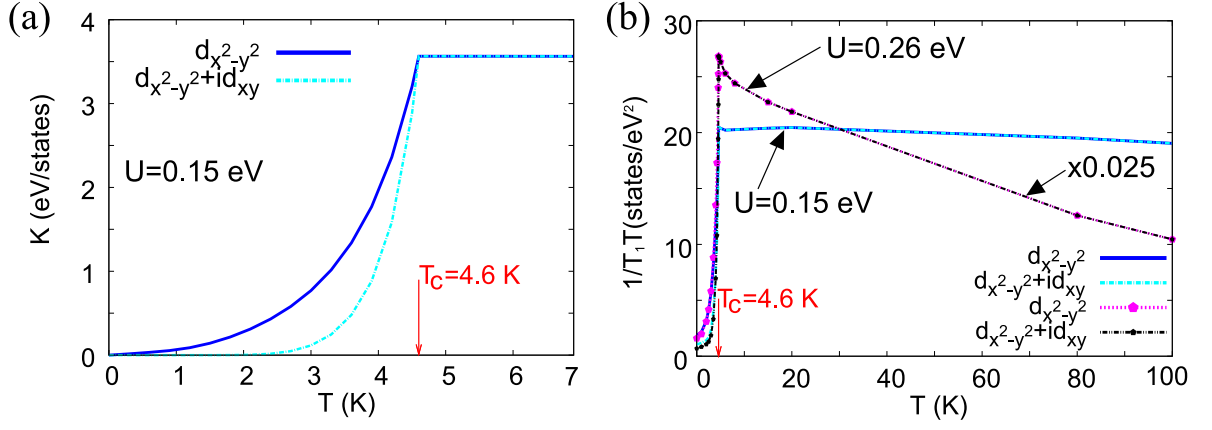


Рис. 4.5. Вычисленная температурная зависимость сдвига Найта $K(T)$ (a) и скорость спин-решётной релаксации $1/T_1T$ (b) в модели t_{2g} -зон.

тыре вектора рассеяния, соединяющие e'_g - e'_g Ферми-карманы [$\mathbf{Q}_{e'}$, $\mathbf{Q}_{e''}$, $\mathbf{Q}_{e'''}$ и $\mathbf{Q}_{SDW2} = (0, 0.495)$], и два вектора, соединяющих a_{1g} - e'_g Ферми-карманы [$\mathbf{Q}_{ae'}$ и $\mathbf{Q}'_{SDW}$]. В то же время, эти вектора соединяют части центральной Ферми-поверхности и полная магнитная восприимчивость включает и этот вклад тоже. Ещё есть два вектора $\mathbf{Q}_{AFM}$ и $\mathbf{Q}_{SDW1} = (0, 0.649)$, возникающие благодаря искривлённой форме центрального a_{1g} -кармана. Выраженные пики присутствуют на всех этих волновых векторах в голой восприимчивости и в магнитной восприимчивости в RPA ($U = 0.15$ эВ). Снова, подобно модели a_{1g} -зоны, в магнитный отклик рассеянием на соизмеримом волновом векторе $\mathbf{Q}_{AFM}$ вносит не основной вклад. Общая картина магнитного отклика согласуется с представленной в работе [120].

В нормальной фазе и в сверхпроводящей фазе с s -типом параметра порядка поведение $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ на $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AFM}$ подобно поведению в модели a_{1g} -зоны, см. Рисунки 4.4(d)-(f). Для d -типа симметрии, однако, при $\omega \geq \Omega_g$ сначала вносят вклад состояния с равными знаками сверхпроводящего параметра порядка (второй тип процессов) и скачок в $\text{Im}\chi_0(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega)$ возникает на высоких энергиях. Форма Ферми-поверхности и сложная дисперсия зон в реалистичной модели t_{2g} -зон приводят к такому эффекту. Следовательно, хотя резонансный пик в $\text{Im}\chi_{RPA}(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega)$, в принципе, может существовать, возникнуть он может только в узком интервале значений U . Этот интервал определяется резонанс-

ным условием в сверхпроводящем состоянии и стабильностью парамагнитного состояния выше T_c . Здесь мы использовали $U_{res} = 0.26$ эВ, что почти в два раза меньше значения для модели a_{1g} -зоны.

Хотя формирование спинового резонанса и нереалистично на АФМ волновом векторе $\mathbf{Q}_{AFM}$, он может возникнуть на других векторах. На Рисунках 4.4(g)-(j) показана мнимая часть $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ и $\chi_{RPA}(\mathbf{q}, \omega)$ на векторах $\mathbf{Q}_{SDW1}$ и $\mathbf{Q}_{SDW2}$. На высоких энергиях для обоих векторов проявляется сложность зонной структуры модели t_{2g} -зон. Отклонения от линейного по ω затухания начинаются уже на низких энергиях, меньших, чем Ω_g . При $U = U_{res}$ спиновый резонанс присутствует на $\mathbf{Q}_{SDW1}$ для обоих d -типов симметрии. Однако, на векторе $\mathbf{Q}_{SDW2}$ резонансный пик присутствует только для $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -типа симметрии. Как и в ситуации с $\mathbf{Q}_{AFM}$, это происходит из-за малого интервала допустимых значений U .

На Рисунке 4.5 показаны результаты для $1/T_1T$ и $K(T)$. Ниже перехода в сверхпроводящее состояние поведение очень похоже на результаты в модели a_{1g} -зоны. Это происходит из-за того, что ниже T_c температурные зависимости $1/T_1T$ и $K(T)$ определяются симметрией сверхпроводящей щели и, в частности, её нодальной структурой. Стоит отметить более сильные АФМ флуктуации в нормальном состоянии. Для практически одинаковых значений U это обусловлено большей плотностью состояний на уровне Ферми и изменениями Ферми-скоростей по сравнению с моделью a_{1g} -зоны. Такое поведение наблюдается в экспериментальных данных ЯКР [149, 150, 313]. Интересно, что без воды в несверхпроводящих образцах $\text{Na}_{0.33}\text{CoO}_2$ АФМ флуктуации значительно слабее [150]. В нашей теории, однако, нет разницы между гидрированными и негидрированными образцами.

Отметим, что присутствие e'_g -карманов на Ферми-поверхности может снять вырождение между тремя d -типами сверхпроводящих состояний. Поскольку в $d_{x^2-y^2}$ -тип сверхпроводника e'_g -карманы полностью зашелены, возникает дополнительная энергия конденсации, сравните топологию линий нулей

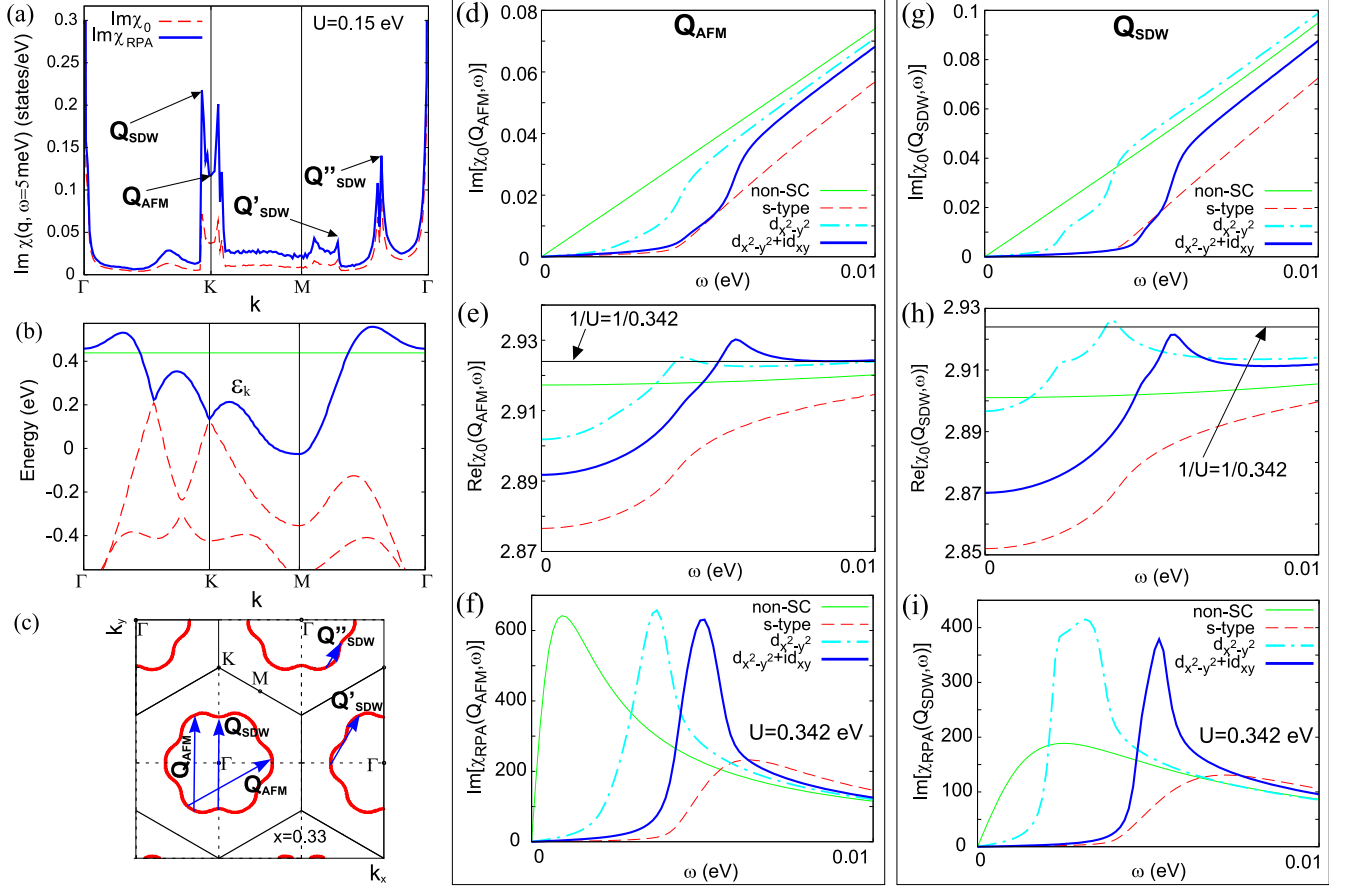


Рис. 4.6. Результаты в модели t_{2g} -зон с увеличенным расщеплением кристаллического поля. (a) $\mathbf{q}$ -зависимость $\text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ и $\text{Im}\chi_{RPA}(\mathbf{q}, \omega)$ при $\omega = 5$ мэВ в нормальной (non-SC) фазе. Вектора рассеяния $\mathbf{Q}_{AFM}$, $\mathbf{Q}_{SDW}$, $\mathbf{Q}'_{SDW}$, и $\mathbf{Q}''_{SDW}$ показаны стрелками. (b) и (c) - энергетическая дисперсия и Ферми-поверхность с векторами рассеяния. Толстой синей линией отмечена зона, использованная для вычисления восприимчивости, а горизонтальная зелёная линия обозначает положения химпотенциала. На панелях (d)-(f) показаны мнимая и действительная части χ_0 , а также мнимая часть χ_{RPA} , в нормальной и сверхпроводящей фазах для различных симметрий параметра порядка на $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AFM}$. Те-же самые величины при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{SDW}$ показаны на панелях (g)-(i).

на Рисунке 4.2(а) и Ферми-поверхность на Рисунке 4.4(б). В d_{xy} -типе сверхпроводника эта дополнительная энергия будет, сравните Рисунок 4.2(б) и Ферми-поверхность на Рисунке 4.4(б).

Поскольку до сих пор нет ясности с топологией Ферми-поверхности в гидрированных кобальтитах, мы рассмотрим случай, когда e'_g зона находится под уровнем Ферми и, следовательно, отсутствуют малые e'_g -карманы. Для этого мы в модели t_{2g} -зон увеличим расщепление за счёт кристаллического поля на 100 мэВ до значения $\delta\epsilon = 153$ мэВ. Это приводит к отсутствию e'_g -состояний на уровне Ферми, см. Рисунок 4.6(б). Поведение динамической спиновой восприимчивости при $U = 0.15$ эВ и $\omega = 5$ мэВ, показанное на Рисунке 4.6(а), во многом подобно поведению в простой модели a_{1g} -зоны с дополнительными деталями из-за особенностей (форма “сглаженного шестиугольника”) большой Ферми-поверхности, показанной на Рисунке 4.6(с). Рассеяние наиболее выражено на векторе $\mathbf{Q}_{SDW} = (0, 0.633)$, который меньше аналогичного в a_{1g} -модели. Присутствует интенсивное рассеяние на векторе $\mathbf{Q}_{SDW}''$, возникающее благодаря криволинейной форме Ферми-поверхности.

На Рисунках 4.6(d)-(f) и (g)-(i) показана магнитная восприимчивость на векторах $\mathbf{Q}_{AFM}$ и $\mathbf{Q}_{SDW}$, соответственно. В отличие от обеих моделей a_{1g} -зоны и t_{2g} -зон с e'_g -карманами, здесь наблюдается хорошо определённое линейное поведение $\text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ в рассматриваемом интервале частот и на этих волновых векторах. Для d -типа параметра порядка поведение восприимчивости напоминает поведение в t_{2g} -модели с e'_g -карманами. Снова существует узкая область параметров возникновения спин-резонансного пика, который показан на Рисунках 4.6(f) и (i) при $U_{res} = 0.342$ эВ.

Изменение топологии Ферми-поверхности не повлияло существенно на температурную зависимость сдвига Найта и скорости спин-решёточной релаксации выше и ниже T_c . Это показано на Рисунке 4.7, где изображены зависимости от температуры обеих величин.

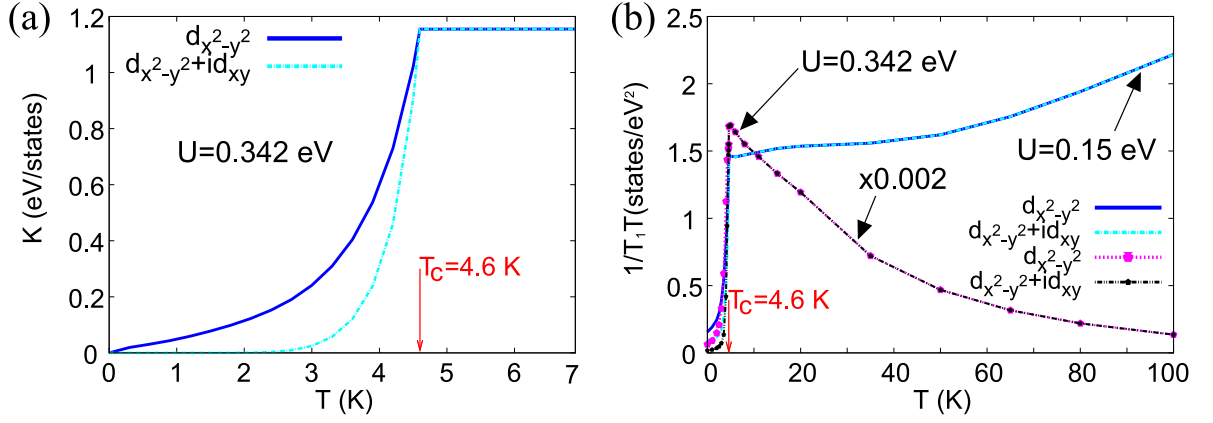


Рис. 4.7. Вычисленная температурная зависимость сдвига Найта $K(T)$ (a) и скорость спин-решёточной релаксации $1/T_1T$ (b) в модели t_{2g} -зон без e'_g -Ферми-карманов.

4.3. Заключение

Анализ динамической спиновой восприимчивости $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ показал, что магнитный отклик в нормальной фазе определяется несоизмеримыми флуктуациями волны спиновой плотности на больших импульсах, близких к $\mathbf{Q}_{AFM}$. Это согласуется с экспериментальными данными ЯКР, которые в температурной зависимости скорости спин-решёточной релаксации показывают выраженные флуктуации, подобные антиферромагнитным. Интересно отметить, что присутствие или отсутствие e'_g -карманов на Ферми-поверхности не меняет существенно этот результат. В нормальном состоянии мы наблюдаем отсутствие ферромагнитных флуктуаций. Это оправдывает наш выбор спин-синглетного типа параметра порядка, поскольку для возникновения спин-триплетного куперовского спаривания необходимы флуктуации на малых импульсах. Ниже T_c наши результаты для $d_{x^2-y^2}$ - или d_{xy} -типов симметрий сверхпроводящего параметра порядка согласуются с экспериментальными данными, которые исключают $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -тип. Отметим также, что спин-резонансный пик, полученный ранее [312], в простой модели a_{1g} -зоны, мало вероятен в реалистичной зонной структуре $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. Более того, даже если он реализуется, то будет ограничен антиферромагнитным волновым вектором и исчезнет вдали от него.

Спин-резонансный пик в неупругом рассеянии нейтронов в соединениях железа

Связь необычной сверхпроводимости и магнетизма является одним из наиболее интересных проблем физики конденсированного состояния. В отличие от сверхпроводимости, вызванной электрон-фононным взаимодействием, где спиновые возбуждения подавлены ниже T_c из-за формирования куперовских пар с полным спином $S = 0$, в таких необычных сверхпроводниках, как ВТСП купраты и соединения с тяжёлыми фермионами, возможно формирование связанного состояния с большой интенсивностью - спинового резонанса - ниже T_c [310, 314, 315]. То, что сверхпроводящий параметр порядка имеет разный знак на различных частях Ферми-поверхности и наличие сильных электронных корреляций приводят к увеличению спинового отклика [316]. Что ещё интересно, наблюдение спин-резонансного пика означает не только необычное куперовское спаривание, но и важность магнитных флуктуаций для сверхпроводимости [317].

Теоретическая возможность возникновения спинового резонанса была отмечена ещё в самой первой работе, где предложен сценарий $s_{\pm}$ -типа параметра порядка [191]. Практическое измерение магнитного отклика не представляет неразрешимых проблем, поскольку рассеяние нейтронов является мощным инструментом измерения динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$.

На основе эффективной четырёхзонной модели мы проанализировали спиновый отклик в нормальной и сверхпроводящей фазах соединений железа. В то время, как в нормальной фазе спиновые возбуждения происходят от межзонных антиферромагнитных флуктуаций, необычная сверхпроводимость приводит к необычному результату. А именно, резонансный пик формируется на антиферромагнитном волновом векторе $\mathbf{Q}_{AFM}$ только для сверхпроводника с

$s_{\pm}$ типом (“расширенный” s -тип) симметрии и быстро исчезает при $\mathbf{q} < \mathbf{Q}_{AFM}$. Этот пик очень мал для $d_{x^2-y^2}$ -типа параметра порядка из-за особенностей топологии Ферми-поверхности этих систем. Таким образом, наличие спинового резонанса является эксклюзивным свойством $s_{\pm}$ состояния. Для соединений железа спиновый резонанс сначала был предсказан теоретически [24, 318], а затем обнаружен экспериментально в 1111, 122, и 11 семействах пниктидов и халькогенидов [16, 319–326].

В четырёхзонной модели мы также рассмотрели возникновение спинового резонанса в халькогенидах, что позволило качественно объяснить все главные особенности нейтронных данных по магнитным возбуждениям в $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$ [16].

Исследование динамической спиновой восприимчивости в реалистичной пятиорбитальной модели соединений железа показали, что все качественные выводы, сделанные на основе четырёхзонной модели, верны [2].

5.1. Магнитные возбуждения в четырёхзонной модели

Мы используем четырёхзонную модель сильной связи для изучения спинового отклика в нормальной и сверхпроводящей фазах соединений железа. Будет показано, что спектр магнитных флуктуаций, вычисленный в приближении хаотических фаз (Random Phase Approximation, RPA), состоит из двух вкладов. Первый - это антиферромагнитные спиновый флуктуации с пиком магнитной восприимчивости на векторе $\mathbf{Q}_{AFM} = (\pi, \pi)$, происходящее из межзонного рассеяния. Второй вклад происходит из внутризонного рассеяния приводит к континууму флуктуаций волны спиновой плотности (Spin-Density Wave, SDW) на малых импульсах. Мы покажем, как необычная сверхпроводимость приводит к формированию спинового резонанса только на антиферромагнитном волновом векторе для $s_{\pm}$ -типа сверхпроводимости [24]. Этот пик ограничен вектором $\mathbf{Q}_{AFM}$ и быстро исчезает вдали от него.

Ионы железа формируют квадратную решётку и являются частью слоя FeAs в пниктидах и слоя FeSe в халькогенидах. Из-за того, что As или Se, находящиеся в центрах квадратов решётки Fe, лежат выше или ниже плоскости железа, кристаллографическая элементарная ячейка содержит два атома Fe и два иона As. Первопринципные расчёты зонной структуры [190, 191, 196, 199, 219, 327] показывают, что основной вклад в плотность состояний вблизи уровня Ферми дают t_{2g} -состояния Fe-3d (d_{xz} , d_{yz} и d_{xy}), дисперсия которых в направлении z в большинстве соединений невелика. Ферми-поверхность состоит из двух дырочных карманов, центрированных на точке $\Gamma = (0, 0)$, и двух пересекающихся электронных карманов вокруг точки $M = (\pi, \pi)$ зоны Бриллюэна, соответствующей двум атомам Fe на ячейку [191]. Вектор (π, π) в этих координатах соответствует вектору $(\pi, 0)$ в зоне Бриллюэна одного атома Fe на ячейку. Мы будем моделировать зонную структуру соединений железа используя следующий гамильтониан:

$$H_0 = - \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \epsilon^i n_{\mathbf{k}i\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, i, \sigma} t_{\mathbf{k}}^i d_{\mathbf{k}i\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}i\sigma}, \quad (5.1)$$

где $d_{\mathbf{k}i\sigma}$ - оператор уничтожения электрона с импульсом $\mathbf{k}$, спином σ и зонным индексом $i = \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$, ϵ^i - это одноэлектронные энергии, $t_{\mathbf{k}}^{\alpha_1, \alpha_2} = t_1^{\alpha_1, \alpha_2} (\cos k_x + \cos k_y) + t_2^{\alpha_1, \alpha_2} \cos k_x \cos k_y$ - дисперсия, приводящая к формированию дырочных карманов вокруг точки Γ , а $t_{\mathbf{k}}^{\beta_1, \beta_2} = t_1^{\beta_1, \beta_2} (\cos k_x + \cos k_y) + t_2^{\beta_1, \beta_2} \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2}$ - дисперсия, из-за которой возникают электронные карманы вокруг точки M . В обозначениях $(\epsilon^i, t_1^i, t_2^i)$ параметры зон α_1 и α_2 мы выбрали следующими: $(-0.60, 0.30, 0.24)$ и $(-0.40, 0.20, 0.24)$, а для зон β_1 и β_2 - следующими $(1.70, 1.14, 0.74)$ и $(1.70, 1.14, -0.64)$, соответственно (все величины в эВ).

На Рисунках 5.1(а) и 5.2(а) показаны полученные зонная структура и Ферми-поверхность в недопированном случае $x = 0$. Ферми-поверхность состоит из двух дырочных (α_1 и α_2) и двух электронных (β_1 и β_2) карманов. Зоны β значительно шире остальных и вырождены вдоль направления $X - M$,

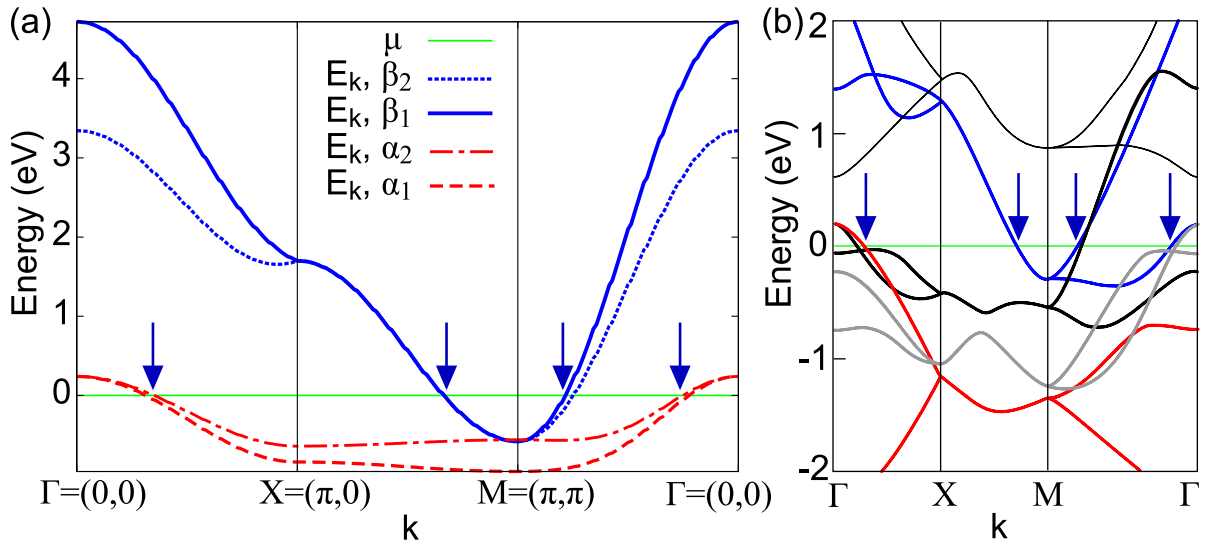


Рис. 5.1. Рассчитанная двумерная зонная структура в нашей эффективной модели (а) вдоль основных направлений зоны Бриллюэна, соответствующей 2 атомам Fe на ячейку, и результаты LDA (b) для системы LaOFeAs [190, 191, 196, 199, 219]. Стрелки показывают точки, где зоны пересекают уровень Ферми. Отметим, что цвет кривых на панели (b) использован просто для выделения зон, но не отражает их истинную гибридизацию.

что физически является следствием гибридизации образующих её орбиталей d_{xz} и d_{yz} . Зоны α центрированы на точке Γ и значительно уже, что приводит к существенному вкладу в плотность состояний. Выбранная зонная структура воспроизводит топологию Ферми-поверхности и Ферми-скорости из расчётов в LDA. Мы выбирали одноэлектронные энергии и матричные элементы перескока исходя из предположения, что недопированная система является компенсированным металлом и фактора заполнения равен $n = 4$ (мы также предположили, что ниже уровня Ферми есть полностью заполненная зона, которую мы не рассматриваем здесь). На Рисунке 5.1(b) показана электронная структура из первопринципных расчётов [196] для сравнения с нашей эффективной моделью. Отметим, что дырочная Ферми-поверхность, сдвинутая на (π, π) , полностью совпадает, т.е. находится в состоянии нестинга, с электронными карманами, что также находится в согласии с LDA. Положение химпотенциала μ определялось из уравнения $n = 4 + x$.

Отметим, что, хотя Ферми-поверхность, полученная ранее в эффективной

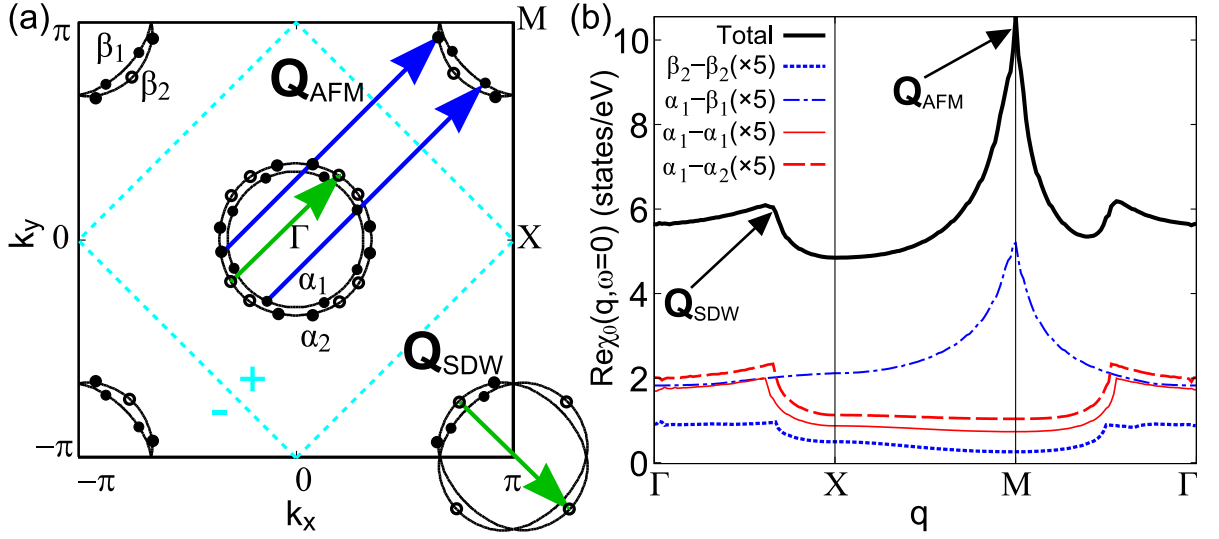


Рис. 5.2. (а) Ферми-поверхность в нашей модели соединений железа. Стрелками показаны основные вектора рассеяния. Закрашенные кружки показывают состояния, участвующие в межзонном рассеянии с АФМ вектором $\mathbf{Q}_{AFM}$, а незакрашенные - во внутри- и межзонном рассеянии с несоизмеримым вектором $\mathbf{Q}_{SDW}$. Пунктирные (голубые) линии и знаки $+$, $-$ означают положение линий нулей и соответствующую фазу параметра порядка $s_{\pm}$ -типа. (b) Действительная часть голой восприимчивости вдоль основных симметричных направлений зоны Бриллюэна. Толстой чёрной линией показана полная спиновая восприимчивость, а остальными линиями показаны парциальные вклады, увеличенные в 5 раз для удобства. Основные вектора рассеяния из панели (а) также показаны на панели (b).

двухорбитальной модели [197], воспроизводит Ферми-поверхность из расчётов в LDA, эволюция дисперсии существенно отличается.

Далее мы рассмотрим однопетлевой вклад, содержащий внутри- и межзонные части, в спиновую восприимчивость - “голую” восприимчивость:

$$\chi_0^{ij}(\mathbf{q}, i\omega_m) = -\frac{T}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \text{Tr} [G^i(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_m) G^j(\mathbf{k}, i\omega_n) + F^i(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_m) F^j(\mathbf{k}, i\omega_n)] \quad (5.2)$$

где i и j означают зонные индексы, G^i и F^i - это нормальная и аномальная функции Грина (функция Грина и функция Горькова), соответственно.

На Рисунке 5.2 показаны действительная часть полной (физической) спи-

новой восприимчивости

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m) = \sum_{i,j} \chi_0^{i,j}(\mathbf{q}, i\omega_m), \quad (5.3)$$

равно как и вклады компонент. Основной вклад в полную восприимчивость возникает от межзонного рассеяния ($\alpha \rightarrow \beta$) с АФМ вектором $\mathbf{Q}_{AFM}$. Стоит отметить, что внутри- и межзонные вклады в восприимчивость в зонах α и β очень близки и ответственны за широкий пик в районе вектора $\mathbf{Q}_{SDW}$.

Далее мы обсудим возможное влияние сверхпроводимости, вызванной спиновыми или зарядовыми флуктуациями, на магнитную восприимчивость. Эти взаимодействия имеют характер отталкивания, что приводит [328] к меняющей на АФМ векторе знак сверхпроводящей щели: $\Delta_{\mathbf{k}}^i = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}^j$. Мы рассмотрим магнитную восприимчивость в сверхпроводящем состоянии с заданной симметрией щели $d_{x^2-y^2}$ -типа [$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_0}{2} (\cos k_x - \cos k_y)$] и $s_{\pm}$ -типа [$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_0}{2} (\cos k_x + \cos k_y)$], которые удовлетворяют условию выше.

Для получения качественного описания роли знакопеременности параметра порядка здесь мы воспользуемся упрощённым описанием взаимодействия в системе. Поскольку эффективная модель сформулирована в зонном представлении, то и гамильтониан взаимодействия также должен быть записан в нём. Преимущество многоорбитального гамильтониана кулоновского взаимодействия, включающего внутри- и межорбитальное хаббардовское отталкивание U и U' , хундовский обмен J и парный перескок J' [200, 304], состоит в том, что взаимодействие является одноузельным. Но, если перейти к зонному представлению, то матричные элементы взаимодействия приобретут сложную импульсную зависимость из-за коэффициентов перехода между представлениями. Тогда задача построения теории возмущений существенно усложняется. Для упрощения анализа мы используем эффективные параметры. В четырёх-зонной модели это будет внутризонное U и межзонное J отталкивания, т.е. аналог хаббардовского отталкивания и хундовского обмена, соответственно. В

RPA спиновый отклик многозонной системы будет иметь матричный вид:

$$\hat{\chi}_{RPA}(\mathbf{q}, i\omega_m) = [\mathbf{I} - \mathbf{\Gamma} \hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m)]^{-1} \hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m) \quad (5.4)$$

где $\mathbf{I}$ - единичная матрица, $\hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m)$ матрица 4×4 , сформированная из межзонных и внутризонных компонент голой восприимчивости (5.2). Вершина взаимодействия даётся следующим выражением:

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} U & J/2 & J/2 & J/2 \\ J/2 & U & J/2 & J/2 \\ J/2 & J/2 & U & J/2 \\ J/2 & J/2 & J/2 & U \end{bmatrix}. \quad (5.5)$$

Чтобы оставаться в парамагнитной фазе избежав магнитного перехода мы выбрали $U \sim t_1^{\beta_1}$ и $J = 0.2U$.

Значения одноузельных параметров кулоновского отталкивания U и хундовского обмена J были получены из первых принципов методом “ограниченного DFT” (“constrained DFT”) с помощью формализма функций Ванье в работе [329]. Из-за делокализации функций Ванье для базиса Fe-3d, кулоновские параметры существенно уменьшаются, по сравнению с их внутриатомными значениями, и равны $U \approx 0.6$ эВ и $J \approx 0.5$ эВ. Эти значения близки к используемым в нашей работе.

На Рисунке 5.3(а) показана как функция частоты на волновом векторе АФМ $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AFM}$ полная восприимчивость в RPA:

$$\chi_{RPA}(\mathbf{q}, i\omega_m) = \sum_{i,j} \chi_{RPA}^{i,j}(\mathbf{q}, i\omega_m) \quad (5.6)$$

В нормальном состоянии спиновый отклик не имеет явно выделенного пика при низких энергиях, а скорее имеет вид широкого континуума спиновых флуктуаций, см. Рисунок 5.3(а).

Ситуация меняется в сверхпроводящей фазе. Квазичастицы на Ферми-поверхности, происходящие из зон α и β и соединённые антиферромагнитным

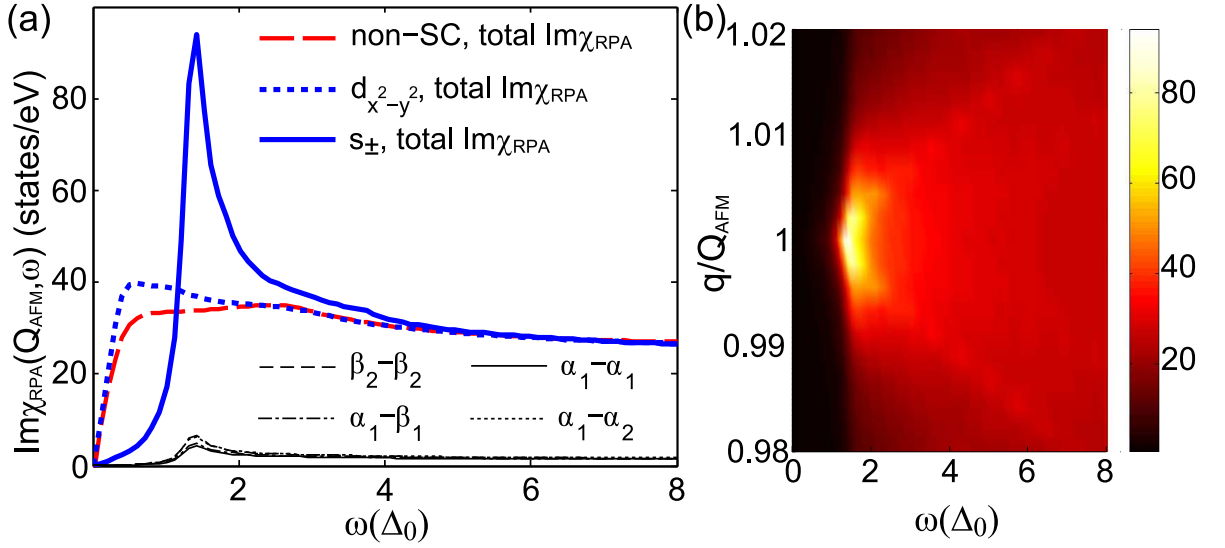


Рис. 5.3. (a) Мнимая часть спиновой восприимчивости в RPA на АФМ векторе $\mathbf{Q}_{AFM}$ как функция частоты в нормальной и сверхпроводящей фазах. Толстыми красными штриховыми, синими пунктирными и сплошными синими линиями показана полная восприимчивость. Тонкими чёрными линиями показаны парциальные вклады межзонных и внутризонных переходов в $s_{\pm}$ -состоянии. (b) Мнимая часть полной спиновой восприимчивости в RPA для $s_{\pm}$ -сверхпроводника как функция частоты и импульса вдоль направления $(1, 1)$. Для численных расчётов мы ввели затухание $\delta^+ = 0.8$ мэВ.

вектором, удовлетворяют условию $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}$ в случае параметра порядка $s_{\pm}$ -типа. Мнимая часть межзонной магнитной восприимчивости равна нулю на малых частотах из-за открывшейся сверхпроводящей щели, а затем возрастает скачком на частоте $\Omega_c = \min(|\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}|)$. Соответственно, действительная часть межзонной ($\alpha \rightarrow \beta$) восприимчивости, связанная с мнимой частью соотношением Крамерса-Кронига, будет иметь логарифмическую особенность. Такая ситуация удовлетворяет условию резонанса для межзонной восприимчивости: $1 - (J/2)\text{Re}\chi_0^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega_{res}) = 0$ и $\text{Im}\chi_0^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega_{res}) = 0$. Более того, внутризонная часть голой восприимчивости мала на этом волновом векторе из-за прямой щели, т.е. никакие состояния на уровне Ферми не могут быть связана вектором $\mathbf{Q}_{AFM}$ для внутризонных переходов. Следовательно, во всех компонентах восприимчивости в RPA возникает единственный резонансный полюс на частоте $\omega_{res} \leq \Omega_c$ и формируется так называемый “спиновый экситон”. Это видно из Рисунка 5.3(a). Из-за того, что полюс один, все компо-

ненты восприимчивости в RPA ведут себя почти одинаково и полная восприимчивость имеет хорошо определённый резонансный пик.

Ситуация более сложная в случае сверхпроводящей щели $d_{x^2-y^2}$ -симметрии. Как видно из Рисунка 5.2(а) АФМ вектор соединяет состояния довольно близкие к линии нулей параметра порядка $d_{x^2-y^2}$ -типа и полная щель в $\text{Im}\chi_0^{\alpha\beta}$, определяемая величиной Ω_c , будет мала. Условие возникновения резонанса, однако, удовлетворяется так как $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AFM}}$. Однако, из-за малости $\Omega_c \ll \Delta_0$ полная восприимчивость в RPA показывает только небольшое увеличение по сравнению с нормальной фазой, см. Рисунок 5.3(а). Следовательно, резонансный пик возникает только для $s_{\pm}$ -типа сверхпроводимости. Как и в случае $d_{x^2-y^2}$ -типа, для d_{xy} - и $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -типов симметрий мы не обнаружили спинового резонанса. Такое различное поведение параметров порядка может быть легко обнаружено в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов и, следовательно, использовано для определения симметрии щели.

Также мы исследовали эволюцию резонанса вдали от антиферромагнитного вектора. На Рисунке 5.3(б) показана полная восприимчивость в RPA как функция импульса и частоты. Отметим, что щель $s_{\pm}$ -типа меняется очень слабо на Ферми-поверхностях α и β и можно рассматривать её как константу. Следовательно, условие $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_n}$ будет выполняться, если вектор $\mathbf{q}_n < \mathbf{Q}_{AFM}$ соединяет состояния на одном из α -карманов и одном из β -карманов. Как ясно видно из Рисунка 5.2(б), условие нестинга очень чувствительно к изменениям $\mathbf{q}_n$ вдали от $\mathbf{Q}_{AFM}$. Следовательно, уже при $\mathbf{q}_n \approx 0.995\mathbf{Q}_{AFM}$ величина $\text{Re}\chi_0^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_n, \omega_{res})$ будет значительно меньше, чем она же при $\mathbf{Q}_{AFM}$. Как результат, резонансный пик ограничен антиферромагнитным волновым вектором и не диспергирует в отличие от, например ВТСП купратов.

Итак, мы проанализировали поведение магнитной спиновой восприимчивости в сверхпроводниках на основе железа и показали, что спектр магнитных флуктуаций, полученный в RPA, состоит из (1) континуума антиферромагнит-

ных спиновых флуктуаций с пиком восприимчивости на векторе $\mathbf{Q}_{AFM} = (\pi, \pi)$, возникающих благодаря межзонному рассеянию, и (2) флуктуаций на малых $\mathbf{q}$ вблизи вектора $\mathbf{q}_{SDW}$, обязанных своим происхождением внутризонному рассеянию. Резонансный пик в виде спинового экситона возникает только для межзонного рассеяния на антиферромагнитном векторе в сверхпроводящей фазе с $s_{\pm}$ -типом параметра порядка. Также показано, что резонансный пик ограничен антиферромагнитным вектором и быстро исчезает при $\mathbf{q} < \mathbf{Q}_{AFM}$.

5.2. Несоизмеримые антиферромагнитные возбуждения и спиновый резонанс в сверхпроводнике $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$

Если спин-резонансный пик в неупругом рассеянии нейтронов возникает как следствие симметрии параметра порядка и обусловлен не сильными корреляциями, а делокализованными электронами, то его положение должно следовать за вектором, соединяющим дырочные и электронные карманы. В случае дырочного допирования, электронные карманы будут уменьшаться, а дырочные - увеличиваться. В случае допирования электронами - наоборот, электронные будут увеличиваться, а дырочные - уменьшаться. Всё это приводит к изменению волнового вектора, соединяющего электронные и дырочные карманы, на котором и происходит максимальное рассеяние. В недопированном случае это соизмеримый вектор $\mathbf{Q}_{AFM}$. В допированных соединениях железа мы ожидаем спин-резонансный пик на несоизмеримом векторе.

Здесь мы сравним результаты теории спинового резонанса, изложенной в предыдущем разделе, с результатами неупругого рассеяния нейтронов в $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$ [16]. В этом веществе $T_c = 14$ К и кристаллизуется оно в примитивной тетрагональной структуре $P4/mtn$ с $a = 3.80$ Å и $c = 6.02$ Å. В нормальном состоянии наблюдаются магнитные возбуждения на волновом векторе $\mathbf{Q}_{inc} = (1/2 \pm \epsilon, 1/2 \mp \epsilon)$, где $\epsilon = 0.09(1)$ - мера несоизмеримости. Вектор $\mathbf{Q}$ измеряются в единицах $(\pi/a, \pi/a)$, а то, что относится к оси c опущено, по-

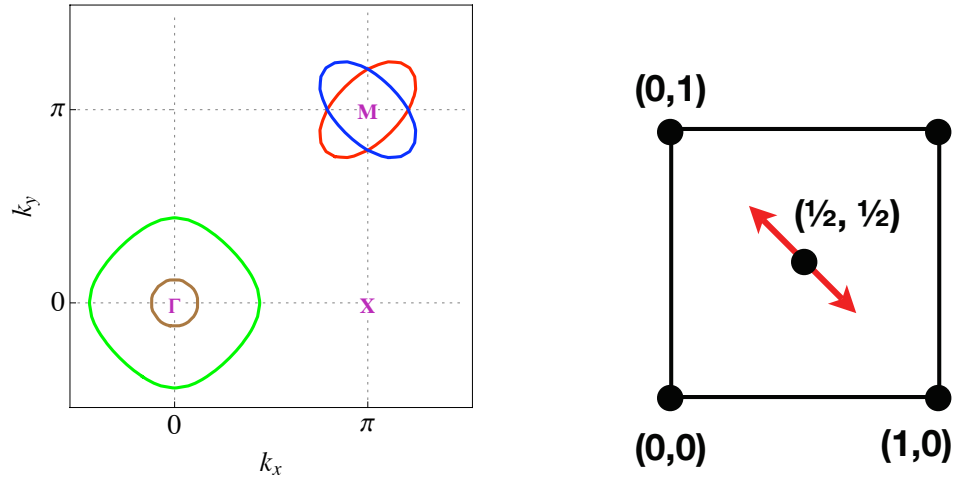


Рис. 5.4. Слева показана Ферми-поверхность в 4-х зонной модели халькогенида $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$. В центре зоны Бриллюэна расположены дырочные Ферми-карманы, происходящие от зон α , а эллиптические электронные карманы вокруг точки M - от зон β . Справа - направление в обратном пространстве, вдоль которого изображены все результаты и экспериментальные данные.

сколько $Q_z = 0$. В сверхпроводящем состоянии существенно изменяется только низкоэнергетическая часть спектра за счёт формирования щели и магнитного резонанса, который следует дисперсии возбуждений нормального состояния. Далее мы используем четырёхзонную модель с $s_{\pm}$ -типом симметрии для описания этих данных.

Четырёхзонная модель (5.1) успешно применялась для описания данных ARPES в оптимально допированном пниктиде $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ [330]. Было найдено, что Ферми-поверхность и электронная структура $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ очень похожа на наблюдаемую в соединениях типа 122, кроме отличающегося уровня химпотенциала и, следовательно, нестинга [331]. Мы выбрали следующие параметры модели, записанные в виде $(\epsilon^i, t_1^i, t_2^i)$: $(-0.26, 0.16, 0.052)$ и $(-0.18, 0.16, 0.052)$ для зон α_1 и α_2 , $(0.68, 0.38, 0.8)$ и $(0.68, 0.38, -0.8)$ для зон β_1 и β_2 , соответственно (все величины приведены в эВ). Эта параметризация практически такая же, как в работе [330] для $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$, но мы немного меняли одноэлектронные энергии и параметры зоны α_2 , чтобы вектор нестинга между Ферми-поверхностями α и β был несоизмеримым. Полученная Ферми-

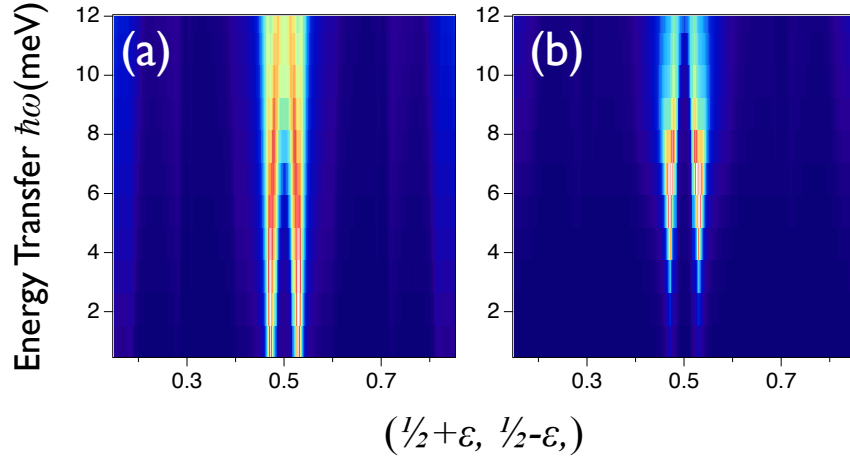


Рис. 5.5. Вычисленная $(\mathbf{q}, \omega)$ -зависимость физической спиновой восприимчивости в RPA в нормальном (a) и сверхпроводящем (b) состояниях.

поверхность показана на Рисунке 5.4.

Параметры взаимодействия в матрице (5.5) мы взяли равными $J = 0.05$ эВ и $U \sim 0.13$ эВ, чтобы оставаться в парамагнитной фазе. Результаты расчёта в RPA (5.4) показаны на Рисунке 5.5 вдоль направлений, показанных на Рисунке 5.4. Хорошо видно, что отклик как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях проявляется на несоизмеримых волновых векторах. В сверхпроводящем состоянии мы предполагаем $s_{\pm}$ -тип параметра порядка.

На Рисунке 5.6(a) показаны экспериментально измеренные низкоэнергетические возбуждения в нормальном состоянии [16]. Чёрными точками показаны $\mathbf{q}$ -позиции максимумов, полученных при подгонке функциями Гаусса. Дисперсия возбуждений линейна до 80 мэВ. Экстраполируя центры возбуждений до нулевой энергии, см. красные линии на Рисунке 5.6(a), видно, что они не сходятся на соизмеримом векторе $\mathbf{q} = (1/2, 1/2)$, а идут на несоизмеримую позицию $\mathbf{Q}_{inc} = (1/2 \pm \epsilon, 1/2 \mp \epsilon)$ с $\epsilon = 0.09(1)$. Отметим, что в халькогениде с меньшим содержанием Fe статический антиферромагнетизм появляется с вектором упорядочения $\mathbf{Q} = (1/2, 0)$ [332]. Охлаждение до температур ниже T_c не приводит к сильным изменениям на высоких энергиях, но в низкоэнергетической части открывается спиновая щель $\hbar\omega = 4$ мэВ и возникает увеличение спектрального

веса с пиком на $\hbar\omega_{res} = 6$ мэВ [16], что видно на Рисунке 5.6(b). Резонанс с $\hbar\omega_{res} = 6$ мэВ может быть промоделирован двумя несоизмеримыми пиками на векторах $\mathbf{Q}_{res} = (\frac{1}{2} \pm \epsilon, \frac{1}{2} \mp \epsilon)$ с $\epsilon = 0.05(1)$, что очень немного отличается от несоизмеримости, найденной в нормальном состоянии.

На Рисунках 5.6(c,d) показана вычисленная полная физическая восприимчивость в RPA как функция частоты $\hbar\omega$ и импульса вдоль поперечного направления $(1/2 + \epsilon, 1/2 - \epsilon)$ в нормальной (c) и сверхпроводящей (d) фазах. Чтобы симулировать экспериментальное разрешение, в отличие от Рисунка 5.5, здесь приведён результат свёртки рассчитанной восприимчивости с гауссианом, имеющим ширину на половине высоты $\Delta\omega = 1$ мэВ по частоте и $\Delta\mathbf{q} = 0.06$ г.л.у. по импульсу. Из-за того, что условие нестинга $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta}$ между одной из дырочных зон α и электронными зонами β выполняется на несоизмеримом векторе $\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}_{AFM}$, спиновый отклик показывает антиферромагнитные возбуждения на несоизмеримом векторе с $\epsilon = 0.03$. Эти низкоэнергетические возбуждения в металлах, называемые парамагнонами, возникают благодаря близости Ферми-поверхности к ситуации нестинга и, следовательно, к магнитной неустойчивости. Они диспергируют линейно от несоизмеримых векторов.

Очевидно, что наше описание в RPA не достаточно для описания всех деталей экспериментального спектра спиновых возбуждений. Например, значение несоизмеримости ϵ меньше, чем наблюдаемое, хотя согласи может улучшиться при увеличении эллиптичности Ферми-кармана в районе точки M , а расчётная дисперсия парамагнонов круче, чем видно в эксперименте, см. Рисунок 5.6(c). Тем не менее, наши расчёты ухватывают основные особенности экспериментальных результатов, как то несоизмеримые возбуждения парамагнонов, появление спиновой щели и суперпозиция спинового экситона и рассеяния парамагнонов в сверхпроводящем состоянии. Согласие с данными нейтронного рассеяния и описание особенности спинового спектра одним полюсом $\text{Im}\chi$ без дополнительных локальных спиновых моментов подтверждает делокализованный характер спиновых возбуждений в соединениях железа.

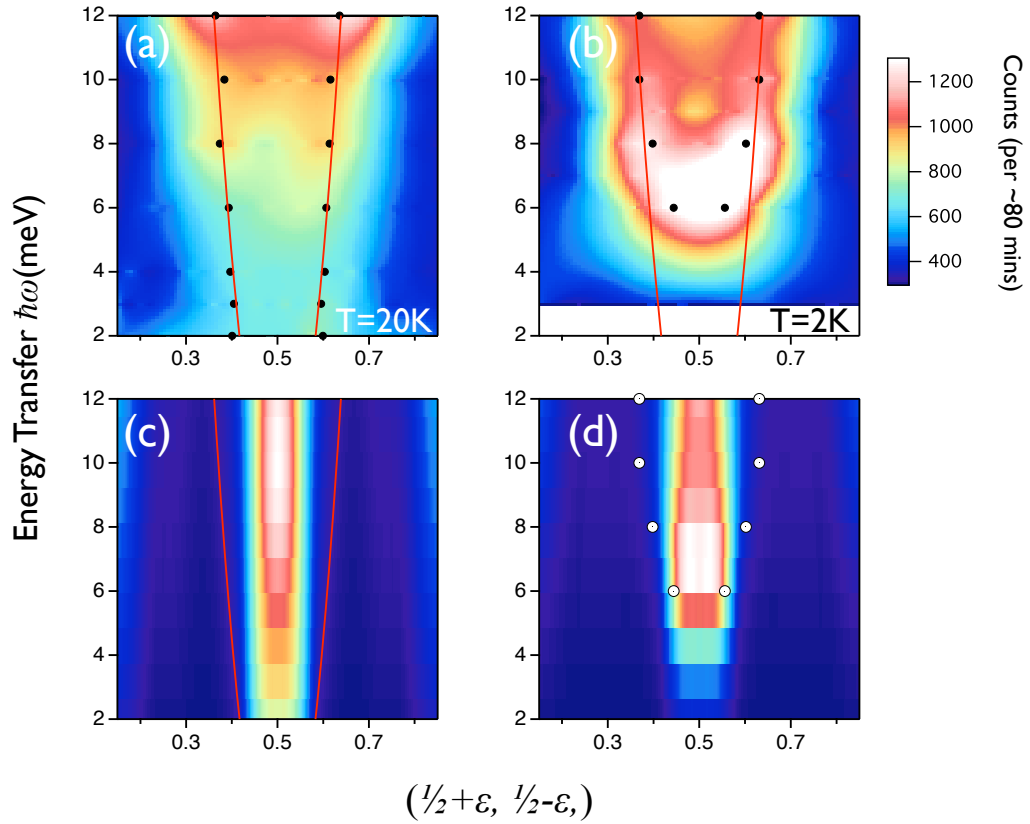


Рис. 5.6. (a,b) Экспериментальные нейтронные данные вдоль направления $(1/2 + \epsilon, 1/2 - \epsilon, 0)$ и переданной энергии от 2 до 12 мэВ при температуре 20 К в нормальной фазе (a) и при 2 К в сверхпроводящем состоянии (b) [16]. Измеренная интенсивность показана цветом. Чёрные точки показывают центры гауссовых кривых, которые использовались для описания экспериментальных данных, а красные линии показывают дисперсию центров этих кривых. Дисперсия в нормальном состоянии показана красными линиями на панели (b) чтобы показать, что высокоэнергетические возбуждения не меняют своих положений ниже T_c . (c,d) Вычисленная в RPA магнитная восприимчивость с учётом инструментального разрешения, представленного гауссианом с шириной на половине высоты 1 мэВ по частоте и 0.06 единиц обратной решётки по импульсу, в нормальной фазе (c) и в сверхпроводящем состоянии с $s_{\pm}$ -типом симметрии (d). На панели (c) наложена экспериментальная дисперсия, а на (d) мы показываем измеренные в сверхпроводящей фазе несоизмеримые возбуждения белыми кружками.

5.3. Спиновый резонанс в многоорбитальной модели

В многоорбитальном случае динамическая спиновая восприимчивость является тензором по орбитальным индексам l, l', m и m' :

$$\chi_{ss'}^{ll',mm'}(\mathbf{q}, i\Omega) = - \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega\tau} \left\langle T_\tau S_{ll'}^s(\mathbf{q}, \tau) S_{m'm}^{s'}(-\mathbf{q}, 0) \right\rangle. \quad (5.7)$$

Здесь Ω - мацубаровская частота, $S_{ll'}^s(\mathbf{q}, \tau)$ - s -тая компонента вектора спинного оператора с мацубаровским временем τ , $\mathbf{S}_{ll'}(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \alpha, \alpha'} a_{\mathbf{p}l\alpha}^\dagger(\tau) \hat{\sigma}_{\alpha\alpha'} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}l'\alpha'}(\tau)$, где $\hat{\sigma}$ - вектор, составленный из матриц Паули $\hat{\sigma}$, $a_{\mathbf{p}l\alpha}^\dagger$ - оператор рождения электрона на орбитали l с импульсом $\mathbf{p}$ и спином α . Для получения нулевого по взаимодействию приближения расцепляем (5.7) по теореме Вика, вводим нормальные и аномальные функции Грина $G_{ml\sigma\sigma'}(k, \tau) = - \left\langle T_\tau a_{km\sigma}(\tau) a_{kl\sigma'}^\dagger(0) \right\rangle$, $F_{ml\sigma\sigma'}^\dagger(k, \tau) = \left\langle T_\tau a_{km\sigma}^\dagger(\tau) a_{-kl\bar{\sigma}'}^\dagger(0) \right\rangle$ и $F_{ml\sigma\sigma'}(k, \tau) = \left\langle T_\tau a_{km\sigma}(\tau) a_{-kl\bar{\sigma}'}(0) \right\rangle$, переходим к мацубаровским частотам ω_n и получаем для $+-$ компоненты восприимчивости в отсутствие спин-орбитального взаимодействия

$$\chi_{0,+ -}^{ll',mm'}(\mathbf{q}, i\Omega) = -T \sum_{\omega_n, \mathbf{p}} \left[G_{ml\uparrow\uparrow}(\mathbf{p}, i\omega_n) G_{l'm'\downarrow\downarrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\Omega + i\omega_n) - F_{lm'\uparrow\downarrow}^\dagger(\mathbf{p}, -i\omega_n) F_{l'm\downarrow\uparrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\Omega + i\omega_n) \right]. \quad (5.8)$$

Физическая (наблюдаемая) восприимчивость получается при совпадающих орбитальных индексах двух функций Грина, входящих в вершину, т.е. при $l' = l$ и $m' = m$: $\chi_{+ -}(\mathbf{q}, i\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{l,m} \chi_{+ -}^{ll,mm}(\mathbf{q}, i\Omega)$.

Функции Грина недиагональны в орбитальном базисе и зависят от двух орбитальных индексов. Имеет смысл перейти в зонный базис, построенный на операторах рождения и уничтожения $b_{\mathbf{k}\mu\sigma}^\dagger$ и $b_{\mathbf{k}\mu\sigma}$ электронов с зонным индексом μ , где функции Грина диагональны, $G_{\mu\sigma}(\mathbf{k}, i\Omega) = 1/(i\Omega - \varepsilon_{\mathbf{k}\mu\sigma})$. Переход от орбитального базиса к зонному осуществляется с помощью матричных элементов

$\varphi_{\mathbf{k}m}^\mu$:

$$|\sigma m \mathbf{k}\rangle = \sum_{\mu} \varphi_{\mathbf{k}m}^\mu |\sigma \mu \mathbf{k}\rangle. \quad (5.9)$$

Тогда $a_{\mathbf{k}m\sigma} = \sum_{\mu} \varphi_{\mathbf{k}m}^\mu b_{\mathbf{k}\mu\sigma}$ и

$$\chi_{0,+}^{ll',mm'}(\mathbf{q}, i\Omega) = -T \sum_{\omega_n, \mathbf{p}, \mu, \nu} \varphi_{\mathbf{p}m}^\mu \varphi_{\mathbf{p}l}^{*\mu} G_{\mu\uparrow}(\mathbf{p}, i\omega_n) G_{\nu\downarrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\Omega + i\omega_n) \varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}l'}^\nu \varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}m'}^{*\nu s'}. \quad (5.10)$$

В дальнейшем мы будем использовать модель зонной структуры H_0 из работы [200], основанной на DFT-расчётах [201] для однослойного пниктида LaFeAsO. Она включает все пять d -орбиталей Fe и имеет гамильтониан:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{ll'} (t_{ll'}(\mathbf{k}) + \epsilon_l \delta_{ll'}) d_{l\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{l'\mathbf{k}\sigma}, \quad (5.11)$$

где $d_{l\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ - оператор рождения частицы с импульсом $\mathbf{k}$ и спином σ на орбитали l , $t_{ll'}(\mathbf{k})$ - перескоки, а ϵ_l - одноэлектронные энергии. Орбитальный индекс $l \in (1, 2, \dots, 5)$ нумерует все пять орбиталей железа (d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} , $d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$). Аналогичная модель была сформулирована в работе [199].

В пятиорбитальной модели с параметрами, полученными подгонкой функциями Ванье срезом зонной структуры системы 1111 при $k_z = 0$ [201], Ферми-поверхность состоит из четырёх карманов, двух дырочных в районе точки $(0, 0)$, и двух электронных в районе точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$, см. Рисунок 5.7. Такая геометрия в $\mathbf{k}$ -пространстве в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe на элементарную ячейку, приводит к возможности возникновения волны спиновой плотности (SDW - Spin-Density Wave) из-за нестинга между дырочной и электронной Ферми-поверхностями на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ или $(0, \pi)$. В недопированном случае полностью заполнены d^6 -орбитали, что соответствует числу заполнения электронов $n_0 = 6$. При увеличении допирования x дальний SDW порядок исчезает. Полное число заполнения электронов $n = n_0 \pm x$. Если это электронное допирование, то выше определённого x дырочные карманы исчезнут и останутся только электронные, что соответствует $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ и монослоям FeSe [178]. При увеличении концентрации дырок сначала возникает

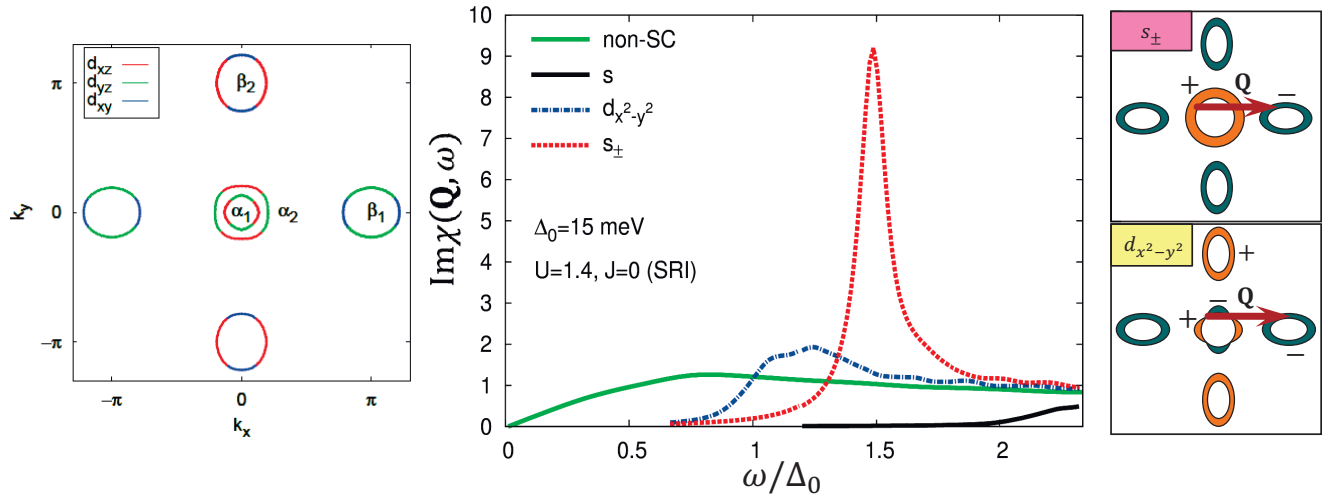


Рис. 5.7. Ферми-поверхность (слева) в модели [200] при электронном допировании $x = 0.05$ в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe на элементарную ячейку. Орбитали, дающие максимальные вклады в Ферми-поверхность, выделены цветом. Посередине показана вычисленная в этой модели частотная зависимость $\text{Im}\chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}, \omega)$ в нормальном состоянии (non-SC) и в сверхпроводящем с s (s_{++}), $d_{x^2-y^2}$ и $s_{\pm}$ симметриями щели. В последнем случае возникает резонансный пик при $\omega < 2\Delta_0$. Справа схематично показаны структуры параметров порядка $s_{\pm}$ - и $d_{x^2-y^2}$ -типов на Ферми-поверхности, а также показан вектор $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, соединяющий электронные и дырочные карманы.

новый дырочный карман вокруг точки (π, π) , а затем исчезают электронные Ферми-поверхности. Представителем этой ситуации является KFe_2As_2 . То, что максимальные вклады в зоны на Ферми-поверхности дают $d_{xz,yz}$ и d_{xy} орбитали подтверждается спектрами ARPES [202–204]. При этом, как будет указано ниже, наличие нескольких карманов и многоорбитальный характер зон существенно влияют на картину сверхпроводящего спаривания.

В качестве взаимодействия мы возьмём двухчастичный гамильтониан с одноузельным взаимодействием общего вида [199, 200, 304, 333]:

$$\begin{aligned}
 H = & H_0 + U \sum_{f,m} n_{fm\uparrow} n_{fm\downarrow} + U' \sum_{f,m<l} n_{fl} n_{fm} + \\
 & + J \sum_{f,m<l} \sum_{\sigma,\sigma'} d_{fl\sigma}^\dagger d_{fm\sigma}^\dagger d_{fl\sigma'} d_{fm\sigma'} + J' \sum_{f,m\neq l} d_{fl\uparrow}^\dagger d_{fl\downarrow}^\dagger d_{fm\downarrow} d_{fm\uparrow}. \quad (5.12)
 \end{aligned}$$

где $n_{fm} = n_{fm\uparrow} + n_{fm\downarrow}$, $n_{fm\sigma} = d_{fm\sigma}^\dagger d_{fm\sigma}$ - оператор числа частиц на узле f , U и U' - внутри и междоузельное Хаббардовское отталкивание, J - хундовский

обмен, J' - парный перескок. Обычно параметры подчиняются спин-вращательной инвариантности, что приводит к уменьшению свободных параметров теории вследствие соотношений $U' = U - 2J$ и $J' = J$. Иногда параметром межорбитального Хаббардовского отталкивания называют $V = U' - J/4$, что в случае спин-вращательной инвариантности приводит к соотношению $V = U - 5J/4$.

На основании взаимодействия в гамильтониане (5.12) можно построить приближение RPA для спиновой восприимчивости $\chi_{+-}(\mathbf{q}, i\Omega)$ [200]. Чтобы получить решение, нужно перейти от тензоров к матрицам с индексами $i = l + l'n_O$ и $j = m + m'n_O$, где n_O - число орбиталей. Тогда в матричном виде спиновая восприимчивость в RPA приближении есть

$$\hat{\chi}_{+-} = \left(\hat{1} - \hat{\chi}_{0,+-} \hat{U}^{+-} \right)^{-1} \hat{\chi}_{0,+-}, \quad (5.13)$$

где $\hat{U}^{+-}$ - матрица взаимодействий в $+-$ канале. Отметим, что необходимость строить теорию в орбитальном представлении вызвана тем, что именно в нём взаимодействие Хаббардовского типа, содержащееся в (5.12), остаётся локальным.

Так как $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ описывает возбуждения частица-дырка, а в сверхпроводящем состоянии все возбуждения до примерно $2\Delta_0$ (при $T = 0$) отсутствуют, то только выше этого значения $\text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ становится ненулевой. Из аномальных функций Грина в выражении (5.8) возникают члены, пропорциональные

$$\left[1 - \frac{\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right]. \quad (5.14)$$

Эти множители называются аномальными факторами когерентности. На уровне Ферми $E_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} = |\Delta_{\mathbf{k}}|$. Если у $\Delta_{\mathbf{k}}$ и $\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ одинаковый знак, то факторы когерентности будут равны нулю, что приведёт к плавному возрастанию спиновой восприимчивости с частотой после $\Omega_c = \min(|\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|)$, до которой $\text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = 0$. Это видно на Рисунке 5.7 для классического s -типа сверхпроводимости (s_{++} состояние). Если же, как это происходит для $s_{\pm}$ и d состояний в соединениях железа, вектор $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, 0)$ соединяет Ферми-поверхности с различными знаками щели, $\text{sgn}(\Delta)_{\mathbf{k}} \neq \text{sgn}(\Delta)_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, то факторы

когерентности ненулевые и в мнимой части χ_0 возникает скачок при $\omega = \Omega_c$. В соответствии с соотношениями Крамерса-Кронига действительная часть испытывает логарифмическую сингулярность. Для определённого набора параметров U, U', J, J' , входящих в матрицу $\hat{U}^{+-}$, ненулевое значение $\text{Re}\chi_0$ и $\text{Im}\chi_0 = 0$ приводит к расходимости в мнимой части восприимчивости в RPA (5.13). Соответствующий пик в $\text{Im}\chi(\mathbf{Q}, \omega)$ и есть спиновый резонанс, который появляется при частоте $\Omega_{res} \leq \Omega_c$. Внутризонные вклады в восприимчивость на этом векторе малы из-за прямой щели, т.е. нет таких состояний на уровне Ферми, которые могли бы участвовать во внутризонном рассеянии с вектором $\mathbf{Q}$. Следовательно, возникает единственный полюс во всех компонентах спиновой восприимчивости в RPA при $\Omega_{res} \leq \Omega_c$, что и есть спиновый экситон.

На Рисунке 5.7 спиновый резонанс хорошо виден для $s_{\pm}$ состояния. Для $d_{x^2-y^2}$, хоть резонанс и мог в принципе возникнуть из-за знакопеременности щели, но вектор $\mathbf{Q}$ соединяет состояния на дырочной Ферми-поверхности вблизи нулей щели $\Delta_{\mathbf{k}}$ и полная щель в $\text{Im}\chi_0$, определяемая Ω_c , очень мала. Так как $\Omega_c \ll \Delta_0$, то скачок в $\text{Im}\chi_0$ исчезающе мал и восприимчивость в RPA показывает небольшое увеличение по сравнению с нормальным состоянием, см. Рисунок 5.7. То же самое справедливо для d_{xy} и $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ симметрий [24] и для триплетного p -типа [318]. Таким образом, наличие спинового резонанса вблизи антиферромагнитного волнового вектора является эксклюзивным свойством $s_{\pm}$ состояния [2]. Естественно, спиновый резонанс может возникнуть не только для $s_{\pm}$ -типа, но он будет на других волновых векторах, соединяющих Ферми-поверхности с различными знаками параметра порядка. Например, для d -типа были даны указания на спиновый резонанс на волновом векторе $\mathbf{q} \approx (\pi, \pi)$, соединяющем два электронных кармана [334].

5.4. Обсуждение

Для соединений железа спиновый резонанс сначала был предсказан теоретически нами [24] и в работе [318], а затем обнаружен экспериментально. Никаких выраженных особенностей не было обнаружено в самой первой работе [335], вероятно, из-за качества образцов. За этим, однако, последовало множество сообщений о хорошо определённом спиновом резонансе вблизи $(\pi, 0)$ в 1111, 122, и 11 семействах пниктидов и халькогенидов [16, 319–326]. Хотя соотношение $2\Delta_0/T_c$ меняется от материала к материалу [336], общие свойства спиновых возбуждений следующие: имеется щель при энергиях ниже Ω_c при $T < T_c$ и присутствует увеличение отклика на Ω_{res} , которое исчезает на температурах выше T_c . Результаты для $\text{BaFe}_{1.85}\text{Co}_{0.15}\text{As}_2$, показанные на Рисунке 5.8, во многом являются типичными. В этом материала $\Omega_{res}/2\Delta_0 = (0.79 \pm 0.15)$ [319], что близко к 0.64, что, в свою очередь, иногда называется универсальным значением для купратов, соединений с тяжёлыми фермионами и сверхпроводников на основе железа [336, 337] (отметим, что для универсальности нет никакого интересного теоретического основания). В то время как резонанс в соединениях железа и купратах во многом похожи, существуют отличия. Например, температурная эволюция частоты резонанса Ω_{res} в $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ подобна эволюции БКШ без признаков псевдощели [319]. Также, поскольку в купратах АФМ вектор $\mathbf{Q}_{AFM}$ соединяет различные части одной и той же Ферми-поверхности, при $\mathbf{q} < \mathbf{Q}_{AFM}$ щель становится меньше, чем при $\mathbf{Q}_{AFM}$, так как мы приближаемся к линии нулей d -типа параметра порядка. Резонанс, следовательно, показывает нисходящую дисперсию. С другой стороны, в соединениях железа с симметрией $s_{\pm}$ резонанс проявляет очень небольшую расходящуюся дисперсию, см. Рисунок 5.3(b). Третье важное отличие в том, что в соединениях железа резонанс является дополнительной особенностью для магнитного отклика нормального состояния, обусловленного близостью Ферми-поверхности к нестингу. Как только вектор нестинга становится несоизмеримым, резонанс также сдвигается на

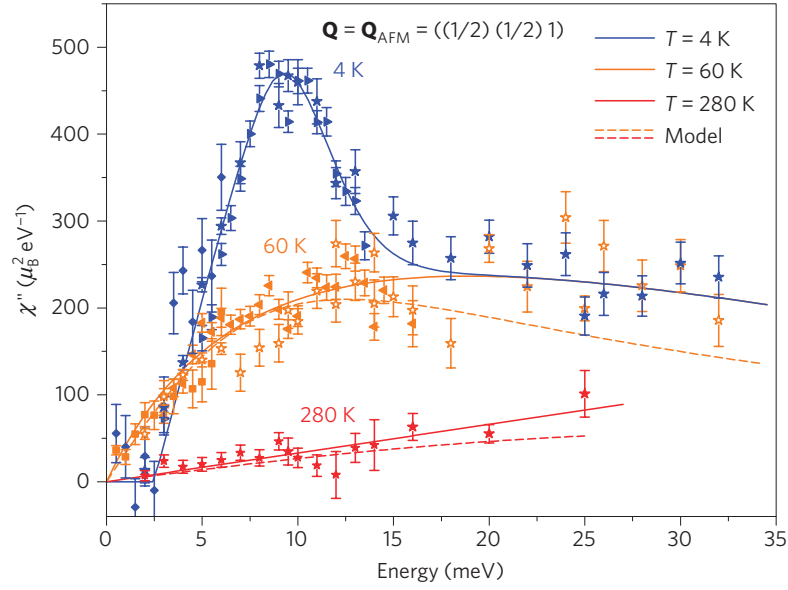


Рис. 5.8. Экспериментальные данные по рассеянию нейтронов, показывающие появление спинового резонанса ниже $T_c = 25$ K в $\text{BaFe}_{1.85}\text{Co}_{0.15}\text{As}_2$ [319].

несоизмеримые вектора, см. Рисунок 5.5. В сверхпроводящих купратах, однако, Ферми-поверхность далека от нестинга и максимальная интенсивность спинового отклика на (π, π) является следствием зависящего от импульса сверхобмена.

Существует, однако, несколько загадок, связанных со спиновым резонансом. Как видно из Рисунка 5.3(b), поскольку условие нестинга очень чувствительно к изменениям $\mathbf{q}$ относительно $\mathbf{Q}$, то уже при $\mathbf{q} \approx 0.995\mathbf{Q}$ величина $\text{Re}\chi_0(\mathbf{q}, \Omega_r)$ становится значительно меньше, чем было на векторе $\mathbf{Q}$. Как результат, резонансный пик ограничен волновым вектором нестинга и практически не диспергирует, в отличие от случая ВТСП купратов. Следовательно можно ожидать, что когда система при допировании уходит от условия идеального нестинга, спиновый резонанс должен стать несоизмеримым с $\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}$. Это, однако, не наблюдается в семействах 1111 т допированных кобальтом 122, где резонанс всегда остаётся на векторе $\mathbf{Q}$ независимо от допирования (в пределах экспериментального разрешения) [319, 321–323]. С другой стороны, несоизмеримость была обнаружена в системе $\text{Fe}(\text{Se}, \text{Te})$ [16] и в допированной калием системе 122 [324]. В последнем случае концентрация допирования K была далека от оптимального, в отличие от работы [320], что может объяснить, почему

легче было уловить несоизмеримость. Однако, сейчас нет чёткого понимания, почему резонанс в некоторых случаях возникает на соизмеримых векторах, а в других - а несоизмеримых.

Другая загадка связана с анизотропией в спиновом пространстве, наблюдаемой в немагнитной фазе $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2\text{As}_2$ с помощью поляризованных нейтронов [338]. Было обнаружено, что $\text{Im}\chi_{+-}$ и $2\text{Im}\chi_{zz}$ отличаются, показывая различные частоты и интенсивности спиновых резонансов. Это противоречит условию спин-вращательной инвариантности (Spin-Rotational Invariance, SRI) $\langle S_+S_- \rangle = 2\langle S_zS_z \rangle$, которое должно соблюдаться в парамагнитной системе. Соотношение $\text{Im}\chi_{+-} > 2\text{Im}\chi_{zz}$ также подтверждается измерениями скорости спин-решёточной релаксации в ЯМР при помощи перпендикулярных магнитных полей [209, 339]. Одно из возможных решений этой загадки может быть присутствие спин-орбитального взаимодействия, которое нарушает спин-вращательную инвариантность [340].

Не так давно было высказано мнение, что теоретически предсказанный пик для изотропного $s_{\pm}$ -состояния слишком узкий и обладает слишком большой интенсивностью по сравнению с экспериментально наблюдаемым [341, 342]. Авторы работы [341] предложили альтернативное объяснение наблюдаемого пика, которое не опирается на изменяющий знак параметр порядка. Они отметили, что если присутствует коллапс рассеяния ($1/\tau$) ниже границы разрушения пар, то перераспределение спектрального веса при входе в сверхпроводящую фазу может привести к увеличению спинового отклика ниже T_c по сравнению с нормальной фазой. Этот эффект не является настоящим спиновым резонансом в том смысле, что отсутствует расхожимость в $\text{Im}\chi$, но, в зависимости от параметров, можно добиться существенного усиления спинового отклика.

С другой стороны, подобный резонанс в купратах, хотя и уже, чем в соединениях железа, всё равно достаточно широк, а в этом случае мало сомнений, что при таком рассеянии мы имеем дело с изменяющим знак параметром порядка. Уширение спиновых возбуждений может быть обязано множеству причин,

одна из наиболее очевидных - это существенная анизотропия $s_{\pm}$ -щели. Другая проблема в объяснении, выдвинутом в работе [341], в том, что требуется вполне определённый вид рассеяния в нормальном состоянии, $\text{Im}\Sigma(\mathbf{q}, \omega) = A(\pi T + \omega)$, а также необходимо тщательно подбирать параметр A . Тот факт, что чрезвычайно похожие свойства спиновых возбуждений наблюдаются во всех семействах соединений железа, может говорить против возможности изотропной щели s_{++} -типа. С точки зрения эксперимента важным является отличить ситуацию с резонансным пиком на $\Omega_{res} \leq \Omega_c$ и увеличением восприимчивости при $\omega > \Omega_c$. Первый случай относится к $s_{\pm}$ состоянию и косвенно подтверждает спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости, второй - к s_{++} и теории сверхпроводимости за счёт орбитальных флуктуаций или электрон-фононного взаимодействия. Пока точного ответа нет, но совокупность экспериментальных данных, как по спиновому резонансу, так и по интерференции квазичастиц (quasiparticle interference scattering, QPI), глубине проникновения, теплоёмкости и многим другим наблюдаемым характеристикам, свидетельствует в пользу $s_{\pm}$ состояния [10].

5.5. Заключение

Сформулирована четырёхзонная модель сверхпроводников на основе железа и вычислен спиновый отклик в состояниях с $s_{\pm}$ -, s_{++} - и d -симметриями сверхпроводящего параметра порядка. Показано, что спиновый резонанс в неупругом нейтронном рассеянии возникает только для $s_{\pm}$ -симметрии параметра порядка. Этот резонансный пик ограничен антиферромагнитным вектором и быстро исчезает при удалении от него. Результаты неупругого рассеяния нейтронов в $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$ качественно согласуются с рассчитанным спиновым резонансом, возникающем на несоизмеримом волновом векторе.

Глава 6

Магнитное состояние и его эволюция с допированием в пниктидах

В рамках четырёхзонной модели пниктидов исследована зависимость от допирования спинового отклика в нормальном состоянии. Показано, что переход в состояния соизмеримой волны спиновой плотности (Spin Density Wave, SDW), возникающий из-за рассеяния между дырочными α -карманами и электронными β -карманами, исчезает при допировании $x \approx 0.04$, что связано с эволюцией Ферми-поверхности. При дальнейшем увеличении допирования антиферромагнитные флуктуации подавляются при $x > 0.1$ и $\text{Im}\chi(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega)$ становится практически независимой от температуры величиной. В то же время, однородная восприимчивость отличается от паулиевского поведения и её возрастание с температурой отражает активационный процесс для α -кармана до температур порядка $T = 800$ K. С увеличением допирования абсолютное значение однородной восприимчивости уменьшается и изменяется её температурная зависимость - оно постоянна при низких температурах и уменьшается с увеличением T .

6.1. Эволюция магнитного отклика с допированием

Недопированные пниктиды являются антиферромагнитными металлами с температурой перехода порядка 150 K [27, 175, 343–345] и небольших магнитным моментом на атом Fe, варьирующимся от $0.25\mu_B$ [27] до $0.36\mu_B$ [344] и лежащим в плоскости ab .

Были предложены различные теории формирования АФМ порядка в этих системах. Так, DFT результаты говорят о том, что LaOFeAs должен быть антиферромагнитным полуметаллом [201, 327, 346] или системой с фрустрирован-

ным магнитным основным состоянием и двумя взаимопроникающими антиферромагнитными квадратными подрешётками [347, 348]. Аналогичный результат получается из модельных расчётов [349–351], где основное состояние предполагается моттовским диэлектриком. Однако, получающийся магнитный момент от $1.5\mu_B$ до $2.3\mu_B$ значительно, практически на порядок, больше найденного в экспериментах, что приводит к необходимости включать сильные флуктуации, которые этот момент уменьшали бы. С другой стороны, в моделях делокализованных электронов антиферромагнетизм в LaOFeAs возникает как нестабильность типа волны спиновой плотности из-за межзонного нестинга - между дырочной и электронной Ферми-поверхностями [27, 343, 352]. Как мы покажем далее, получается магнитный момент около $0.33\mu_B$, очень хорошо согласующийся с экспериментальными данными.

Чтобы понять, как магнетизм и спиновые флуктуации в пниктиде $\text{La}(\text{O}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs})$ изменяются с допированием x , мы исследуем магнитные возбуждения в четырёхзонной модели (5.1). В частности, мы покажем, что переход в фазу с соизмеримой волной спиновой плотности, возникающий благодаря рассеянию между дырочными α - и электронными β -карманами, исчезает уже при $x \approx 0.04$. Антиферромагнитные флуктуации с допированием уменьшаются и при $x \approx 0.1$ величина $\text{Im}\chi(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega)/\omega$ становится практически независимой от температуры. Также мы рассмотрим поведение однородной магнитной восприимчивости.

Параметры эффективной четырёхзонной модели (5.1) мы возьмём такими же, как и для описания спинового резонанса в разделе 5.1. Рассчитанная зависимость от допирования физической восприимчивости (5.3) показана на Рисунке 6.1. В недопированном случае она находится в качественном согласии с результатами модельных вычислений из работ [197, 199] и с первопринципными результатами работы [343].

Для данной топологии Ферми-поверхности основная магнитная нестабильность возникает на АФМ векторе $\mathbf{Q}_{AFM} = (\pi, \pi)$ в зоне Бриллюэна, соответ-

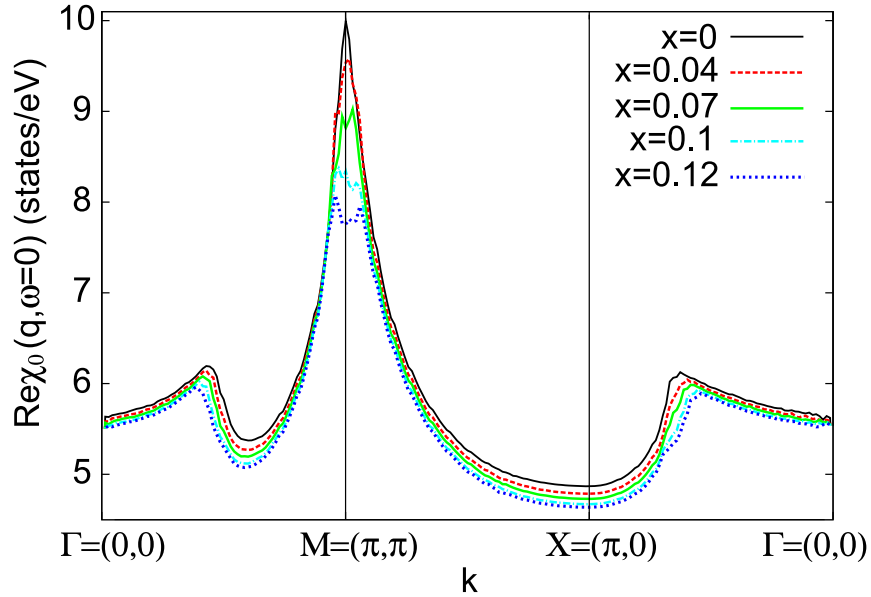


Рис. 6.1. Зависимость действительной части голой физической спиновой восприимчивости $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ от допирования.

ствующей двум атомам Fe на ячейку (2-FeBZ). Причина её состоит в межзонном нестинге - между дырочной α - и электронной β -зонами [24, 191, 197, 343]. Это хорошо видно из Рисунка 6.1. Отметим, что в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe на ячейку (1-FeBZ), вектор АФМ равен $\mathbf{Q}'_{AFM} = (\pi, 0)$, что соответствует “страйповому” АФМ порядку, наблюдаемому в нейтронном рассеянии [344].

6.2. Температурная зависимость Δ_{SDW}

В экспериментальной работе [27] содержатся результаты изучения магнитного порядка в LaFeAsO локальными методами - мёссбауэровской спектроскопией ^{57}Fe и релаксацией спина мюона (Muon Spin Relaxation, μSR) в нулевом внешнем поле, а также измерения намагниченности и сопротивления. В этих экспериментах был подтверждён соизмеримый статический магнитный порядок ниже $T_N = 138$ К с магнитным моментом $0.25(5)\mu_B$ на железе. Полученная из основной частоты прецессии мюона и статического магнитного сверхтонкого поля B_{hf} , измеренного мёссбауэровской спектроскопией, температурная зависи-

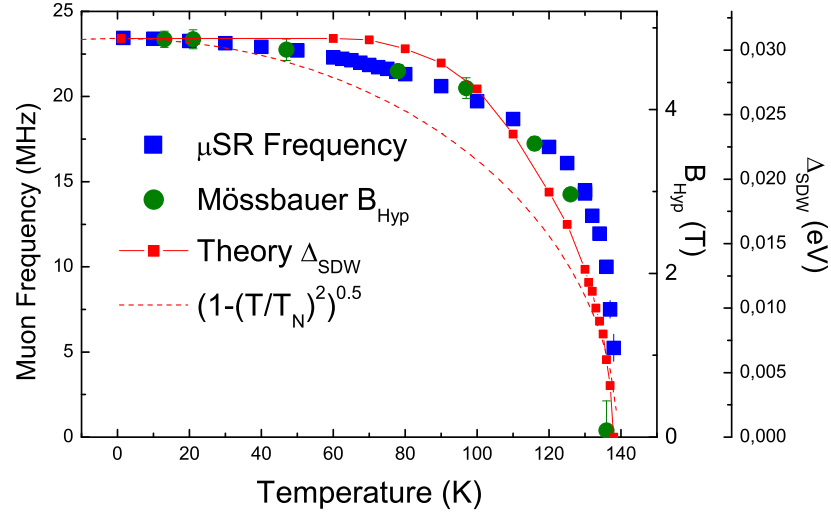


Рис. 6.2. Температурная зависимость основной частоты μ SR в нулевом поле и мёссбауэровского сверхтонкого поля [27]. Также приведены результаты расчёта $\Delta_{SDW}(T)$ и приближённое поведение параметра порядка в теории Ландау.

мость магнитного параметра порядка показана на Рисунке 6.2. Обе величины, как видно, ведут себя подобным образом.

Положив эффективное межзонное отталкивание равным $J = 70$ мэВ и выбрав внутризонное отталкивание $U = 320$ мэВ, мы получили температуру упорядочения $T_N = 138$ К из уравнения

$$\det [\mathbf{I} - \mathbf{\Gamma} \hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m)] = 0. \quad (6.1)$$

Ниже T_N это условие на нестабильность по отношению к формированию волны спиновой плотности можно рассматривать как уравнение среднего поля на параметр порядка Δ_{SDW} . Полученная таким образом температурная зависимость $\Delta_{SDW}(T)$ показана на Рисунке 6.2. Из-за многоорбитального характера уравнения (6.1) щель SDW достигает насыщения достаточно быстро при температуре ниже T_N , что приводит к температурной зависимости, отличающейся от $\sqrt{1 - (T/T_N)^2}$. В эксперименте наблюдается немного большее изначальное увеличение ниже T_N и ещё некоторые небольшие отличия теории от эксперимента на низких температурах. Причиной отличий могут быть термические

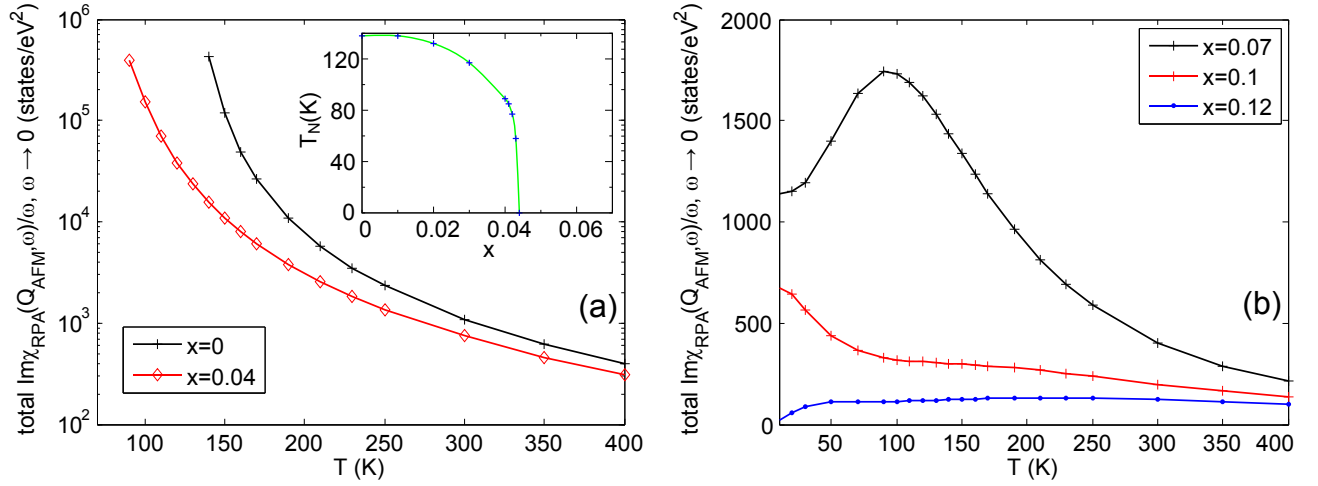


Рис. 6.3. Зависимость скорости спин-решёточной релаксации $\frac{1}{T_1 T} \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im}\chi_{\text{RPA}}(\mathbf{Q}_{\text{AFM}}, \omega)}{\omega}$ от допирования. На панели (а) использован логарифмический масштаб. Вставка на этой панели показывает рассчитанную зависимость температуры Нееля от допирования.

флуктуации, не участвующие в теории, а также детали зонной структуры. Из полученного при нуле температур значения $\Delta_{SDW}(T = 0\text{K}) = 31$ мЭВ мы оценили магнитный момент на железе как $\mu \approx 0.33\mu_B$. Учитывая, что наша теория среднего поля не учитывает квантовые флуктуации, значение больше экспериментального неудивительно.

На вставке Рисунка 6.3(а) показана полученная зависимость температуры Нееля от допирования. Она довольно быстро уменьшается и уходит в ноль при $x \approx 0.04$. Причина быстрого подавления температуры Нееля очевидна. Вдали от $x = 0$ спектральный вес дырочного α -кармана на Ферми-поверхности уменьшается и условие межзонного нестинга ухудшается, как видно из Рисунка 6.1. В частности, пик на АФМ векторе $\mathbf{Q}_{\text{AFM}}$ уменьшается очень быстро при $x \neq 0$. То, что такие малые отклонения от недопированного случая кардинально изменяют ситуацию, видно на экспериментальных данных ЯМР [353]. Это даёт дополнительное подтверждение сценария нестинга как основного в формировании АФМ перехода.

6.3. Скорость спин-решёточной релаксации и однородная магнитная восприимчивость

Скорость спин-решёточной релаксации, измеряемое в ЯМР, даётся стандартной формулой:

$$\frac{1}{T_1 T} \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)}{\omega}. \quad (6.2)$$

Основной вклад в сумму дают межзонные процессы рассеяния с $\mathbf{q} \sim \mathbf{Q}_{AFM}$, поэтому неплохим приближением будет $\frac{1}{T_1 T} \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \chi(\mathbf{Q}_{AFM}, \omega)}{\omega}$. Её зависимость от допирования приведена на Рисунке 6.3. При $x = 0$ она расходится на T_N и при допировании антиферромагнитные флуктуации быстро подавляются. Отметим, что $1/T_1 T$ при $x = 0.12$ не проявляет никакого увеличения, характерного для сильных антиферромагнитных спиновых флуктуаций и остаётся практически постоянной. Несмотря на то, что действительная часть восприимчивости всё ещё имеет пик вблизи $\mathbf{Q}_{AFM}$, АФМ флуктуации сильно подавлены в мнимой части спиновой восприимчивости. Это происходит из-за того, что в РРА отклик имеет матричную форму и подавление флуктуаций довольно сильно. Такое поведение качественно согласуется с наблюдаемой в экспериментах ЯМР картиной [213, 353–356].

На Рисунке 6.4 показана температурная зависимость однородной восприимчивости $\chi_{RPA}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0)$ при различном допировании. При нулевом допировании полная восприимчивость немного увеличивается как функция температуры до 600 К и затем уменьшается. Если обратить внимание на парциальные вклады, то видно, что эта температурная зависимость определяется в основном переходами между α -зонами, которые образуют дырочные карманы вокруг точки Г. Дырочные карманы α_1 и α_2 только немного расщеплены. Щель между двумя энергиями Ферми, соответствующими нулевому переданному импульсу, около 50 мэВ. Следовательно, из-за вызванного температурой перехода между двумя зонами α , межзонная восприимчивость будет увеличиваться

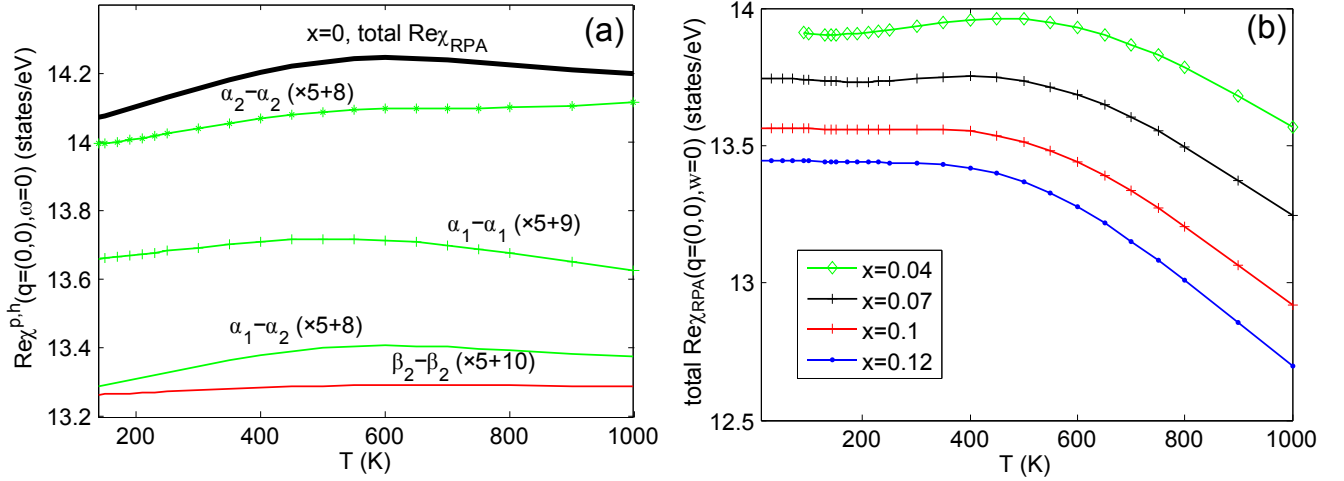


Рис. 6.4. Однородная полная спиновая восприимчивость $\chi_{RPA}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0)$ как функция температуры при $x = 0$ (a) и при другом допировании (b). На панели (a) показаны парциальные вклады от внутризонных и межзонных переходов.

с увеличением температуры до 600 K, а затем будет падать. Это небольшое увеличение восприимчивости качественно согласуется с экспериментальными данными [27, 357]. Отметим, что переходы в β -зонах и между зонами α и β приводят к паулиевскому поведению. При увеличении допирования общая величина восприимчивости уменьшается, что отражает уменьшение полной восприимчивости, показанное на Рисунке 6.1. Последнее происходит из-за заполнения дырочных карманов. Также мы наблюдаем изменение в температурной зависимости. При $x > 0.1$ однородная восприимчивость постоянна до 200 K, а затем уменьшается с увеличением температуры. Это изменение обусловлено заполнением зон α при изменении допирования и уменьшением их относительного расщепления, как видно из Рисунка 5.1.

В нашем анализе мы пренебрегли некоторыми деталями зонной структуры пниктидов и другими трёхмерными Ферми-поверхностями, которые быстро исчезают с допированием. Хотя включение последних может быть важно с точки зрения формирования трёхмерного неелевского порядка, оно сильно не изменит зависимость от допирования двумерных внутриплоскостных магнитных флуктуаций.

6.4. Заключение

Итак, мы проанализировали зависимость спиновых возбуждений в системе $\text{La}(\text{O}_{1-x}\text{F}_x)\text{FeAs}$ от допирования в модели делокализованных электронов. Вычислен магнитный момент $\mu = 0.33\mu_B$, что очень близко к наблюдаемому значению $0.25(5)\mu_B$. Мы обнаружили, что межзонные антиферромагнитные спиновые флуктуации достаточно быстро подавляются и температура Нееля исчезает при $x \approx 0.04$. При дальнейшем допировании спиновые флуктуации исчезают при $x \approx 0.12$, что находится в согласии с данным ЯМР. Из-за многоорбитального характера системы однородная статическая восприимчивость не показывает ни паулиевское, ни Кюри-Вейсовское поведение. В частности, при малом допировании полная восприимчивость немного увеличивается до 600 К, а затем уменьшается. При увеличении допирования восприимчивость остаётся постоянной при низких температурах, а затем уменьшается с увеличением температуры. Такое характерное поведение возникает из-за межзонных переходов между слабо расщеплёнными дырочными зонами α .

Линейная температурная зависимость спиновой восприимчивости в соединениях железа

Здесь мы изложим объяснение необычной линейной температурной зависимости однородной спиновой восприимчивости $\chi(T)$ в пниктидах. Мы покажем, что линейный по T член возникает из-за неаналитической температурной зависимости $\chi(T)$ в двумерной Ферми-жидкости. Множитель перед температурным членом выражается через квадрат амплитуды волны спиновой плотности (Spin-Density Wave, SDW), связывающей дырочные и электронные карманы. Из-за близости неустойчивости SDW эта амплитуда велика, что, вместе с малым значением энергии Ферми, приводит к сильной температурной зависимости $\chi(T)$. Мы покажем, что этот механизм находится в количественном согласии с экспериментом.

Основная гипотеза теории Ферми-жидкости состоит в том, что система сильно взаимодействующих фермионов может рассматриваться как эффективный газ слабо взаимодействующих квазичастиц. В отсутствие остаточного взаимодействия между квазичастицами статическая однородная спиновая восприимчивость $\chi(T)$ и коэффициент удельной теплоёмкости $\gamma(T)$ конечны при $T = 0$ и подчиняются квадратичной зависимости от T при низких температурах. Влияние остаточных взаимодействий на $\chi(T)$ и $\gamma(T)$ интенсивно изучалось не так давно (см. обзоры [358, 359] и ссылки в них) и основным результатом состоит в том, что в двумерии (2D) обе величины, $\gamma(T)$ и $\chi(T)$, линейны, а не квадратичны, по T [360–364].

Теория говорит, что поведение $\gamma(T)$ универсально в том смысле, что (отрицательный) угол наклона происходит от амплитуды рассеяния назад [365]. Линейное уменьшение наблюдалось в монослоях ^3He [366]. С другой стороны, линейный по T член в спиновой восприимчивости не является универсальным

и может иметь любой знак [364, 367–369], приводя к неопределённости в интерпретации экспериментов на полупроводниковых гетероструктурах [370–372].

В сверхпроводниках на основе железа была обнаружена выраженная линейная температурная зависимость однородной восприимчивости [373–376]. Она идёт от температур выше перехода в состояние SDW или сверхпроводящую фазу до 500 – 700 K с практически не зависящим от допирования наклоном. Температурная зависимость довольно сильная: $\chi(T)$ увеличивается примерно в два раза на температурах между 200 K и 700 K. В работе [377] было предложено объяснение этого поведения на основании $J_1 - J_2$ модели локализованных спинов. Однако, учитывая, что линейное по T поведение наблюдается и при высоком допировании, где в локальных исследованиях, таких как ЯМР и μ SR, локальных моментов не наблюдают [27, 353], это объяснение довольно сомнительно.

Пниктиды показывают поведение, характерное для системы делокализованных электронов. В них очевидной причиной возникновения порядка SDW является логарифмическая расходимость вершины частица-дырка, зависящая от нестинга Ферми-поверхности [24, 190, 191, 221, 343, 378, 379].

Далее мы расскажем об объяснении экспериментальной температурной зависимости спиновой восприимчивости, основанной на картине делокализованных электронов. Мы покажем, что происхождение линейного увеличения $\chi(T)$ с температурой в пниктидах такое же, как и в двумерной Ферми-жидкости. Более того, такое поведение универсально для Ферми-жидкости с сильными (π, π) -флуктуациями волны спиновой плотности. А именно, угол наклона линейной T -зависимости определяется квадратом амплитуды SDW с импульсом нестинга $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Эта амплитуда велика что, совместно с малым значением энергии Ферми ε_F , приводит к увеличению T -зависимости $\chi(T)$. Выбирая такую величину константы связи SDW, с которой воспроизводится наблюдаемая температура перехода T_N при нулевом допировании, мы видим очень хорошее согласие между вычисленным и измеренным углом наклона $\chi(T)$. Зависимость

от допирования угла наклона также согласуется с экспериментальными данными. Такое согласие можно рассматривать как прямое указание на то, что линейная температурная зависимость $\chi(T)$ в пниктидах [373–376] является первым недвусмысленным наблюдением неаналитического поведения двумерной спиновой восприимчивости. Кроме того, что это важно само по себе с фундаментальной точки зрения, это наблюдение также указывает на картину делокализованных электронов в сверхпроводниках на основе железа.

7.1. Теория

Далее мы будем рассматривать двухзонную модель взаимодействующих фермионов, формирующих электронные и дырочные Ферми-поверхности:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[\varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \right] + \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma, \sigma'} H_{\text{int}}, \\
 H_{\text{int}} &= u_1 c_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger f_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + u_2 f_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + \\
 &+ \frac{u_3}{2} \left[f_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger f_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + H.c \right] + \\
 &+ \frac{u_4}{2} f_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger f_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}_2\sigma'} f_{\mathbf{p}_1\sigma} + \frac{u_5}{2} c_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma}.
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

Здесь $c_{\mathbf{k}\sigma}$ ($f_{\mathbf{k}\sigma}$) - оператор уничтожения дырки (электрона) с импульсом $\mathbf{k}$ и спином σ (для электронов $\mathbf{k}$ отсчитывается от точки (π, π)), $\varepsilon_{\mathbf{k}}^c$ и $\varepsilon_{\mathbf{k}}^f = -\varepsilon_{\mathbf{k}}^c + 2\mu$ представляет собой одночастичные дисперсии, а μ является мерой отклонения от идеального нестинга.

Мы предположим, что каждая из электронных и дырочных Ферми-поверхностей дважды вырождена. Существуют пять различных низкоэнергетических взаимодействий между фермионами. Члены с u_4 и u_5 - это внутризонные взаимодействия ($u_4 = u_5$ в случае симметрии частиц и дырок), члены с u_1 и u_2 - это межзонные взаимодействия с переносом импульса 0 и $\mathbf{Q}$, соответственно, а член с u_3 - это межзонный парный перескок. Эти взаимодействия схематично проиллюстрированы на Ферми-поверхности на Рисунке 7.1, а в диаграммном

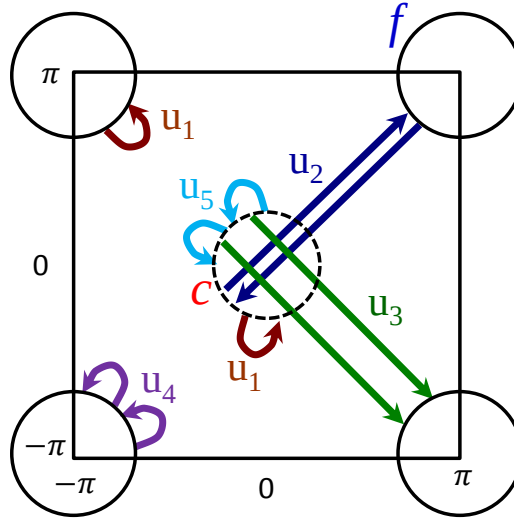


Рис. 7.1. Взаимодействия, входящие в модель 7.1, показанные на схематичной Ферми-поверхности, образованной дырочным карманом (c -фермионы) и электронными карманами (f -фермионы).

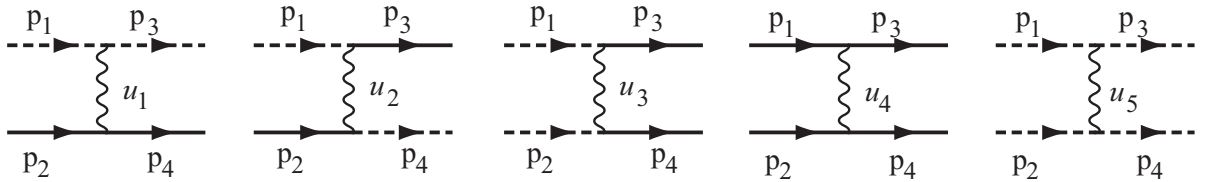


Рис. 7.2. Диаграммное представление взаимодействий между f -фермионами на дырочных (сплошные линии) и c -фермионами на электронных (пунктирные линии) Ферми-поверхностях.

виде - на Рисунке 7.2. Все взаимодействия переходят (“перетекают”) от их изначальных значений на энергиях порядка ширины зоны к перенормированным значениям на энергии Ферми ε_F [221, 379]. Мы предположим, что все перенормировки уже включены в гамильтониан (7.1) и будем анализировать поведение системы на энергиях ниже ε_F .

Сначала мы получим линейный по T вклад в спиновую восприимчивость $\delta\chi(T)$ во втором порядке по взаимодействию, а затем покажем, что множитель перед T в $\delta\chi(T)$ выражается через вершину SDW во всех порядках по взаимодействию.

На Рисунке 7.3 показаны все топологически неэквивалентные диаграммы второго порядка для термодинамического потенциала $\Phi(T, H)$, описывающие

как внутризонные, так и межзонные процессы. Каждая диаграмма содержит следующий объект:

$$\varphi(T, H) = T^3 \sum_{\Omega} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\omega, \omega'} \int \frac{d^2 \mathbf{k} d^2 \mathbf{p}}{(2\pi)^4} G_{\mathbf{k}, \omega}^{\sigma} G_{\mathbf{p}, \omega'}^{\sigma} G_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \omega'+\Omega}^{\sigma'} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \omega+\Omega}^{\sigma'}, \quad (7.2)$$

где $G_{\mathbf{k}, \omega}^{\sigma}$ - это мацубаровская функция Грина s - или f -фермионов с импульсом $\mathbf{k}$ и спином σ в магнитном поле H . Как и в обычной Ферми-жидкости, неаналитические члены $H^2 T$ в $\varphi(T, H)$ возникают из динамической коновской аномалии, т.е. из диаграмм, в которых линии взаимодействия переносят импульс $2k_F$ [362, 364]. Более удобно, однако, выразить результат через поляризационную петлю с малыми импульсами, а не с $2k_F$. Функции Грина в выражении (7.2) могут быть объединены двумя способами: или как $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\sigma\sigma} \Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\sigma'\sigma'}$, или как $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\sigma\sigma'} \Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\sigma'\sigma}$, где $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\sigma\sigma'} = T \sum_{\omega} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_{\mathbf{k}, \omega}^{\sigma} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \omega+\Omega}^{\sigma'}$ - это поляризационная петля типа ss , ff или sf с малым импульсом $q \ll k_F$. Петля зависит от магнитного поля, если зеемановская энергия двух фермионов складывается. Можно легко показать, что зависимость от поля входит в ss - и ff -петли через $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\uparrow\downarrow}$, в то время, как поле входит в петлю sf посредством членов $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\uparrow\uparrow}$ и $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\downarrow\downarrow}$. Вычисляя каждую диаграмму, мы находим, что каждая из них может быть выражена как произведение двух динамических петель для спина вверх/вниз:

$$\Pi_{\mathbf{q}, \Omega} = \frac{m}{2\pi} \frac{|\Omega|}{\sqrt{(\Omega - 2i\mu_B H - 2i\mu^*)^2 + (v_F q)^2}}, \quad (7.3)$$

где $\mu^* = 0$ для внутризонного рассеяния и $\mu^* = \mu$ для межзонного рассеяния. Дальнейшие вычисления идут так же, как и в случае обычной Ферми-жидкости [362, 364]. Вкратце, сначала $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^2$ интегрируется по $\mathbf{q}$, затем мацубаровская сумма заменяется контурным интегралом, от результата берётся вторая производная по H чтобы получить восприимчивость, потом кладётся $H = 0$ и получаются члены $O(T)$ в χ . Первые две диаграммы на Рисунке 7.3 описывают внутризонные процессы и дают такой же результат $\chi(T)$, как и в работах [362, 364]: $\delta\chi_{1,2}(T) = \lambda u_{4,5}^2 T$, где $\lambda = 4\chi_0 N_F^2 / (2\varepsilon_F)$, $\varepsilon_F = v_F k_F / 2$, $\chi_0 = 2\mu_B^2 N_F$ - это восприимчивость Паули на каждую из Ферми-поверхностей,

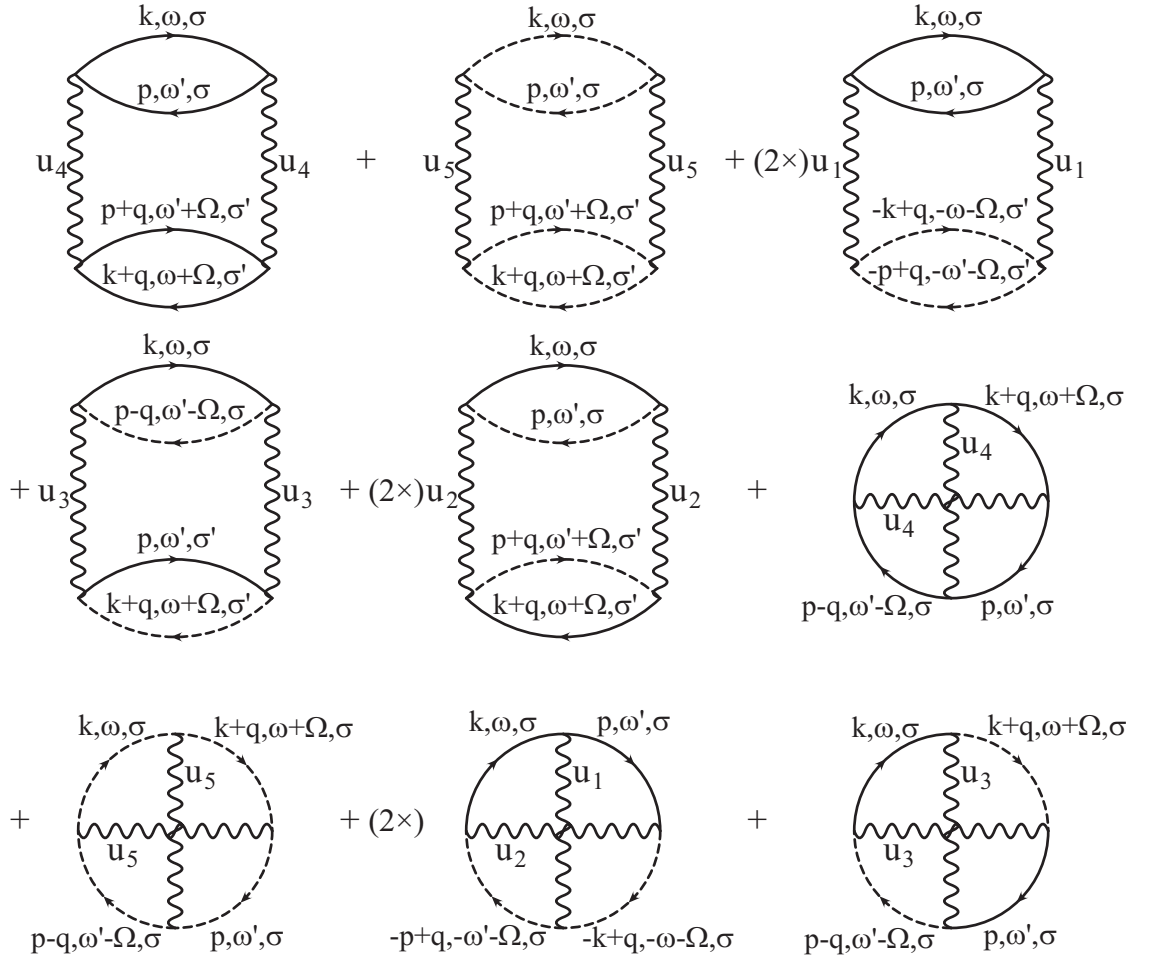


Рис. 7.3. Диаграммы второго порядка для термодинамического потенциала. Сплошными и пунктирными линиями показаны f -фермионы (электроны) и s -фермионы (дырки), соответственно.

а $N_F = m/2\pi$ - это плотность состояний. Множитель 4 в λ возникает из-за двукратного вырождения электронных и дырочных зон. Диаграммы от третьей до пятой зависят от межзонного рассеяния и приводят к следующим результатам: $\delta\chi_3(T) = 2\lambda u_1^2 T \eta(\mu/T)$, $\delta\chi_4(T) = \lambda u_3^2 T \eta(\mu/T)$ и $\delta\chi_5(T) = 2\lambda u_2^2 T \eta(\mu/T)$. Здесь $\eta(x) = 2x \coth x - x^2 / \sinh^2 x - 2x$. Третья и четвёртая диаграммы дают конечный вклад, если $\sigma = \sigma'$, а пятая диаграмма - если $\sigma = -\sigma'$. Шестая и седьмая диаграммы не вносят вклад в $\delta\chi(T)$, а оставшиеся две дают $\delta\chi_8(T) = -2\lambda u_1 u_2 T \eta(\mu/T)$ и $\delta\chi_9(T) = -\lambda u_3^2 T \eta(\mu/T)$.

Объединяя все диаграммы, получаем:

$$\delta\chi(T) = \lambda T [u_4^2 + u_5^2 + 2(u_1^2 + u_2^2 - u_1 u_2) \eta(\mu/T)]. \quad (7.4)$$

Первые два члена происходят от внутризонных процессов и совпадают со вкладом в обычной двумерной Ферми-жидкости. Остальные члены происходят от межзонных процессов, специфичных для электронной структуры соединений железа. При $T \gg \mu$ (идеальный нестинг) $\eta(\mu/T) \approx 1$ и внутри- и межзонные процессы дают линейный по температуре вклад в спиновую восприимчивость. В противоположном пределе $T \ll \mu$ (плохой нестинг) $\eta(\mu/T) \sim \exp(-2\mu/T)$ и межзонный вклад в $\chi(T)$ подавляется экспоненциально. В промежуточном режиме, когда $T \sim \mu$, функция $\eta(\mu/T)$ немонотонна. Отметим, что парный перескок u_3 , который приводит к притяжению в канале спаривания с $s_{\pm}$ -симметрией [221], не вносит вклад в температурную зависимость $\chi(T)$.

Константы связи в уравнении (7.4) - это взаимодействия на масштабе энергии Ферми. Эти взаимодействия уже перенормированы от своих изначальных (“голых”) значений на масштабе энергий порядка ширины зоны [221] с помощью паркетной ренормгруппы. В подходе работы [221] получается, что u_4 , u_5 и u_1 приходят к одному значению, а u_2 - к меньшему значению. Перенормированные константы связи на масштабе ε_F слабо зависят от входящего и переданного импульсов. Дальнейшая перенормировка на энергиях, ниже ε_F , приводит к различию между u_i с разными переданными и входящими импульсами. Такая перенормировка особенно важна в рассматриваемой системе, т.к. u_1 , соответствующее процессу рассеяния $u_1(\mathbf{k}, \mathbf{p} + \mathbf{q}; \mathbf{p}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{p}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}$, расходится при возникновении неустойчивости SDW на $\mathbf{q} = 0$ (напомним, что импульс для f -фермионов отсчитывается от $\mathbf{Q}$, так что перенос импульса между c - и f -фермионами на самом деле равен $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$). Сингулярная вершина есть $u_1(\mathbf{k}, \mathbf{p}; \mathbf{p}, \mathbf{k})$, что соответствует обмену электронов и дырок своими импульсами. Отметим, что расходимость возникает для любого угла между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$. При малых константах связи увеличение u_1 ограничено величиной $q \ll k_F$, а для произвольного $q \sim k_F$ взаимодействие u_1 сохраняет своё “голое” значение.

Покажем, что член u_1^2 в $\chi(T) \propto T$ - это то же самое взаимодействие, которое расходится на неустойчивости SDW. Чтобы это продемонстрировать,

сначала мы отметим, что импульсы фермионов на диаграммах для $\Phi(T, H)$ ограничены двумя условиями: 1) перенос импульса имеет значение примерно равное $2k_F$ и 2) все четыре импульса лежат вблизи Ферми-поверхности. Для третьей диаграммы на Рисунке 7.3 это означает, что $\mathbf{p} \approx -\mathbf{k}$, $|\mathbf{k}| \approx k_F$, а q - мало ($\sim T/v_F$). Следовательно, вершина в этой диаграмме это не что иное, как $u_1(\mathbf{k}, -\mathbf{k}; -\mathbf{k}, \mathbf{k})$. Это аналог амплитуды обратного рассеяния в двумерной Ферми-жидкости. Вершина $u_1(\mathbf{k}, -\mathbf{k}; -\mathbf{k}, \mathbf{k})$ является специальным случаем вершины SDW $u_1(\mathbf{k}, \mathbf{p}; \mathbf{p}, \mathbf{k})$ при $\mathbf{p} = -\mathbf{k}$.

Теперь рассмотрим диаграммы высшего порядка. Их можно разделить на два типа. В диаграммах первого типа неаналитичность получается, если оставлять только динамические петли $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}$ и собирать остальные части диаграмм в перенормировку статической амплитуды рассеяния. В частности, амплитуда рассеяния назад $u_1(\mathbf{k}, -\mathbf{k}; -\mathbf{k}, \mathbf{k})$ после перенормировок преобразуется в эффективное взаимодействие u_1^{eff} , которое расходится при возникновении неустойчивости SDW. Сингулярные перенормировки u_1 формируют лестничную последовательность, которая суммируется в

$$u_1^{\text{eff}} = \frac{u_1}{1 - u_1 N_F \ln \frac{\varepsilon_F}{\max(T, \mu)}}. \quad (7.5)$$

Второй тип диаграмм высшего порядка содержит три и более динамических петель. Члены порядка u_1^3 и т.д. не выражаются через амплитуду обратного рассеяния, а содержат u_1 с типичными импульсами q порядка k_F . Для таких импульсов u_1 не усиливается флуктуациями SDW и остаётся малой величиной.

Более того, диаграммы обоих типов содержат аналитические члены $(T/\varepsilon_F)^2$. Такие члены были проанализированы численно при изучении линейного по температуре поведения скорости Ферми в двумерной Ферми-жидкости [380] и было найдено, что они малы даже при $T \sim \varepsilon_F$. Мы предполагаем, что то же самое имеет место у нас и далее пренебрегаем регулярными членами.

Пренебрегая u_2 и положив $u_1 = u_4 = u_5 \equiv u > 0$, мы получаем:

$$\delta\chi(T) \approx \frac{8(uN_F)^2 \chi_0}{v_F k_F} T \left[1 + \frac{\eta(\mu/T)}{\left(1 - uN_F \ln \frac{\varepsilon_F}{\max(T, \mu)}\right)^2} \right]. \quad (7.6)$$

Этот результат для $\delta\chi(T)$ был получен из выражения (7.4) заменой $u = u_1$ точной амплитудой SDW u_1^{eff} из уравнения (7.5). Наш результат похож на результат для удельной теплоёмкости [365], но отличается от результата для $\delta\chi(T)$ в обычной двумерной Ферми-жидкости, где полное $\delta\chi(T)$ не выражается через амплитуду обратного рассеяния [364, 367–369]. Эта разница происходит из симметрии между каналом частица-частица (куперовский канал) в обычной Ферми-жидкости и каналом частица-дырка в Ферми-жидкости с нестингом. Действительно, вклад обратного рассеяния в $\gamma(T)$ и $\delta\chi(T)$ в обычной Ферми-жидкости подвергается логарифмическим перенормировкам в куперовском канале. Однако, куперовские лестницы для обычного случая идентичны лестницам частица-дырка для случая нестинга, кроме того, что знак взаимодействия обратный, т.е. неустойчивость SDW при $u > 0$ в случае нестинга соотносится с куперовской неустойчивостью при $u < 0$ для обычного случая. В обоих случаях также присутствует вклад в $\delta\chi(T)$ не от рассеяния обратно. В обычном случае член с обратным рассеянием уменьшается в результате куперовской перенормировки и вклад не от рассеяния обратно начинает играть доминирующую роль. В случае нестинга перенормировки SDW увеличивают член, возникающий из-за обратного рассеяния, и остальными вкладами можно пренебречь. А куперовский канал, собранный из электронов и дырок, в случае нестинга эквивалентен каналу частица-дырка в обычном случае и, следовательно, не расходится логарифмически.

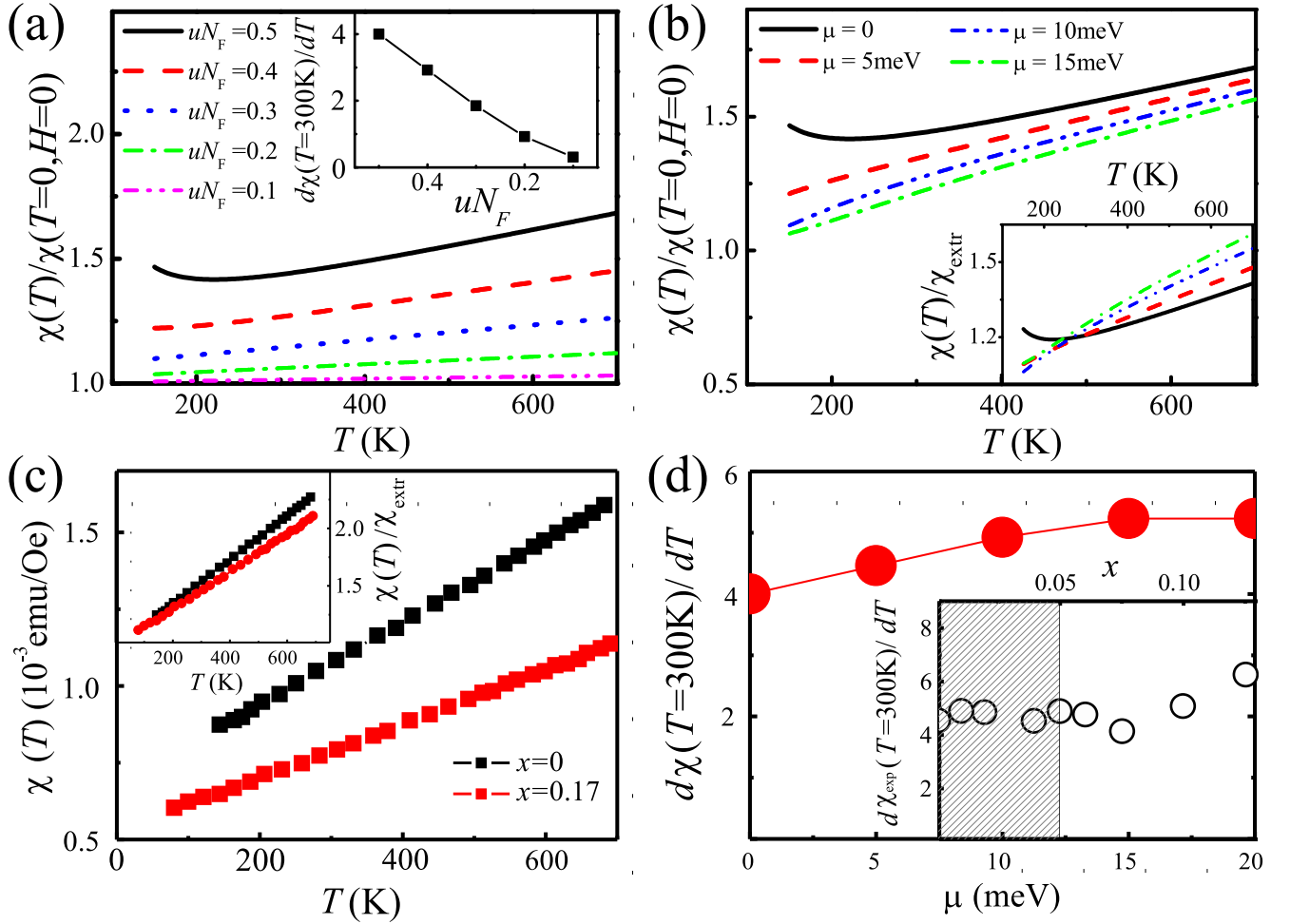


Рис. 7.4. (a) Температурная зависимость спиновой восприимчивости $\chi(T)$ согласно уравнению (7.6) для идеального нестинга ($\mu = 0$) и различных величин взаимодействия uN_F . В численных расчётах величина $\max(T, \mu)$ в уравнении (7.6) заменялась на $\sqrt{T^2 + \mu^2}$. Вставка: вычисленный угол наклона, $d\chi(T)/dT$, как функция uN_F при $T = 300$ K (значение выбрано, чтобы совпадало с работой [375]). (b) Вычисленная $\chi(T)$ для $uN_F = 0.5$ при различных μ . Вставка: те же кривые, что и на панели (a), но нормированные на χ_{extr} , полученную экстраполяцией $\chi(T)$ до $T = 0$. (c) $\chi(T)$ в $\text{BaFe}_{2-x}\text{Co}_x\text{As}_2$ из работы [376]. Вставка: те же кривые, что и на основной панели, но нормированные на $\chi(0)$. (d) Вычисленный угол наклона при $T = 300$ K, $d\chi(T = 300\text{K})/dT$, как функция μ . Вставка: экспериментально определённый угол наклона как функция допирования из работы [375].

7.2. Сравнение с экспериментальными данными

Теперь мы используем выражение (7.6) для описания пниктидов. Экспериментальные результаты для $\chi(T)$ в $\text{BaFe}_{2-x}\text{Co}_x\text{As}_2$ [376] показаны на Рисунке 7.4(с). Из этих данных мы оценили угол наклона температурной зависимости как $(\chi(700\text{K})/\chi(0))_{\text{exp}} \approx 2$, где $\chi(0)$ получено из экстраполяции $\chi(T)$ к $T = 0$ (теоретически, должно быть $\chi(0) \approx 4\chi_0$).

Выбирая $v_F = 0.45$ эВ·Å и $k_F \approx 0.16$ Å⁻¹ в соответствии с данными ARPES [330], мы получаем $\varepsilon_F \sim 0.04$ эВ. Для дисперсии общего вида энергия Ферми ε_F , определённая подобным образом, не соответствует энергетическому масштабу, разделяющему режимы статистик Ферми-Дирака и Больцмана. Последняя возникает при температурах порядка температуры Ферми T^* . Можно показать, что высшие степени T в $\delta\chi(T)$ становятся важны при $T \sim T^*$. Как известно из эксперимента [381], температура Ферми варьируется в пниктидах от 600 К до 1500 К. Из расчёта, представленного на Рисунке 6.4, также видно, что в модели, подобной используемой здесь, отклонения от постоянной величины восприимчивости практически отсутствуют вплоть до 600 К. Поэтому мы предполагаем, что T^* в пниктидах достаточно высоко, чтобы на интересующих нас в данный момент температурах выполнялась статистика Ферми-Дирака и реализовалась линейная температурная зависимость $\delta\chi(T)$.

Единственный неизвестный параметр теории - безразмерная константа связи uN_F . Мы его фиксируем требуя, чтобы вершина SDW u_1^{eff} увеличивалась при достижении T_N ($T_N = 140$ К при нулевом допировании). Так как уравнение (7.5) - это приближённая однопетлевая формула, мы выбираем следующий критерий: u_{eff} должно увеличиться в два раза при $T = T_N$. Это даёт $uN_F \approx 0.5$. Теперь, когда все параметры определены, мы находим угол наклона $(\chi(T = 700\text{K})/\chi(0))_{\text{theor}} \approx 1.7$, что очень близко к экспериментальному значению $(\chi(700\text{K})/\chi(0))_{\text{exp}} \approx 2$. Подробное сравнение между экспериментальными данными и результатами расчёта согласно уравнению (7.6) дано на Рисунке 7.4,

где также показаны зависимости угла наклона от uN_F и μ . Видно очень хорошее согласие с экспериментальными данными.

Также мы можем сделать простое предсказание для будущих экспериментов. В нашей теории угол наклона линейного по температуре члена должен увеличиваться в магнитном поле как $\chi(T, H) = \chi(T, 0) [1 + (\mu_B H/T)^2]$ при $\mu_B H \ll T$ [362]. Вблизи оптимального допирования линейная температурная зависимость $\chi(T)$ длится до $T \sim T_c$ и эксперименты в поле порядка 10 Тесла должны иметь возможность обнаружить такое поведение.

7.3. Заключение

Итак, мы проанализировали неаналитические, линейные по температуре, члены в спиновой восприимчивости двумерной электронной Ферми-жидкости с нестингом между дырочными и электронными карманами. Обнаружено, что множитель перед T содержит то же межзонное взаимодействие u_1^{eff} , которое увеличивается флуктуациями волны спиновой плотности. Эти результаты количественно описывают сильную температурную зависимость однородной спиновой восприимчивости в пниктидах, наблюдаемую в экспериментах. Немедленное следствие предложенного механизма в том, что χ должно испытывать настолько же сильную линейную зависимость от магнитного поля [364].

Анизотропия времени жизни квазичастиц в пятиорбитальной модели пниктидов

Мы исследуем динамическое рассеяния квазичастиц спиновыми и зарядовыми флуктуациями в пятиорбитальной модели соединений железа. Главный вклад в величину рассеяния мы вычислим из диаграмм второго порядка с поляризационным оператором, вычисленным в приближении хаотических фаз. Найденная одночастичная интенсивность рассеяния очень анизотропна на каждой Ферми-поверхности из-за импульсной зависимости спиновой восприимчивости и многоорбитального состава каждого Ферми-кармана. Вместе с анизотропией эффективной массы, это приводит к разнице проводимости и коэффициента Холла электронов и дырок в качественном согласии с экспериментальными данными.

Поскольку в недопированных пниктидах размеры дырочных и электронных Ферми-поверхностей примерно одинаковы (ситуация компенсированного металла), можно ожидать исчезающе малой величины коэффициента Холла и примерно симметричной электрон-дырочной зависимости от допирования. Однако, в хорошо изученных системах типа 122 ($\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$, $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2\text{As}_2$) и типа 1111 ($\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$) измерения эффекта Холла показали, что даже в недопированных системах в транспортных свойствах доминируют электроны [382–387]. В компенсированном случае этот результат можно объяснить только если мобильности дырок и электронов существенно отличаются, что подразумевает разницу на порядок во временах релаксации $\tau_e \gg \tau_h$ [383]. Подобная сильная асимметрия электронных и дырочных интенсивностей рассеяния также была предложена из анализа электронного комбинационного рассеяния, которым с помощью различных поляризаций можно избирательно измерять интенсивность от разных частей зоны

Бриллюэна [388]. Оптическая проводимость, измеренная в терагерцовой спектроскопии, даёт оценку $\tau_e \approx 4\tau_h$ [389]. Теоретический анализ сопротивления ρ в нормальном состоянии в двухзонной модели $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ показал, что экспериментальную температурную зависимость $\rho(T)$ можно воспроизвести, только если предполагать на порядок большую величину рассеяния в дырочной зоне [390]. Эксперименты по измерению квантовых осцилляций в допированных фосфором системах показывают, что на электронных карманах у частиц большее расстояние свободного пробега [391–393]. Очевидно, что необходимо понять, действительно ли имеет место такая разница между свойствами электронного и дырочного транспорта, и если так, то является ли она универсальной для сверхпроводников на основе железа.

Существует два основных источника затухания квазичастиц: 1) электрон-электронное неупругое рассеяние и 2) рассеяние на примесях. Здесь мы сконцентрируемся на первом случае и только кратко обсудим второй. С точки зрения эксперимента, наблюдаемое различие подвижности дырок и электронов становится тем меньше, чем больше допирование и, следовательно, чем дальше система от магнето-упорядоченного состояния [383]. Это может означать, что магнитные флуктуации, также уменьшающиеся с допированием, играют важную роль в асимметрии интенсивности рассеяния.

Далее мы рассмотрим неупругое рассеяние квазичастиц в сверхпроводниках на основе железа, для чего мы вычислим интенсивность рассеяния на различных Ферми-поверхностях в обобщённой теории спиновых флуктуаций. Собственно-энергетическая часть будет приближённо выражена диаграммами второго порядка с поляризационным оператором в приближении хаотических фаз (Random Phase Approximation, RPA). Мы покажем, что присутствуют два ингредиента, которые вместе приводят к сильной анизотропии интенсивности рассеяния. Наиболее важным является связанный с тем, что на одночастичное рассеяние сильно влияет орбитальный характер начальных и конечных состояний, по аналогии с эффектом орбиталей на рассеяние куперовских пар [198, 394],

что приводит к импульсной зависимости эффективных взаимодействий. Вторым ингредиентом - импульсная зависимость поляризационной петли. Эта комбинация приводит к сильно анизотропной интенсивности рассеяния на электронной Ферми-поверхности, включающей некоторое очень долгоживущие состояния квазичастиц. Хотя наши результаты и показывают, что в среднем τ_e того же порядка, что и τ_h , транспортные свойства могут определяться малыми участками электронных карманов, где и время жизни квазичастиц и скорость Ферми велики. Эта комбинация приводит к разнице между электронами и дырками в транспортных свойствах - проводимости и коэффициенте Холла.

Вычисление времени жизни на Ферми-поверхности ранее было сделано в работе [228], где рассеяние на спиновых флуктуациях рассматривалось в приближении обмена флуктуациями (FLuctuation-EXchange, FLEX). Наши результаты показывают подобную импульсную зависимость времён жизни, но значительно большую их анизотропию.

8.1. Модель

Мы используем 5-орбитальную модель из работы [200], которая основана на первопринципной зонной структуре в LDA для типичного представителя пниктидов - LaFeAsO [201]. Одночастичный гамильтониан и гамильтониан взаимодействия, уже упомянутый ранее в разделе 5.3, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H = & H_0 + U \sum_{i,m} n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} + U' \sum_{i,m < n} n_{in} n_{im} + \\
 & + J \sum_{i,m < n} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{in\sigma}^\dagger c_{im\sigma'}^\dagger c_{in\sigma'} c_{im\sigma} + J' \sum_{i,m \neq n} c_{in\uparrow}^\dagger c_{in\downarrow}^\dagger c_{im\downarrow} c_{im\uparrow}, \quad (8.1)
 \end{aligned}$$

где $n_{im} = n_{im\uparrow} + n_{im\downarrow}$, $n_{im\sigma} = c_{im\sigma}^\dagger c_{im\sigma}$, а i , m и σ - это индексы узла, орбитали и спина, соответственно. Обозначения одноузельных внутри- и межорбитального хаббардовского отталкивания (U и U'), хундовского взаимодействия (J) и парного перескока (J') совпадают с обозначениями работы [199]. Далее мы рас-

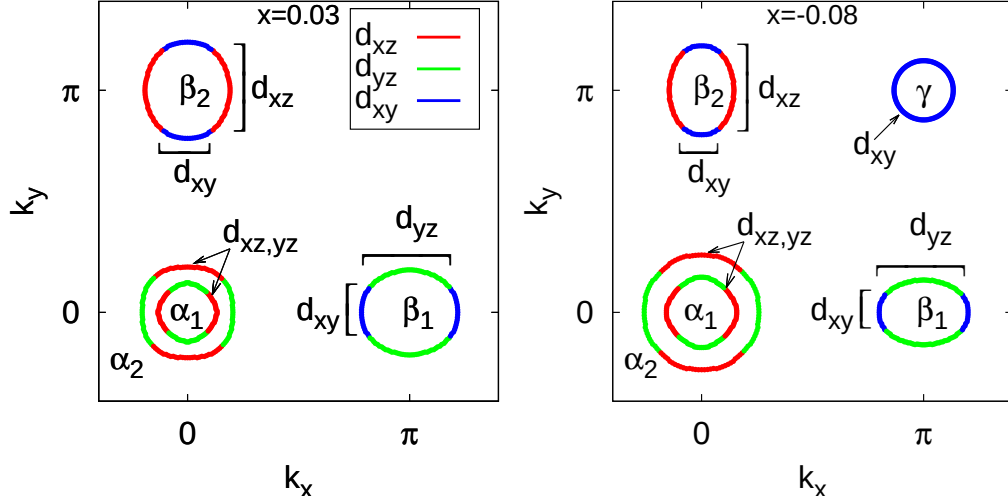


Рис. 8.1. Ферми-поверхность при электронном допировании ($x = 0.03$, слева) и дырочном допировании ($x = -0.08$, справа), вычисленная в 5-орбитальной модели [200]. Орбитали дающие максимальные вклады в Ферми-поверхность, выделены цветом.

смотрим случай, когда выполняется инвариантность относительно вращения спина (Spin-Rotation Invariance, SRI) и соотношения $U' = U - 2J$ и $J' = J$, а также, когда она не выполняется. Кинетическая энергия H_0 включает в себя химпотенциал μ и является моделью сильной связи для пяти d -орбиталей железа (d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$, d_{xy} , $d_{3z^2-r^2}$), детали см. в работе [200]. Орбитали d_{xz} , d_{yz} и d_{xy} доминируют на уровне Ферми, как видно из Рисунка 8.1, где показана Ферми-поверхность, полученная из гамильтониана H_0 в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому железа на элементарную ячейку (1-FeBZ). В недопированной и допированной электронами системе Ферми-поверхность состоит из двух небольших Ферми-карманов α_1 и α_2 вокруг точки $\Gamma = (0, 0)$ и двух небольших электронных карманов β_1 и β_2 вблизи точек $X = (\pi, 0)$ и $Y = (0, \pi)$, соответственно. При допировании дырками вокруг точки (π, π) возникает новый дырочный карман γ , который существенно влияет на сверхпроводящее состояние в спин-флуктуационной теории спаривания [198, 252].

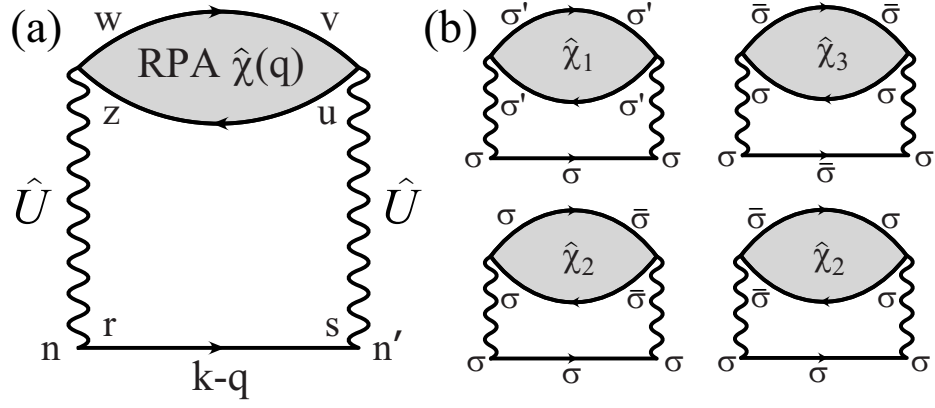


Рис. 8.2. Орбитальная (a) и спиновая (b) структуры диаграммы второго порядка собственно-энергетической части в многоорбитальной системе $\Sigma_{\bar{n}\bar{n}'}(\mathbf{k}, \omega)$. Линии взаимодействия содержат четыре орбитальных индекса: $\hat{U} = U_{nr}^{wz}$. Закрашенная петля означает восприимчивость в RPA $\hat{\chi}(q) = \chi_{wz}^{vu}(\mathbf{q}, \omega_q)$. Входящие и исходящие индексы $\bar{n}$ и $\bar{n}'$ имеют одинаковый спиновый индекс σ . $\hat{\chi}_1$, $\hat{\chi}_2$ и $\hat{\chi}_3$ - это различные каналы восприимчивости, см. уравнение (8.5), а $\bar{\sigma} = -\sigma$.

8.2. Метод

Главный не исчезающий вклад в интенсивность рассеяния квазичастиц $1/\tau$ происходит от мнимой части собственно-энергетической диаграммы второго порядка ($\text{Im}\Sigma$) с поляризационной петлёй (см. Рисунок 8.2). Чтобы учесть рассеяние на спиновых флуктуациях мы заменим “голую” поляризационную петлю на петлю в RPA. Заметим, что диаграммы второго порядка с пересекающимися линиями взаимодействия не учитываются, что видно на Рисунке 8.2. Мы выбрали такое приближение чтобы была согласованность с вычислениями спин-флуктуационной куперовской вершины [200]. Тогда петля представляет собой восприимчивость в RPA, которая в многоорбитальной системе есть $\chi_{wz}^{vu}(\mathbf{q}, \omega_q)$, где w , z , v и u - орбитальные индексы, а $\mathbf{q}$ и ω_q - импульс и частота, соответственно. Такая восприимчивость вычислялась ранее в работе [200] и приводила к сверхпроводимости с параметром порядка A_{1g} -симметрии, в соответствии с различными экспериментами [10, 184] и другими спин-флуктуационными вычислениями [198, 199, 252, 395].

Поскольку нас интересует время жизни квазичастиц, мы будем рассмат-

ривать только $\text{Im}\Sigma$, пренебрегая действительной частью собственной энергии $\text{Re}\Sigma$. Перенормировка зонной структуры действительной частью собственной энергии обсуждалась в работах [396, 397] и не рассматривается здесь. Отметим, что наши вычисления основаны на зонной структуре LDA, которая уже включает важные хартриевские поправки и довольно хорошо согласуется с экспериментами по квантовым осцилляциям [391–393].

Существуют важные следствия многоорбитальной природы исследуемой системы, на которых стоит остановиться. Во-первых, одночастичная функция Грина в отсутствие взаимодействия диагональна в зонном базисе, но не в орбитальном. Орбитальные матричные элементы $a_{\mathbf{k}}^{n,\lambda}$, которые описывают переход от одного базиса к другому, определяются следующим соотношением: $c_{\mathbf{k}n\sigma} = \sum_{\lambda} a_{\mathbf{k}}^{n,\lambda} d_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$, где $d_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$ - это оператор уничтожения частицы с зонным индексом λ , импульсом $\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda}$. Во-вторых, взаимодействия в гамильтониане (8.1) имеют сложную орбитальную структуру; чтобы компактифицировать выражения, мы определим локальные матричные взаимодействия в орбитальном пространстве: $U_{nr}^{wz} c_{iw\sigma_1}^{\dagger} c_{ir\sigma_2}^{\dagger} c_{iz\sigma_3} c_{in\sigma_4}$, что соответствует всем биквадратным членам.

Часть гамильтониана без взаимодействия, H_0 , является комплексной матрицей [200], которая, в общем случае, имеет комплексные собственные вектора $a_{\mathbf{k}}^{n,\lambda}$, хотя собственные значения $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ действительны. Чтобы далее использовать простую форму спектральных представлений функции Грина мы выберем калибровку, в которой гамильтониан является действительным. Для этого необходимо сделать унитарное преобразование $\tilde{H}_0 = \hat{\phi}^{-1} \hat{H}_0 \hat{\phi}$, где $\hat{\phi}$ - это диагональная матрица $\hat{\phi} = \text{diag}(i, i, 1, 1, 1)$. Взаимодействия в гамильтониане (8.1) также должны быть преобразованы с помощью матрицы поворота $\hat{\phi}$. После того, как всё это сделано, собственные вектора и матрицы взаимодействия становятся действительными. Вычисляя теперь диаграммы, изображённые на Рисунке 8.2, мы получаем многозонное обобщение стандартного выражения собственно-энер-

гетической части при нуле температур:

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma_{\bar{n}\bar{n}'}(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \sum_{\bar{w}, \bar{z}, \bar{u}, \bar{v}, \bar{r}, \bar{s}} U_{\bar{n}\bar{r}}^{\bar{w}\bar{z}} U_{\bar{s}\bar{n}'}^{\bar{u}\bar{v}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{r, \lambda} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{s, \lambda} \times \\ &\times \text{Im } \chi_{\bar{w}\bar{z}}^{\bar{v}\bar{u}}(\mathbf{q}, \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\lambda) [\Theta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\lambda) - \Theta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\lambda - \omega)] . \end{aligned} \quad (8.2)$$

Для упрощения мы ввели обозначение $\bar{s} = (s, \sigma_s)$, где s и σ_s - это орбитальный и спиновый индексы, соответственно. Входящие и исходящие спиновые индексы σ_n и $\sigma_{n'}$ равны, поскольку мы рассматриваем парамагнитное состояние.

Импульсная зависимость орбитальных матричных элементов приводит к эффективному зависящему от импульса взаимодействию, возникающему из голых локальных кулоновских взаимодействий:

$$V_{\bar{n}, \lambda}^{\bar{w}\bar{z}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = \sum_{\bar{r}} U_{\bar{n}\bar{r}}^{\bar{w}\bar{z}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{r, \lambda}, \quad (8.3)$$

через которое выражение (8.2) может быть переписано как

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma_{\bar{n}\bar{n}'}(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \sum_{\bar{w}, \bar{z}, \bar{u}, \bar{v}} V_{\bar{n}, \lambda}^{\bar{w}\bar{z}}(\mathbf{q}) V_{\bar{n}', \lambda}^{\bar{v}\bar{u}}(\mathbf{q}) \times \\ &\times \text{Im } \chi_{\bar{w}\bar{z}}^{\bar{v}\bar{u}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \varepsilon_{\mathbf{q}}^\lambda) [\Theta(\varepsilon_{\mathbf{q}}^\lambda) - \Theta(\varepsilon_{\mathbf{q}}^\lambda - \omega)] . \end{aligned} \quad (8.4)$$

Эффективное взаимодействие увеличивает анизотропию рассеяния, как будет показано выше.

Теперь кратко обсудим спиновую структуру диаграмм на Рисунке 8.2, которые важны для вычисления $\text{Im } \Sigma$ с помощью уравнения (8.2). Восприимчивость может быть разделена на спиновый и зарядовый каналы и, далее, на синглетную и триплетную части:

$$\begin{aligned} \chi_{\bar{w}\bar{z}}^{\bar{u}\bar{v}} &= \frac{1}{2}(\chi^c)_{wz}^{uv} \delta_{\sigma_w \sigma_z} \delta_{\sigma_u \sigma_v} + \frac{1}{6}(\chi^s)_{wz}^{uv} \tau_{\sigma_w \sigma_z} \cdot \tau_{\sigma_u \sigma_v} \\ &= \begin{cases} \hat{\chi}_{1,2} \equiv \frac{1}{2}(\chi^c)_{wz}^{uv} \pm \frac{1}{6}(\chi^s)_{wz}^{uv} & \text{triplet} \\ \hat{\chi}_3 \equiv \frac{1}{3}(\chi^s)_{wz}^{uv} & \text{singlet} \end{cases} \end{aligned} \quad (8.5)$$

где χ^c и χ^s - это зарядовая и спиновая части восприимчивости, соответственно, а $\tau_{\sigma\sigma'}$ - матрицы Паули.

Для вычисления собственно-энергетической части взаимодействия могут быть сгруппированы в три канала. Если мы обозначим входящие спины как σ_1 и σ_3 , а исходящие - как σ_2 и σ_4 , то можно выделить следующие каналы: (1) $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4$, (2) $\sigma_1 = \sigma_2 \neq \sigma_3 = \sigma_4$, (3) $\sigma_1 \neq \sigma_2 = \sigma_3 \neq \sigma_4$. Тогда орбитальная часть взаимодействий в каждом канале, $\hat{U}_1$, $\hat{U}_2$ и $\hat{U}_3$, есть:

$$\begin{aligned} (U_1)_{aa}^{aa} &= 0 & (U_2)_{aa}^{aa} &= U & (U_3)_{aa}^{aa} &= -U \\ (U_1)_{aa}^{bb} &= U' - J & (U_2)_{aa}^{bb} &= U' & (U_3)_{aa}^{bb} &= -J \\ (U_1)_{ab}^{ab} &= 0 & (U_2)_{ab}^{ab} &= J' & (U_3)_{ab}^{ab} &= -J' \\ (U_1)_{ab}^{ba} &= J - U' & (U_2)_{ab}^{ba} &= J & (U_3)_{ab}^{ba} &= -U' \end{aligned}$$

где $a \neq b$ - орбитальные индексы.

Чтобы скомбинировать взаимодействия с восприимчивостью, сначала отметим, что из-за спиновой структуры диаграмм каналы взаимодействия (1)-(3) оказываются независимы. Во-вторых, можно показать, что каналы (1) и (2) связаны с $\hat{\chi}_{1,2}$, а канал (3) - с $\hat{\chi}_3$. Следовательно, собственно-энергетическая часть будет содержать следующую матричную структуру:

$$\hat{U} \hat{\chi} \hat{U} \propto \hat{U}_1 \hat{\chi}_1 \hat{U}_1 + \hat{U}_2 \hat{\chi}_1 \hat{U}_2 + \hat{U}_1 \hat{\chi}_2 \hat{U}_2 + \hat{U}_2 \hat{\chi}_2 \hat{U}_1 + \hat{U}_3 \hat{\chi}_3 \hat{U}_3. \quad (8.6)$$

Это выражение по построению убирает сумму по спину и остаются только суммы по орбитальным индексам. Вычисляя его совместно с $\chi_{wz}^{vu}(\mathbf{q}, \omega_q)$ для определённого допирования $x = n_e - 6$, мы используем уравнение (8.2) для получения $\text{Im } \Sigma_{nn'}$. Затем мы переходим к зонному представлению,

$$\text{Im } \Sigma_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{n,n'} a_{\mathbf{k}}^{n,\lambda} \text{Im } \Sigma_{nn'}(\mathbf{k}, \omega) a_{\mathbf{k}}^{n',\lambda'}. \quad (8.7)$$

Для того диапазона энергий, где нет пересечений зон, существует единственная зона λ , соответствующая импульсу $\mathbf{k}$. Собственно-энергетическая часть описывает рассеяние частицы с импульсом $\mathbf{k}$ в состояние с тем-же самым импульсом $\mathbf{k}$ и, следовательно, с тем-же зонным индексом $\lambda' = \lambda$. На малых энергиях вблизи уровня Ферми, которые мы рассматриваем, нет пересечений зон и основной

вклад в интенсивность рассеяния в полной функции Грина в зонном представлении $\hat{G} = (\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma})^{-1}$ приходит от диагональных ($\lambda = \lambda'$) матричных элементов $\text{Im } \hat{\Sigma}$. Обозначим их $\Sigma''_{\lambda}(\mathbf{k}, \omega) \equiv \text{Im } \Sigma_{\lambda\lambda}(\mathbf{k}, \omega)$.

8.3. Собственно-энергетическая часть

Из-за того, что в интересующем нас диапазоне энергий межзонные переходы пренебрежимо малы, полученная интенсивность рассеяния подчиняется соотношению для Ферми-жидкости: $\Sigma''(\mathbf{k}, \omega) \propto \omega^2 + \pi^2 T^2$. Следовательно, некоторая конечная частота или температура нужны для конечных результатов. Здесь и далее будут представлены результаты для $\omega = 20$ мэВ, что эквивалентно $T \approx 74$ К при нулевой частоте. Мы с помощью расчёта удостоверились, что собственно-энергетическая часть изменяется как ω^2 . Представленные ниже результаты качественно не зависят от выбранной частоты, поскольку мы находимся ниже области частот, где большую роль играют межзонные переходы.

Вычисленная интенсивность рассеяния на Ферми-поверхности для различного допирования и нескольких наборов параметров взаимодействия показана на Рисунке 8.3. Здесь U и J выбраны таким образом, чтобы быть близко к неустойчивости типа волны спиновой плотности в спиновой восприимчивости.

Средняя интенсивность рассеяния монотонно увеличивается с допированием. На Рисунке 8.4 показаны как средние времена жизни дырок и электронов на Ферми-поверхности, так и мера анизотропии, которую мы определили как нормированное стандартное отклонение времени жизни $\Delta\tau/\langle\tau\rangle$, где $\tau_{\mathbf{k}} = -1/2\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)$, а $\langle\tau\rangle$ означает среднее по Ферми-поверхности. Мы видим увеличение времени жизни квазичастиц на всех Ферми-поверхностях при допировании электронами. В электронно-допированной области средняя интенсивность рассеяния в основном определяется степенью нестинга. При добавлении электронов в систему дырочные карманы уменьшаются и нестинг между карманами α и β уменьшается. Дырочно-допированная система имеет меньшие

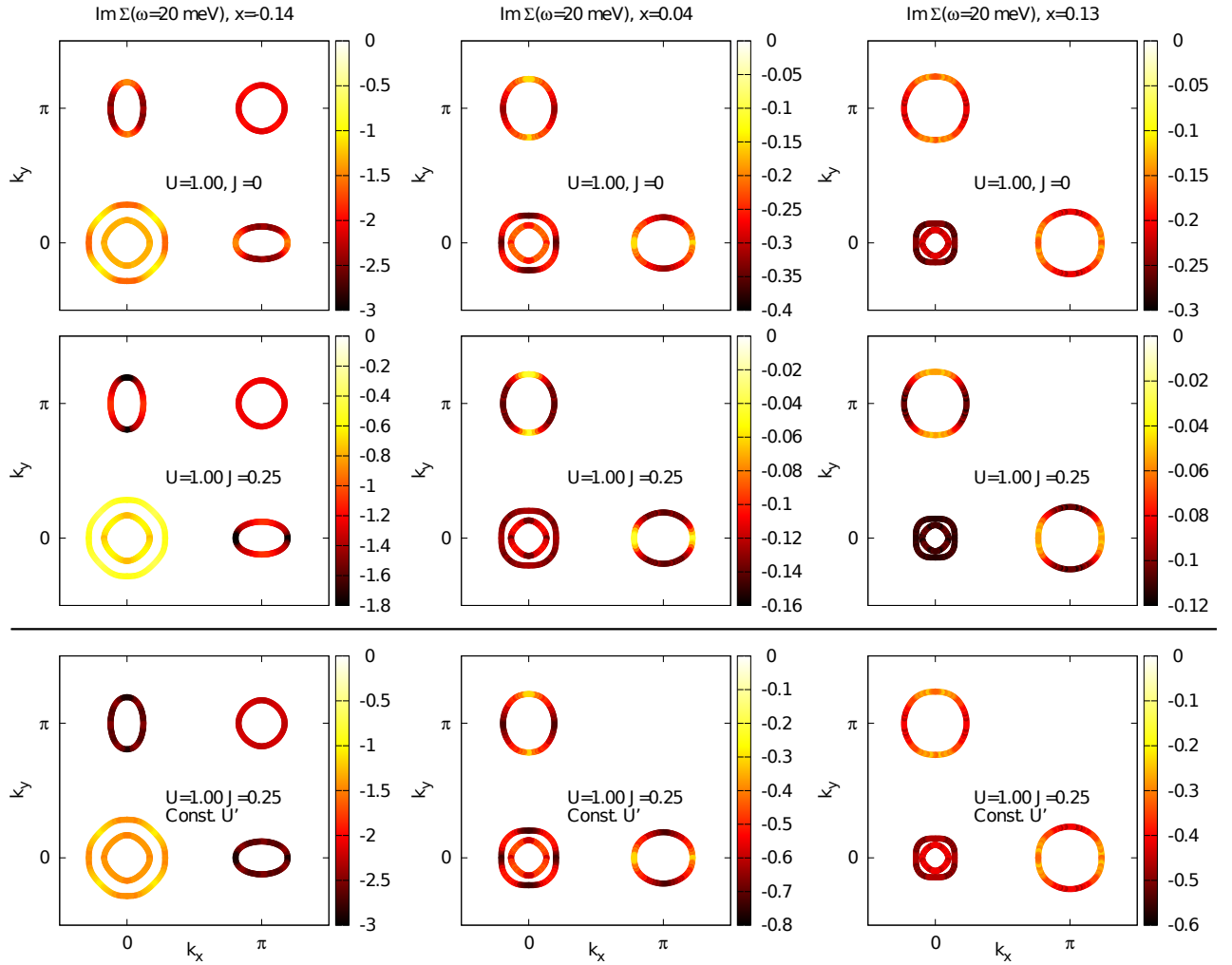


Рис. 8.3. Мнимая часть собственной энергии Σ (в мэВ) при $\omega = 20$ мэВ на Ферми-поверхности для различных уровней допирования ($x = -0.14, 0.04$ и 0.13 слева направо) и трёх наборов параметров взаимодействия (в эВ). Отметим, что масштаб цветовой шкалы различен в каждом Рисунке.

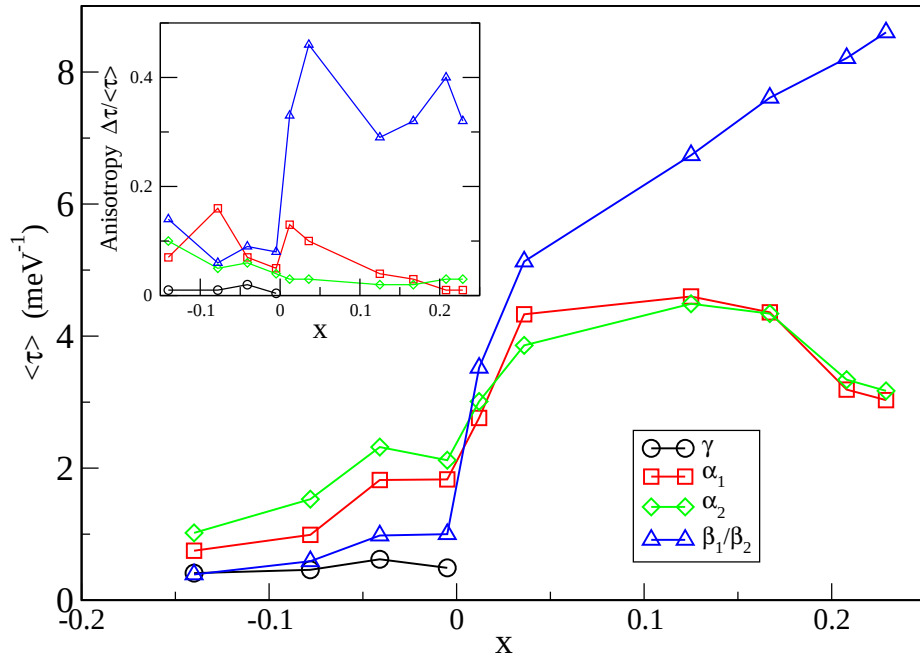


Рис. 8.4. Средняя интенсивность рассеяния для дырок (α_1 , α_2 и γ) и электронов (β_1 и β_2) при $\omega = 20$ мэВ, $U = 1.0$ эВ и $J = 0.25$ эВ. На вставке: анизотропия времени жизни $\Delta\tau/\langle\tau\rangle$, где $\Delta\tau$ и $\langle\tau\rangle$ - это стандартное отклонение и среднее на соответствующей Ферми-поверхности.

времена жизни из-за наличия дырочного кармана γ . Дело в том, что к рассеянию с вектором $(\pi, 0)$ между карманами α и β добавляется новое фазовое пространство и средняя интенсивность рассеяния увеличивается. Следовательно, можно ожидать увеличение сопротивления из-за спиновых флуктуаций при дырочном допировании.

Кроме общего изменения масштаба, из Рисунка 8.4 видно, что соотношение электронного и дырочного рассеяний меняется при переходе через $x = 0$. У электронов большая средняя интенсивность рассеяния при дырочном допировании, и наоборот. Хотя уже здесь видна анизотропия времени жизни между дырочными и электронными карманами, она недостаточна для объяснения экспериментально наблюдаемой анизотропии, как будет обсуждаться ниже.

Далее, мы видим анизотропию рассеяния вдоль Ферми-контуров, см. Рисунок 8.3 и вставку Рисунка 8.4. Рассмотрим сначала недопированную и допированную электронами систему. На кармане β_1 сильная анизотропия возникает между направлениями $\Gamma - X$ и $X - M$. Из Рисунка 8.1 видно, что это как раз со-

ответствует тем местам, где орбитальный вклад в Ферми-поверхность меняется от d_{xy} на d_{yz} . Так, присутствует глубокий минимум в рассеянии на d_{xy} -части кармана β . Причина этого кроется в упомянутой раньше анизотропии эффективного взаимодействия, см. уравнение (8.3). Орбитальные матричные элементы “стремятся” сделать так, чтобы рассеяние было максимальным для внутриорбитальных процессов. Для d_{xy} -электронов фазовое пространство для рассеяния очень мало, по сравнению с другими орбиталями (см. Рисунок 8.1) поскольку интенсивность спиновых флуктуаций $\chi(\mathbf{q})$ имеет пик вблизи $\mathbf{q} = (\pi, 0)$. Следовательно, они ведут себя почти как свободные электроны. Когда система достаточно допированна, чтобы возник дырочный d_{xy} -карман γ , спиновые флуктуации на векторе $(\pi, 0)$ связывают его с другими d_{xy} -состояниями, приводя к увеличению рассеяния. При всех уровнях допирования состояния d_{xz} и d_{yz} на α -карманах сильно рассеиваются на их эквивалентах на β -карманах, и наоборот.

Теперь мы обсудим зависимость от взаимодействий, представленную на Рисунке 8.3. На верхнем ряду панелей показан случай $J = 0$, на среднем - конечное $J = 0.25$. Как только “включается” хундовское взаимодействие J мы видим два эффекта. Во-первых, общая интенсивность рассеяния уменьшается (масштаб цветовой шкалы разный для разных панелей). Это происходит из-за соотношения спин-вращательной инвариантности $U' = U - 2J$, так что U' уменьшается в среднем ряду панелей по сравнению с верхним рядом. Хотя благодаря J и открываются новые каналы рассеяния, этот эффект более чем компенсируется уменьшением межорбитального рассеяния U' . Это подтверждает третий ряд панелей в Рисунке, где J конечно, но в системе не выполняется спин-вращательная инвариантность, поскольку мы положили $U' = U$ как и в первом ряду. Здесь интенсивность рассеяния увеличивается для всех уровней допирования, показывая, что именно уменьшение U' привело к уменьшению Σ'' во втором ряду.

Далее мы рассмотрим влияние J на анизотропию на β -кармане в дырочно-

допированной системе. Когда $J = 0$, минимальное рассеяние соответствует d_{xy} -части Ферми-поверхности для всех уровней допирования. Как только J “включено”, анизотропия инвертируется и, вместо минимальной, на тех же секциях Ферми-поверхности возникает максимальное рассеяние. Инвертирование анизотропии можно объяснить, теми же аргументами, что и раньше. Когда $J = 0$ внутриорбитальные и межорбитальные рассеяния (U и U') одинаковы. Следовательно, имеет место сильное рассеяние с обеих частей d_{xz}/d_{yz} , как и с d_{xy} части кармана β на карман γ , который имеет d_{xy} -характер. Поскольку d_{xz}/d_{yz} -части имеют дополнительный канал рассеивания на α -карманы, здесь возникает большая интенсивность рассеяния. Когда J конечно эффективное межорбитальное рассеяние за счёт U' уменьшается из-за соотношения спин-вращательной инвариантности. Следовательно, рассеяние на d_{xz}/d_{yz} -части уменьшается, в то время как на d_{xy} -части остаётся таким-же. При достаточно большом J анизотропия на карманах β инвертируется. Отметим, однако, что этот аргумент зависит от присутствия γ -кармана. Когда он отсутствует, как в недопированном и электронно-допированном случае, такого инвертирования не происходит и, следовательно, d_{xy} -состояния имеют самое большое время жизни в исследованных конфигурациях.

8.4. Сравнение с экспериментальными данными

8.4.1. Проводимость

Далее мы рассмотрим влияние вычисленной интенсивности рассеяния на электрическую проводимость. Полная проводимость есть сумма зонных проводимостей $\sigma(\omega) = \sum_{\lambda} \sigma_{x\lambda}(\omega)$, где

$$\sigma_{x\lambda}(\omega) = \frac{e^2}{\pi h} \int_{\mathbf{k} \in \mathbf{k}_{F\lambda}} d\mathbf{k} N_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}_x}^2 \tau_{\mathbf{k}}(\omega). \quad (8.8)$$

Здесь $\tau_{\mathbf{k}} = -1/2\Sigma''_{\lambda}(\mathbf{k}, \omega)$, $\mathbf{k}_{F\lambda}$ - это импульс Ферми зоны λ , интегрируем мы по $\mathbf{k}_{\parallel}$ - компоненте импульса вдоль Ферми-поверхности, $v_{\mathbf{k}}$ - это скорость, а $N_{\mathbf{k}_{F\lambda}} = 1/|v_{\mathbf{k}_{F\lambda}}|$ - это зависящая от импульса и от индекса зоны плотность состояний на уровне Ферми. Отметим, что мы сделали приближение - заменили транспортное время жизни одноэлектронным временем жизни $\tau_{\mathbf{k}}$, таким образом пренебрегая поправками от рассеяния вперёд и разницей между нормальными процессами и процессами переброса. Такое приближение даёт возможность только качественно исследовать влияние рассеяния на спиновых флуктуациях на проводимость.

Чтобы проанализировать зависимость проводимости от допирования, мы зафиксируем все параметры взаимодействия таковыми, чтобы в исследуемой области допирования не было неустойчивости в RPA. Мы вычислим удельную проводимость по постоянному току при конечных температурах заменяя $1/\tau_{\mathbf{k}}(\omega)$ в уравнении (8.8) на $1/\tau_{\mathbf{k}}(\pi T)$. Важно понять, какая часть зависимости транспортных свойств от допирования происходит от чисто кинематических эффектов, таких, как плотность носителей и Ферми-скорости, которые меняются с допированием, и происходящих от взаимодействий. Чтобы это проиллюстрировать, в левой части Рисунка 8.5 мы показываем полную проводимость электронных и дырочных Ферми-карманов с постоянным временем релаксации. Проводимости здесь эволюционируют более или менее как и ожидается при электронном допировании, когда дырочные карманы сжимаются, а электронные - увеличиваются. С другой стороны, важно, что “идеально скомпенсированная” ситуация равных кинетических проводимостей электронов и дырок не возникает в недопированном случае; она возникает при дырочном допировании с $x \simeq -0.05$. На Рисунке отмечены области допирования, где в системе 122 реализуется дальний магнитный порядок, который мы не рассматриваем в данной теории и где, следовательно, наши результаты неприменимы.

В отличие от левой части, в правой части Рисунка 8.5 показаны проводимости на дырочных и электронных Ферми-поверхностях как функции допиро-

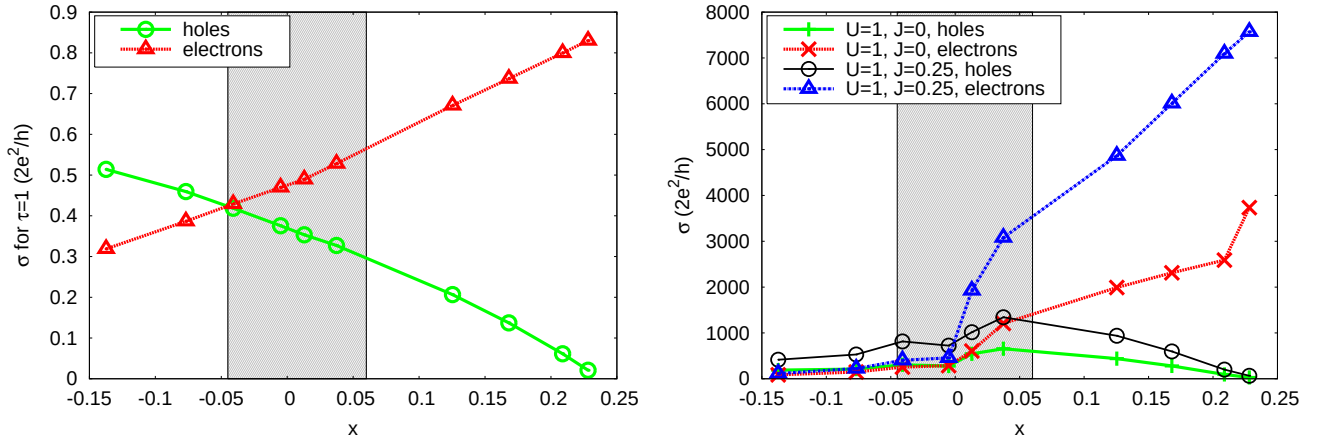


Рис. 8.5. Слева: проводимость дырок и электронов как функция допирования $x = n_e - 6$ при постоянной скорости релаксации $1/\tau = 1$ эВ. Справа: проводимость дырок и электронов как функция допирования x при эффективной температуре $T = 74$ К для двух наборов параметров (в эВ): $U = 1.0, J = 0$ и $U = 1.0, J = 0.25$. Закрашенная часть отмечает область, где экспериментально наблюдается антиферромагнитный порядок в системах типа 122.

вания с вычисленным временем жизни τ_k . Сразу видно, что проводимость электронов растёт достаточно быстро при электронном допировании. В отличие от чисто кинетического случая на левой панели, проводимость дырок изменяется очень слабо по сравнению с проводимостью электронов. Именно эта асимметрия, вызванная комбинацией кинетических эффектов и вычисленных здесь эффектов конечного времени жизни, приводит к доминированию проводимости электронами. Это, в частности, оправдывает интерпретацию транспортных эксперименты на допированном кобальтом Ва-122 в однозонной модели электронов [382, 383]. Что существенно влияет на зависимость проводимости от допирования, так это тот факт, что максимум Ферми-скорости точно совпадает с той частью Ферми-поверхности, где время жизни максимально, а именно, с d_{xy} -частью β -карманов. Мы также вычислили проводимость и коэффициент Холла для случая нарушения спин-вращательной инвариантности ($U = 1.0, J = 0.25, U' = U$, не приведено на Рисунке). Результаты качественно похожи на случай $U = 1.0, J = 0$.

Вычисленная проводимость, показанная на Рисунке 8.5, была получена для достаточно небольших величин параметров взаимодействия; таких, чтобы

избежать нестабильность в RPA. При таких параметрах абсолютная величина σ значительно больше экспериментальной для образцов 1111 или 122. Очевидно, увеличение общей величины взаимодействий увеличит интенсивность рассеяния и уменьшит проводимость. Однако, чтобы получить наблюдаемые значения проводимости, приводит к экстремально близкому приближению к нестабильности RPA. Мы не пытались подогнать параметры взаимодействия, а хотели просто продемонстрировать возможное качественное поведение. Скорее всего в более полной теории будет необходима перенормировка восприимчивости подобно получаемой в квантовом методе Монте-Карло для модели Хаббарда, откуда известно, что форма динамического магнитного отклика в RPA качественно верна, но “ U ”, приводящее к нестабильности через знаменатель в RPA, должно быть независимым от множителя U^2 в эффективном взаимодействии [398]. Подобный эффект должен возникать и в многоорбитальной модели Хаббарда, так что общий масштаб интенсивности рассеяния и близость к нестабильности не стоит воспринимать слишком серьёзно.

8.4.2. Коэффициент Холла

Любое отличие интенсивности рассеяния между электронами и дырками должно проявиться в коэффициенте Холла:

$$R_H = -\sigma_H(\omega)/\sigma^2(\omega), \quad (8.9)$$

где $\sigma_H(\omega)$ - это проводимость Холла [399, 400]. В многозонной системе $\sigma_H(\omega) = \sum_{\lambda} \sigma_{H\lambda}(\omega)$ и выражение для холловской проводимости принимает следующий вид:

$$\sigma_{H\lambda}(\omega) = \frac{e^3}{\pi\hbar} \int_{\mathbf{k} \in \mathbf{k}_{F\lambda}} d\mathbf{k} N_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot [\text{Tr}(\mathbf{M}_{\mathbf{k}}^{-1}) - \mathbf{M}_{\mathbf{k}}^{-1}] \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \tau_{\mathbf{k}}^2(\omega). \quad (8.10)$$

Здесь $(\mathbf{M}_{\mathbf{k}}^{-1})_{\alpha\beta} = \hbar^{-1} \partial v_{k_{\alpha}} / \partial k_{\beta}$ - обратный тензор масс.

На Рисунке 8.6 показан вычисленный коэффициент R_H в зависимости от допирования при $\omega = 20$ мэВ (соответствует эффективной температуре 74 K).

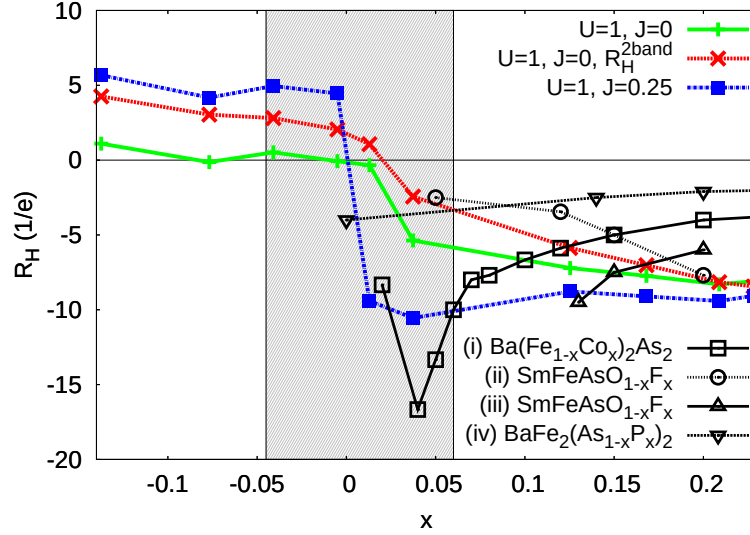


Рис. 8.6. Зависимость коэффициента Холла от допирования. Теоретические расчёты были сделаны при следующих параметрах (в эВ): $U = 1.0$, $J = 0$ и $U = 1.0$, $J = 0.25$. Для первого набора мы также приводим результат многозонного приближения для R_H из уравнения (8.11). Экспериментальные точки взяты из: (i) работы [383] для $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ при 100 К, (ii) работы [386] и (iii) работы [385] для $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ при 125 К, (iv) работы [384] для $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ при 150 К. Закрашенная часть обозначает область экспериментального дальнего магнитного порядка.

Качественно можно понять зависимость R_H от допирования анализируя приближённое уравнение для зонной холловской проводимости,

$$\sigma_{H\lambda}(\omega) \approx R_\lambda \sigma_\lambda^2(\omega), \quad (8.11)$$

где $1/R_\lambda = \pm en_\lambda$ - холловский коэффициент для электронной (дырочной) зоны λ , а n_λ - заполнение этой зоны. В простом случае двух зон (дырки и электроны) мы получаем:

$$R_H^{2band} = \frac{1}{e} \frac{\sigma_h^2/n_h - \sigma_e^2/n_e}{(\sigma_h + \sigma_e)^2}. \quad (8.12)$$

Поскольку проводимость дырочной зоны $\sigma_h \propto n_h \tau_h / m_h$ и электронной зоны $\sigma_e \propto n_e \tau_e / m_e$, где $\tau_{h,e}$ и $m_{h,e}$ - это соответствующие времена жизни и зонные массы, то R_H^{2band} является убывающей функцией электронного допирования, если $\tau_e \sim \tau_h$ и $m_e \sim m_h$. Именно это мы и видим на Рисунке 8.6 при $U = 1.0$ эВ и $J = 0$ эВ. С другой стороны, экспериментальные данные для соединений типа 1111 и 122 указывают на то, что R_H^{expt} является возрастающей функцией

электронного допирования (т.е. величина $|R_H^{expt}|$ уменьшается при увеличении x) при удалении от магнетоупорядоченного состояния. В соответствии с простым анализом уравнения (8.12) это может быть из-за (i) $\tau_e \gg \tau_h$ и/или (ii) $m_h \gg m_e$. Отметим, что использование уравнения (8.10) приводит к другому результату, чем уравнение (8.11) из-за анизотропии масс на Ферми-поверхностях, что вносит вклад в фактор (ii). Фактор (i) начинает играть роль, когда мы рассматриваем конечное J . При $U = 1.0$ эВ и $J = 0.25$ эВ, $R_H(x)$ становится немного возрастающей функцией x при $x > 0$ (Рисунок 8.6). Однако, это не находится в количественном согласии с экспериментальными данными. Чтобы увидеть, может ли из текущего подхода получиться правильный наклон $R_H(x)$, мы искусственно в два раза увеличили интенсивность рассеяния на всех орбиталях, кроме d_{xy} , так, что анизотропия между дырочными и электронными карманами стала более выражена. полученная таким образом зависимость холловского коэффициента от допирования показана на Рисунке 8.7. Теперь наклон $R_H(x)$ находится в хорошем согласии с экспериментальными данными.

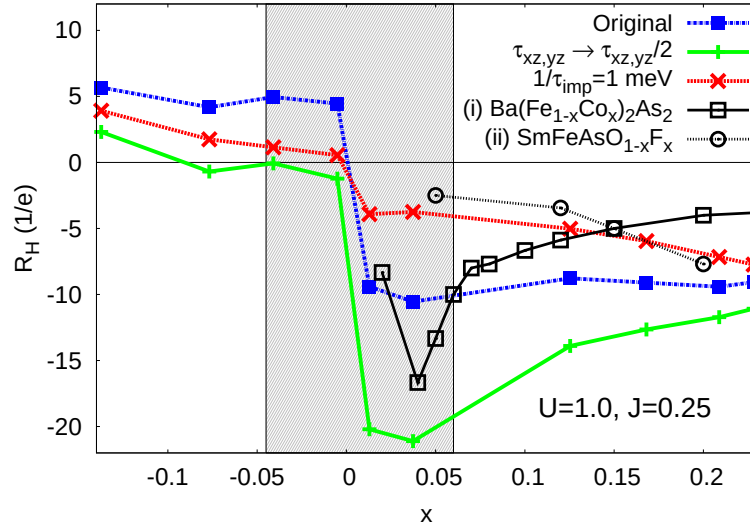


Рис. 8.7. Зависимость R_H от допирования в трёх случаях: (1) вычисленное в соответствии с уравнением 8.6, (2) с искусственно увеличенной интенсивностью рассеяния для всех орбиталей, кроме d_{xy} , т.е. $\tau_{xz,yz} \rightarrow \tau_{xz,yz}/2$, (3) с добавленным постоянным примесным рассеянием $1/\tau_{imp} = 1$ мэВ. Для всех случаев параметры были $U = 1.0$ эВ, $J = 0.25$ эВ. Экспериментальные точки из Рисунка 8.6.

Тот факт, что мы недооценили разницу рассеяния на электронных и дырочных карманах в два раза не очень обескураживающий. Существует несколько факторов, не учитываемых в нашей теории. В интересах исследования зависимости от допирования мы взяли параметры взаимодействия достаточно небольшими, чтобы избежать магнитной неустойчивости, которая возникает для достаточно малых величин взаимодействия на дырочно-допированной стороне. Более того, мы пренебрегли рассеянием на примесях. В многозонных моделях примесей [401–403] соотношение внутри- и межзонного рассеяний было взято как параметр и асимметрия интенсивности рассеяния электронов и дырок невелика. Можно ожидать, что модель “обычной примеси”, где примесь вводится как локальный кулоновский потенциал для электронов на всех d -орбиталях, может привести к анизотропии рассеяния в $\mathbf{k}$ -пространстве из-за матричных элементов $a_{\mathbf{k}}^{n,\lambda}$, точно так же, как и в случае неупругого рассеяния, рассмотренного здесь. Исследуя простые модели, подобные изложенным в работе [404], мы так же заключили, что как средняя асимметрия упругого рассеяния, так и анизотропия интенсивности рассеяния на любой Ферми-поверхности малы. Чтобы увидеть влияние изотропных примесей на коэффициент Холла, мы ввели константу примесного рассеяния с величиной, сопоставимой с вычисленной интенсивностью рассеяния $1/\tau_{\mathbf{k}}$ на спиновых флуктуациях. Поскольку одновременные процессы рассеяния аддитивны в собственно-энергетической части, $\Sigma_{\lambda\lambda}^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma^{\text{imp}} + \Sigma_{\lambda\lambda}(\mathbf{k}, \omega)$, то обратное время жизни будет $1/\tau_{\mathbf{k}}^{\text{total}} = 1/\tau_{\text{imp}} + 1/\tau_{\mathbf{k}}$. Подставляя $\tau_{\mathbf{k}}^{\text{total}}$ в уравнения (8.8) и (8.10), мы получаем $R_H(x)$, изображённый на Рисунке 8.7 для $1/\tau_{\text{imp}} = 0.1$ мЭВ. Очевидно, увеличение беспорядка приводит к монотонному уменьшению холловского коэффициента с допированием подобно уравнению 8.12 с $\tau_e \simeq \tau_h$. Следовательно, более “грязные” образцы будут демонстрировать уменьшение $R_H(x)$ с увеличением допирования электронами.

Температурная зависимость R_H заслуживает отдельного обсуждения. Из феноменологических расчётов собственно-энергетической части в двухзонной

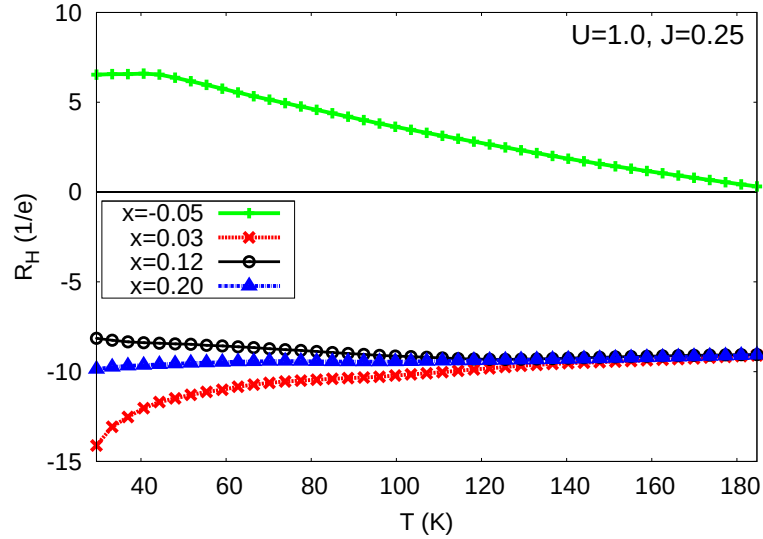


Рис. 8.8. Вычисленная зависимость коэффициента Холла от эффективной температуры для различных x при $U = 1.0$ эВ и $J = 0.25$ эВ.

модели пниктидов был сделан вывод, что для объяснения экспериментально наблюдаемого $R_H(T)$ необходимо предполагать не-Ферми-жидкостное поведение спиновой восприимчивости [405]. В частности, при большом электронном допировании $R_H(T)$ практически постоянна, но при малых x он становится возрастающей функцией температуры [383, 406]. Мы утверждаем, что наблюдаемая температурная зависимость может быть качественно воспроизведена в нашем Ферми-жидкостном подходе. Полученная из наших расчётов величина $R_H(T)$ показана на Рисунке 8.8. Отметим, что зона, которая формирует Ферми-карман γ , при $x < 0$ находится немного ниже уровня Ферми при малых положительных x . Следовательно, на конечных энергиях или температурах рассеяние с участием этой зоны вносит вклад в собственную энергию и, соответственно, в транспортные свойства. Это и есть основная причина, почему $R_H(T)$ при $x = 0.03$ является быстро меняющейся функцией T на Рисунке 8.8.

8.5. Заключение

Мы показали, что рассеяние квазичастиц на спиновых флуктуациях в многоорбитальной модели с локальными взаимодействиями может быть существенно

анизотропно. Два фактора, которые к этому приводят, это - импульсная зависимость динамической восприимчивости и орбитальные матричные элементы из-за которых взаимодействие становится зависящим от импульса. В частном случае нашей модели для LaFeAsO , d_{xy} -часть Ферми-поверхности электронов показывает меньшее рассеяние из-за малого фазового пространства рассеяния в недопированных и электронно-допированных системах, поскольку там нет доступных для рассеяния d_{xy} -состояний на дырочных карманах. Эта анизотропия на электронных Ферми-карманах имеет важные следствия для транспортных свойств по крайней мере некоторых пниктидов. Мы отмечаем, что существует несколько факторов, которые вместе дают экспериментально наблюдаемую картину различия между электронами и дырками. Первый фактор - это более долгое время жизни d_{xy} -состояний на электронной Ферми-поверхности. Другой фактор - это тот факт, что максимум Ферми-скорости приходится как раз туда, где имеется максимум времени жизни электронов.

В наши расчётах немного недооценивается асимметрия между d_{xy} и d_{xz}/d_{yz} , обнаруженная в результате анализа зависимости от допирования коэффициента Холла. Мы обсудили и критически проанализировали вклады, которые могут дать дополнительную анизотропию.

Глава 9

Влияние примесей на сверхпроводящие свойства соединений железа

Поскольку в соединениях железа присутствует беспорядок в разной форме, а сверхпроводимость возникает в большинстве случаев при допировании, необходимо понять роль примесей. Результаты экспериментов по введению примесей [407–409] и облучению протонами [410] создают впечатление, что T_c в основном подавляется более слабо, чем ожидается из теории Абрикосова-Горькова [411]. Стоит отметить, что интерпретировать скорость подавления T_c нужно с определённой долей скепсиса по следующим причинам. Во-первых, в некоторых случаях не вся номинальная концентрация примесей входит в кристалл. Во-вторых, “медленное” и “быстрое” подавление T_c нельзя определять по зависимости T_c от концентрации примесей, а только по зависимости от интенсивности рассеяния, которую можно напрямую сравнивать с теоретической интенсивностью рассеяния, а из эксперимента, в общем случае, очень сложно определить. Альтернативой является построение зависимости T_c от изменения остаточного сопротивления $\Delta\rho$, но (1) это возможно только если кривая $\rho(T)$ смещается равномерно с увеличением беспорядка и (2) если проводится сравнение с теорией, включающей корректное рассмотрение транспортного, а не квазичастичного времени жизни. В конце концов, влияние химического добавления примесей в соединения железа точно не описывается одним только введением потенциального рассеяния: примесь может допировать систему или вызывать другие изменения электронной структуры, которые влияют на куперовское взаимодействие.

Из-за такой неопределённости даже на уровне базовой однопримесной модели, а также учитывая многозонный характер соединений железа, не приходится рассчитывать на то, что эксперименты по систематическому изучению

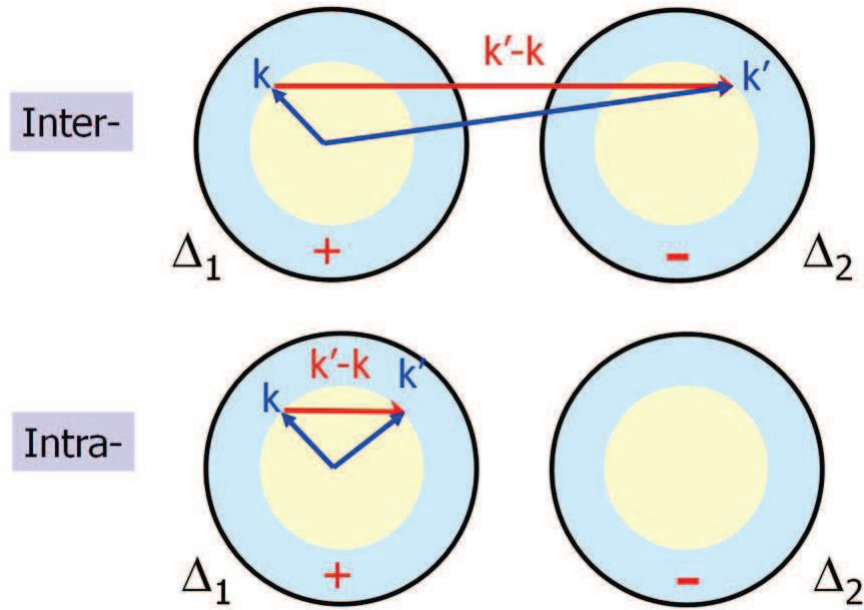


Рис. 9.1. Схематическое изображение двух Ферми-поверхностей с указанными на них знаками сверхпроводящего параметра порядка. Вверху - межзонное рассеяние на примесях перемешивает Δ_1 и Δ_2 . Внизу - внутризонное рассеяние перемешивает состояния на каждой из Ферми-поверхностей.

беспорядка могут играть решающую роль в определении симметрии параметра порядка как это было, например, в купратах. Тем не менее, полезную информацию можно получить из качественных эффектов, возникающих даже на уровне простых многозонных моделей беспорядка. Далее мы будем рассматривать простую двухзонную модель, в которой, в зависимости от параметров, реализуются $s_{\pm}$ или s_{++} состояния, и исследовать влияние немагнитных и магнитных примесей.

В обычном двухзонном сверхпроводнике с двумя изотропными щелями немагнитные примеси могут приводить к рассеянию квазичастиц между двумя зонами или внутри одной из зон. Межзонные процессы, показанные на Рисунке 9.1, приведут к усреднению величин параметра порядка и, следовательно, к изначальному подавлению T_c , после которого T_c выйдет на насыщение и останется постоянным до тех пор, пока не станут важны эффекты локализации. Межзонное рассеяние в двухзонной системе, где параметр порядка меняет знак,

приводит к куда более существенным последствиям [401, 412–414]. Там немагнитные примеси с межзонной компонентой рассеивающего потенциала разрушают сверхпроводимость даже при одинаковых величинах щелей и плотностей состояний в обеих зонах (симметричная модель). Причина очень проста - межзонное рассеяние приведёт к усреднению величин параметра порядка на дух разных зонах, а, поскольку в $s_{\pm}$ -состоянии Δ_1 и Δ_2 имеют разные знаки, их среднее быстро стремится к нулю. В такой ситуации T_c будет уходить в ноль при конечной критической концентрации примесей как и в теории рассеяния на магнитных примесях в однозонной модели системы s -типа [411]. В контексте соединений железа эта характерная особенность была отмечена достаточно быстро различными группами исследователей [26, 191, 221, 402, 415].

Что касается влияния немагнитного и магнитного беспорядка на многозонный анизотропный сверхпроводник, простое качественное правило гласит: когда немагнитная примесь приводит к рассеянию пары из одной точки Ферми-поверхности на другую точку, так, что параметр порядка не меняет знак, то рассеяние не разрушает пару; если параметр порядка меняет знак, то пара разрушается. Для магнитной примеси верно обратное утверждение: рассеяние с изменением знака параметр порядка не разрушает пару, в противном случае - разрушает. Однако, количественные расчёты довольно сложны и в некоторых случаях приводят к неожиданным ответам.

9.1. Вызванный немагнитными примесями переход из $s_{\pm}$ - в s_{++} -состояние в двухзонном сверхпроводнике

Ранее было показано, что в $s_{\pm}$ -состоянии любая немагнитная примесь, которая приводит *только* к рассеянию между зонами с различными знаками параметра порядка, подавляет критическую температуру T_c так же, как и магнитная примесь в однозонном сверхпроводнике типа БКШ [401, 416]. Следовательно, T_c должна подчиняться формуле Абрикосова-Горькова $\ln T_{c0}/T_c =$

$\Psi(1/2 + \Gamma/2\pi T_c) - \Psi(1/2)$, где $\Psi(x)$ - дигамма функция, а T_{c0} - критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние в отсутствие примесей [411]. В теории Абрикосова-Горькова критическое значение интенсивности рассеяния Γ , определяемое уравнением $T_c(\Gamma^{\text{crit}}) = 0$, равно $\Gamma^{\text{crit}}/T_{c0} = \pi/2\gamma \approx 1.12$. Однако, в различных экспериментах на соединениях железа, например, при введении цинка или при облучении протонами, найдено [417–420], что T_c подавляется значительно слабее, чем ожидается из теории Абрикосова-Горькова. Поэтому возникло предположение, что $s_{\pm}$ -состояние вообще не реализуется в этих системах и имеет место s_{++} -симметрия параметра порядка [227, 415].

Однако, проблема беспорядка в соединениях железа значительно сложнее, чем получается из простых аргументов. Даже предполагая изотропные щели на двух различных Ферми-поверхностях и наличие немагнитного рассеяния, можно получить куда более медленное подавление сверхпроводимости в предположении, что рассеяние в основном внутризонное, а не межзонное. В пределе только внутризонного рассеяния имеет место теорема Андерсона, система нечувствительна к знаку параметра порядка, и не возникает подавление T_c . Скорость подавления T_c , таким образом, зависит от отношения внутри- и межзонных интенсивностей рассеяния, а получение выводов о сверхпроводящем состоянии на основе систематического изучения влияния беспорядка значительно сложнее, чем в однозонном случае. Один из подходов к проблеме заключается в попытках определить параметры внутри- и межзонного рассеяний из микроскопических теорий для различных материалов и типов примесей [191, 421, 422], но вопрос о количественной правильности применения зонной теории к таким вопросам остаётся открытым.

Здесь мы рассмотрим проблему немагнитного беспорядка в двухзонных сверхпроводниках с $s_{\pm}$ -типом симметрии параметра порядка в рамках самосогласованного приближения T -матрицы [423]. T_c оказывается более устойчиво по отношению к немагнитным примесям, чем ожидается из тривиального обобщения теории Абрикосова-Горькова. Конкретная форма подавления T_c за-

висит от соотношения между внутри- и межзонными константами связи. В зависимости от знака усреднённой константы связи $\langle \lambda \rangle$ существует два типа $s_{\pm}$ -сверхпроводника. Первый относится к типу, широко обсуждаемому в литературе, для которого T_c подавляется при увеличении беспорядка и исчезает при критическом значении интенсивности рассеяния. Но существует также и второй тип $s_{\pm}$ -состояния, для которого T_c остаётся конечной при увеличении беспорядка, а знаки параметра порядка для двух зон становятся одинаковыми, т.е. происходит переход из состояния $s_{\pm}$ в s_{++} .

Модель

Мы воспользуемся уравнениями Элиашберга [423] для двухзонного сверхпроводника с зонами, обозначенными a и b . Введём квазиклассические матричные функции Грина 4×4 в пространствах Намбу и зонном:

$$\hat{\mathbf{g}}(\omega_n) = \begin{pmatrix} g_{0a} & 0 \\ 0 & g_{0b} \end{pmatrix} \otimes \hat{\tau}_0 + \begin{pmatrix} g_{1a} & 0 \\ 0 & g_{1b} \end{pmatrix} \otimes \hat{\tau}_2, \quad (9.1)$$

где τ_i - это матрицы Паули, относящиеся к пространству Намбу, $g_{0\alpha}$ и $g_{1\alpha}$ - это нормальные и аномальные ξ -интегрированные функции Грина в представлении Намбу:

$$g_{0\alpha} = -\frac{i\pi N_{\alpha} \tilde{\omega}_{\alpha n}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{\alpha n}^2 + \tilde{\phi}_{\alpha n}^2}}, \quad g_{1\alpha} = -\frac{\pi N_{\alpha} \tilde{\phi}_{\alpha n}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{\alpha n}^2 + \tilde{\phi}_{\alpha n}^2}}. \quad (9.2)$$

Здесь зонный индекс α принимает значения a и b , $N_{a,b}$ - плотности состояний в каждой зоне (a, b) на уровне Ферми, а $\omega_n = \pi T(2n + 1)$ - это мадубаровская частота. Перенормированные за счёт собственно-энергетической части $\hat{\Sigma}(i\omega_n)$ частота $\tilde{\omega}_{\alpha n}$ и параметр порядка $\tilde{\phi}_{\alpha n}$ определяются следующими выражениями:

$$\tilde{\omega}_{\alpha n} = \omega_n + i\Sigma_{0\alpha}(i\omega_n) + i\Sigma_{0\alpha}^{\text{imp}}(i\omega_n), \quad (9.3)$$

$$\tilde{\phi}_{\alpha n} = \Sigma_{1\alpha}(i\omega_n) + \Sigma_{1\alpha}^{\text{imp}}(i\omega_n). \quad (9.4)$$

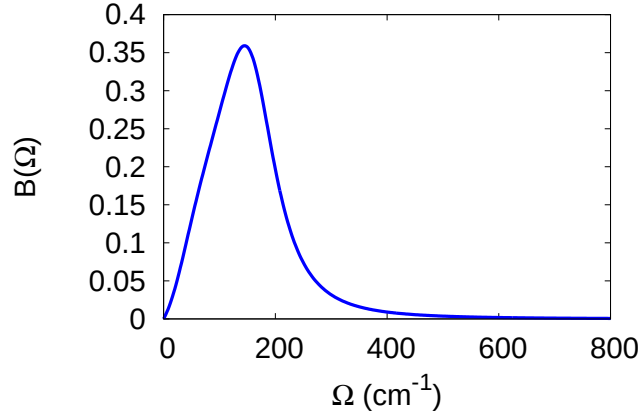


Рис. 9.2. Спектральная функция $B(\Omega)$, отражающая частотную зависимость спиновых флуктуаций [26, 425, 426].

Собственно-энергетическая часть, обусловленная спиновыми-флуктуациями, есть:

$$\Sigma_{0\alpha}(i\omega_n) = T \sum_{\omega'_{n'}, \beta} |\lambda_{\alpha\beta}(n - n')| \frac{g_{0\beta}}{N_\beta}, \quad (9.5)$$

$$\Sigma_{1\alpha}(i\omega_n) = -T \sum_{\omega'_{n'}, \beta} \lambda_{\alpha\beta}(n - n') \frac{g_{1\beta}}{N_\beta}. \quad (9.6)$$

Функция связи $\lambda_{\alpha\beta}(n - n') = 2\lambda_{\alpha\beta} \int_0^\infty d\Omega \Omega B(\Omega) / [(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega^2]$ выражается через спектральную функцию $B(\Omega)$ (см. Рисунок 9.2) и константы связи $\lambda_{\alpha\beta}$. Приблизённо спектральную функцию можно представить как $B(\Omega) = \pi\Omega_{sf}/(\Omega_{sf}^2 + \Omega^2)$ с нормировкой $2 \int_0^\infty d\Omega B(\Omega)/\Omega = 1$ и параметром $\Omega_{sf} = 25$ мэВ [26]. Матричные элементы $\lambda_{\alpha\beta}$ могут быть положительными (притяжение) или отрицательными (отталкивание) из-за вкладов от спиновых флуктуаций и электрон-фононного взаимодействия [26, 424], а также могут быть перенормированы усиленным нестингом кулоновским взаимодействием [221].

Мы используем приближение T -матрицы для вычисления собственно-энергетической части, обусловленной рассеянием на примесях $\hat{\Sigma}^{\text{imp}}$:

$$\hat{\Sigma}^{\text{imp}}(i\omega_n) = n_{\text{imp}} \hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}} \hat{\mathbf{g}}(\omega_n) \hat{\Sigma}^{\text{imp}}(i\omega_n), \quad (9.7)$$

где $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} \otimes \hat{\tau}_3$ - примесный потенциал, а n_{imp} - это концентрация примесей. Для простоты мы положим внутризонные и межзонные части потенциала равными u

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{aa}^{\text{imp}} &= V_{aa} + V_{ab} \Sigma_{ba}^{\text{imp}} + V_{aa} \Sigma_{aa}^{\text{imp}} \\
 \Sigma_{ba}^{\text{imp}} &= V_{ba} + V_{bb} \Sigma_{ba}^{\text{imp}} + V_{ba} \Sigma_{aa}^{\text{imp}}
 \end{aligned}$$

Рис. 9.3. Система уравнений на внутри- и межзонные собственно-энергетические части $\hat{\Sigma}^{\text{imp}}$ в самосогласованном приближении T -матрицы.

и u , соответственно, так, что $(\mathbf{U})_{\alpha\beta} \equiv V_{\alpha\beta} = (v - u)\delta_{\alpha\beta} + u$. В графическом виде уравнение на собственно-энергетическую часть представлено на Рисунке 9.3. Это завершает задание уравнений, определяющих квазиклассические функции Грина.

Отметим, что здесь мы пренебрегли возможной анизотропией каждого параметра порядка $\tilde{\phi}_{a(b)n}$. Обусловленные анизотропией эффекты в $s_{\pm}$ -системе рассматривались, например, в работе [427].

Критическая температура

T_c мы находим из решения линеаризованных уравнений Элиашберга на факторы перенормировки $Z_{\alpha n} = \tilde{\omega}_{\alpha n}/\omega_n$ и функции щели $\Delta_{\alpha n} = \tilde{\phi}_{\alpha n}/Z_{\alpha n}$ [423]:

$$Z_{\alpha n} = 1 + \sum_{\beta} \frac{\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}}{|\omega_n|} + \pi T_c \sum_{\omega_{n'}, \beta} |\lambda_{\alpha\beta}(n - n')| \frac{\text{sgn}(\omega_{n'})}{\omega_n}, \quad (9.8)$$

$$Z_{\alpha n} \Delta_{\alpha n} = \sum_{\beta} \frac{\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta} \Delta_{\beta n}}{|\omega_n|} + \pi T_c \sum_{\omega_{n'}, \beta} \lambda_{\alpha\beta}(n - n') \frac{\Delta_{\beta n'}}{|\omega_{n'}|}, \quad (9.9)$$

где $\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}$ - это интенсивность рассеяния на примесях.

Если подставить уравнение (9.8) в (9.9) и получить систему уравнений на $\Delta_{\alpha n}$, то, как можно показать, внутризонные члены $\propto \tilde{\Gamma}_{aa}$ и $\tilde{\Gamma}_{bb}$ сократятся в согласии с теоремой Андерсона. Из уравнения (9.7) можно найти величину

$\tilde{\Gamma}_{ab(ba)}$, которая равна [13]

$$\tilde{\Gamma}_{ab(ba)} = \Gamma_{a(b)} \frac{(1 - \tilde{\sigma})}{\tilde{\sigma}(1 - \tilde{\sigma})\eta \frac{(N_a + N_b)^2}{N_a N_b} + (\tilde{\sigma}\eta - 1)^2}, \quad (9.10)$$

где введены обобщённое сечение рассеяния

$$\tilde{\sigma} = \frac{\pi^2 N_a N_b u^2}{1 + \pi^2 N_a N_b u^2}, \quad (9.11)$$

и интенсивность рассеяния на примесях $\Gamma_{a(b)} = n_{\text{imp}} \pi N_{b(a)} u^2 (1 - \tilde{\sigma})$. Параметр η определяет отношение внутризонного к межзонному рассеянию как $v^2 = u^2 \eta$. В борновском пределе (слабое рассеяние) $\tilde{\sigma} \rightarrow 0$, а в унитарном пределе (сильное рассеяние) $\tilde{\sigma} \rightarrow 1$. Из уравнения (9.10) мы сразу можем получить широко известный, но неожиданный результат, что в унитарном пределе $\tilde{\Gamma}_{ab} = 0$, т.е. немагнитные примеси не влияют на T_c в сверхпроводнике $s_{\pm}$ -типа [413, 414].

Далее мы решаем численно уравнения Элиашберга (9.8) и (9.9), варьируем T и находим T_c как самую высокую температуру возникновения нетривиального решения. Полученный результат [13] для T_c как функции параметров Γ_a , пропорционального концентрации примесей n_{imp} , и $\tilde{\Gamma}_{ab}$ показан на Рисунке 9.4. Отметим, что самое сильное подавление T_c имеет место для исключительно межзонного потенциала, т.е. когда $\eta = 0$, в борновском пределе, а в противоположном пределе исключительно внутризонного рассеяния с $u = 0$, т.е. с $\eta \rightarrow \infty$, отсутствует разрушение пар, поскольку $\tilde{\Gamma}_{ab} \rightarrow 0$. Подобная ситуация имеет место в унитарном пределе. Если говорить о зависимости T_c от $\tilde{\Gamma}_{ab}$, то все случаи с различными $\tilde{\sigma}$ и η ложатся на одну из универсальных кривых T_c , зависящих только от знака усреднённой по Ферми-поверхности константе связи $\langle \lambda \rangle \equiv [(\lambda_{aa} + \lambda_{ab})N_a/N + (\lambda_{ba} + \lambda_{bb})N_b/N]$, где $N = N_a + N_b$ - полная плотность состояний в нормальной фазе. Из Рисунка 9.4 хорошо видно, что в зависимости от знака $\langle \lambda \rangle$ получается два типа поведения сверхпроводника $s_{\pm}$ -типа: (1) при $\langle \lambda \rangle < 0$ критическая температура исчезает при конечной величине интенсивности рассеяния на примесях $\tilde{\Gamma}_{ab}^{\text{crit}}$, (2) при $\langle \lambda \rangle > 0$ критическая температура остаётся конечной при $\tilde{\Gamma}_{ab} \rightarrow \infty$. В граничном случае $\langle \lambda \rangle = 0$ мы нашли, что

$\tilde{\Gamma}_{ab}^{\text{crit}} \rightarrow \infty$, но с экспоненциально малым T_c . Следовательно, мы обнаружили, что универсальное поведение T_c контролируется единственным параметром $\langle \lambda \rangle$.

В то время как поведение систем типа (1) согласуется с качественными аргументами о том, что сверхпроводимость $s_{\pm}$ -типа разрушается немагнитными межзонными примесями из-за “перемешивания” параметров порядка с разными знаками [401, 416], неожиданным является поведения типа (2) с $\langle \lambda \rangle > 0$. Чтобы понять, что происходит в этом случае, мы вычислили параметр порядка $\Delta_{\alpha n}$ для $n = 0, 1, 2$ при $T = 0.04T_{c0}$. Результат показан на Рисунке 9.5 для такого выбора констант связи $\lambda_{\alpha\beta}$, что $\langle \lambda \rangle > 0$, а $T_{c0} \approx 40\text{K}$. Параметры порядка для обеих зон $\Delta_{a(b)n}$ стремятся к значению $\Delta_{\Gamma \rightarrow \infty}$, а T_c быстро выходит на насыщение. При этом, изначально отрицательный параметр порядка Δ_{bn} , соответствующий меньшей щели, увеличивается и в какой-то момент проходит через ноль и становится положительным. После этого, поскольку знаки параметров порядка в двух зонах одинаковы, мы имеем состояние s_{++} -типа. А оно уже не разрушается примесями в силу теоремы Андерсона, что и приводит к конечным значениям T_c вплоть до $\Gamma \rightarrow \infty$. Таким образом, в системах типа (2) T_c остаётся конечной из-за перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$.

Существует простое физическое объяснение такого перехода: с увеличением межзонного рассеяния на примесях параметры порядка на различных Ферми-поверхностях “перемешиваются” за счёт процессов рассеяния и стремятся к одному значению. При этом большая щель “подтягивает” к себе меньшую, которая проходит через ноль и меняет знак. Подобный эффект наблюдался в работах [401, 416, 428] для двухзонного сверхпроводника s_{++} -типа, и в работе [427], где обсуждалось исчезновение линий нулей щели на электронном кармане в расширенной симметрии $s_{\pm}$ -типа. Найденный переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ даёт возможность объяснить куда более слабое наблюдаемое уменьшение критической температуры, чем следует из наивного применения формулы Абрикосова-Горькова.

Одним из важных свойств перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$, имеющим непосредственное отношение к экспериментам на соединениях железа, является бесщелевая

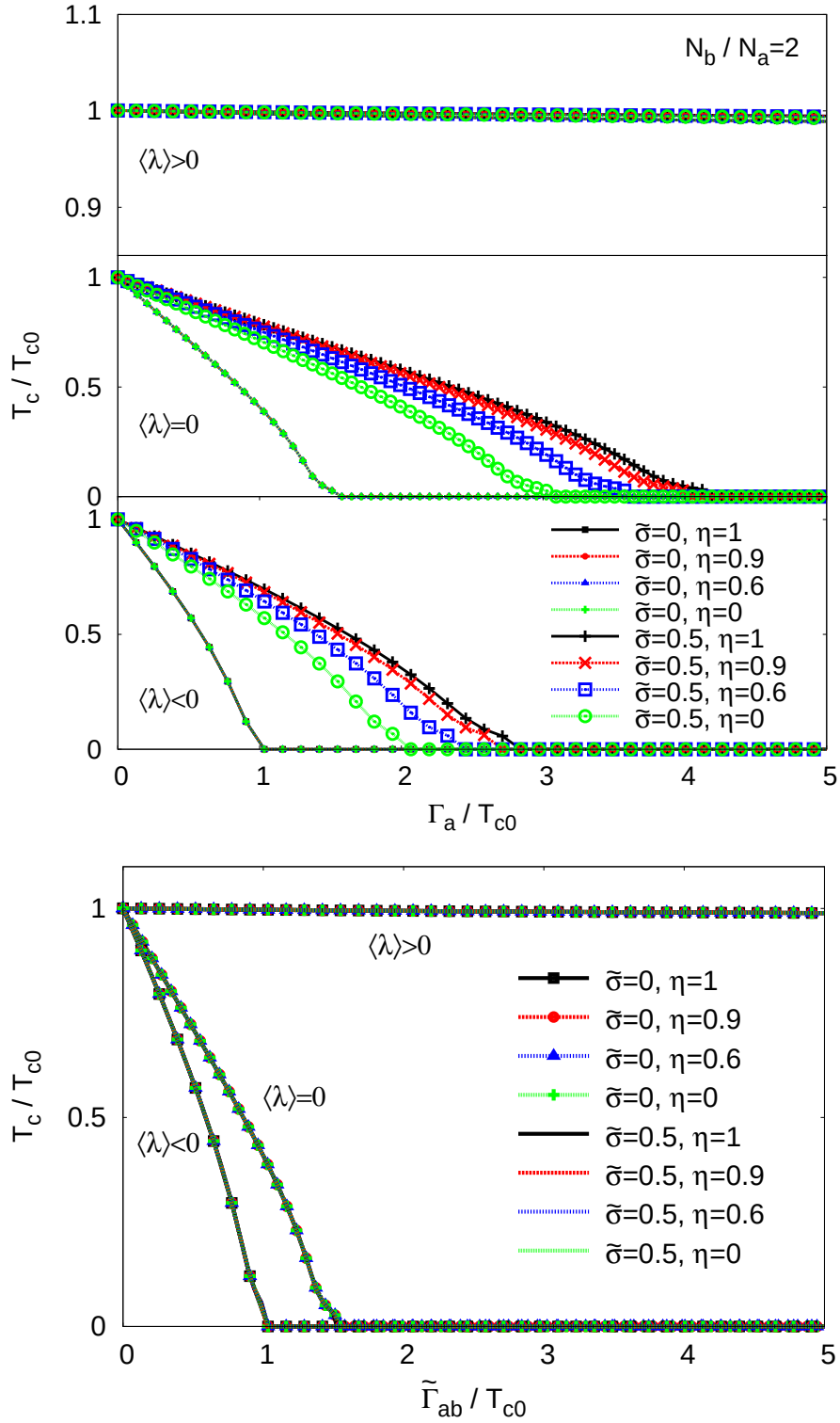


Рис. 9.4. Критическая температура для различных значений $\tilde{\sigma}$ и η как функция интенсивности рассеяния на примесях Γ_a (вверху) и эффективного параметра интенсивности межзонного рассеяния $\tilde{\Gamma}_{ab}$ (внизу). В последнем случае кривые для различных наборов $\tilde{\sigma}$ и η накладываются друг на друга и формируют одну из трёх универсальных кривых, зависящих от знака $\langle \lambda \rangle$. Для наглядности параметры были выбраны следующими: $N_b/N_a = 2$, для $\langle \lambda \rangle > 0$ константы связи равны $(\lambda_{aa}, \lambda_{ab}, \lambda_{ba}, \lambda_{bb}) = (3, -0.2, -0.1, 0.5)$, для $\langle \lambda \rangle = 0$ они равны $(2, -2, -1, 1)$, а для $\langle \lambda \rangle < 0$ равны $(1, -2, -1, 1)$.

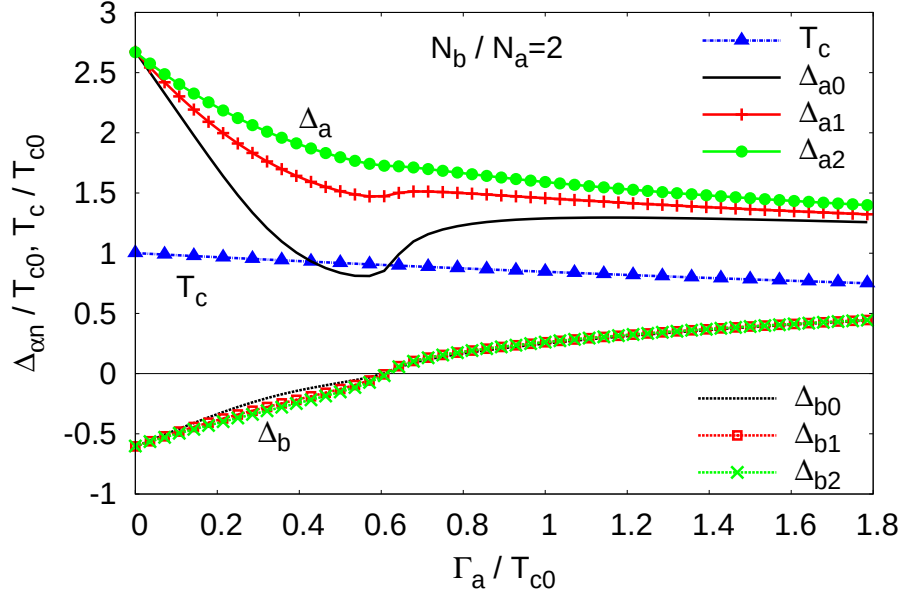


Рис. 9.5. T_c и $\Delta_{\alpha n}$ (в единицах T_{c0}) для первой ($n = 1$), второй ($n = 2$) и третьей ($n = 3$) мацубаровских частот $\omega_n = \pi T(2n + 1)$ при $T = 0.04T_{c0}$, $\tilde{\sigma} = 0.5$, $\eta = 1$, $N_b/N_a = 2$ и $\langle \lambda \rangle > 0$. Константы связи выбраны такими же, как и для Рисунка 9.4.

сверхпроводимость, возникающая, когда одна из щелей становится равной нулю. На Рисунке 9.6(a) для систем типа (2) показана полная плотность состояний $N_{tot}(\omega) = -\sum_{\alpha} \text{Im} g_{0\alpha}(\omega)/\pi$, где $g_{0\alpha}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta)$ есть запаздывающая функция Грина. С увеличением интенсивности рассеяния на примесях мала щель закрывается, приводя к конечному значению остаточной плотности состояний $N_{tot}(\omega = 0)$, а затем снова открывается. Такое поведение находит отражение в температурной зависимости лондоновской глубины проникновения, показанной на Рисунке 9.6(b). Последняя в чистом пределе имеет активационную температурную зависимость, определяемую меньшей щелью, затем переходит к зависимости типа T^2 в бесщелевом режиме, а потом показывает новый активационный режим в s_{++} -состоянии.

9.2. Скорость спин-решёточной релаксации $1/T_1T$ в ЯМР

Кроме сдвига Найта, который позволяет определить, является ли сверхпроводящее спаривание синглетным или триплетным, из ЯМР можно получить ско-

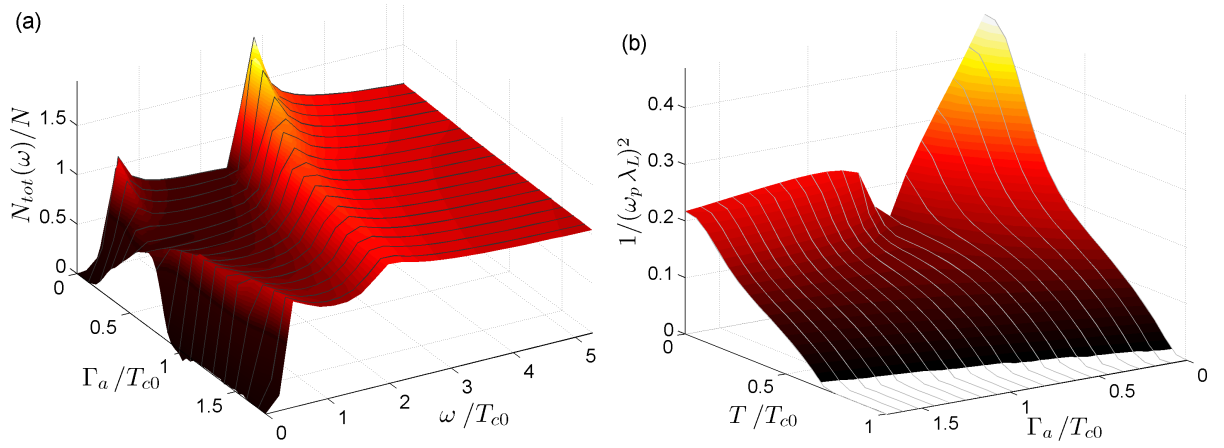


Рис. 9.6. (а) Плотность состояний $N_{tot}(\omega)/N$ как функция интенсивности рассеяния на примесях Γ_a/T_{c0} и частоты ω/T_{c0} при $\langle \lambda \rangle > 0$, $\tilde{\sigma} = 0.5$, $\eta = 1$, $N_b/N_a = 2$, $N = N_a + N_b$. (б) Полная сверхтекучая плотность $1/(\omega_p \lambda_L)^2$ как функция Γ_a/T_{c0} и T/T_{c0} , где ω_p - полная плазменная частота, а λ_L - лондоновская глубина проникновения. Константы связи такие же, как и приведённые на Рисунке 9.4.

рость спин-решёточной релаксации $1/T_1$, которая определяется спиновой восприимчивостью, проинтегрированной по всей зоне Бриллюэна:

$$\frac{1}{T_1 T} \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)}{\omega}. \quad (9.12)$$

Как и в случае спинового резонанса, см. главу 5, величина $1/T_1$ “несёт” информацию о симметрии параметра порядка и его структуре. Например, изотропное состояние s -типа характеризуется пиком Хебеля-Слихтера сразу ниже T_c и экспоненциальным поведением при низких температурах. Хорошо известно, что сверхпроводник d -типа характеризуется отсутствием или очень слабым пиком и показывает зависимость $T_1^{-1} \sim T^3$ при $T \ll T_c$. В случае соединений железа ситуация более сложная. Типичные данные для 1111 и 122 систем показаны на Рисунке 9.7(а). Очевидно, пика ниже T_c нет и температурная зависимость не следует простому степенному или экспоненциальному закону. Однако, простые аргументы позволяют нам понять основные особенности, наблюдаемые в эксперименте.

В пределе слабой связи чистого двухзонного сверхпроводника, предполагая, что основной вклад в $\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$ идёт от межзонных взаимодействий, полу-

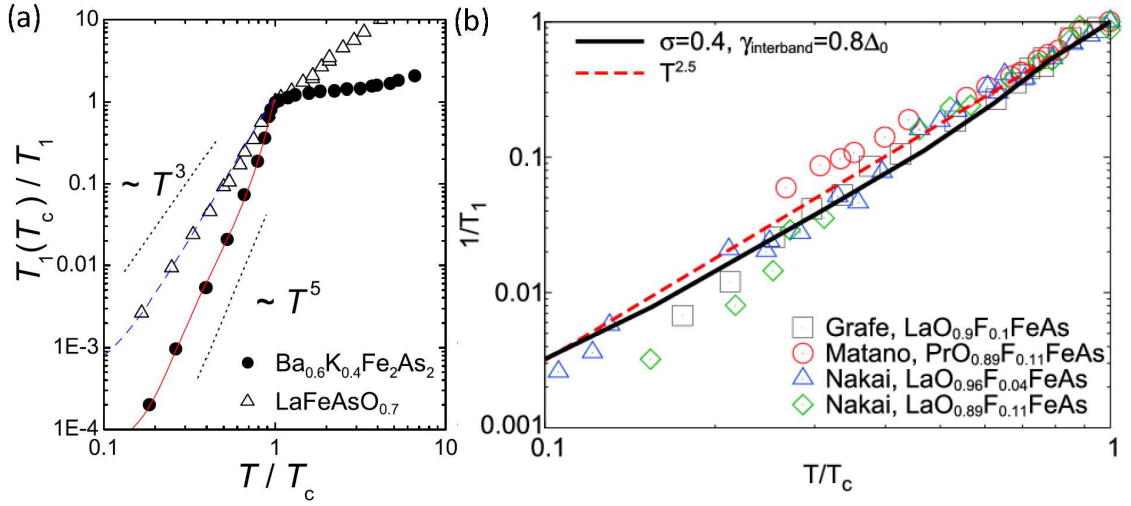


Рис. 9.7. Температурная зависимость $1/T_1$ в соединениях железа. (а) Экспериментальные результаты для систем 1111 и 122 из работы [210]. (б) График в двойном логарифмическом масштабе с экспериментальными данными нескольких групп [207, 208, 353] и теоретической кривой для сверхпроводника $s_{\pm}$ -типа в промежуточном режиме рассеяния на примесях ($0 \leq \sigma \leq 1$) с параметром рассеяния $\gamma_{\text{interband}} = 0.4\Delta_0$, а также кривой $T^{2.5}$, демонстрирующей степенную зависимость [26].

чаем

$$\frac{1}{T_1 T} \propto \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[1 + \frac{\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right] \left(-\frac{\partial f(E_{\mathbf{k}})}{\partial E_{\mathbf{k}}} \right) \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}), \quad (9.13)$$

где $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ лежат на дырочной и электронной Ферми-поверхностях, соответственно, а $E_{\mathbf{k}}$ - это энергия квазичастиц в сверхпроводящем состоянии. Как и в случае спинового резонанса, факторы когерентности в квадратных скобках приводят к важному отличию между различными симметриями параметра порядка. В $1/T_1$, как видно, знак отличается от знака в восприимчивости (5.14), имеющей прямое отношение к рассеянию нейтронов. Для изотропного s_{++} -состояния с $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}'} = \Delta$ получаем

$$\frac{1}{T_1} \propto \int_{\Delta(T)}^{\infty} dE \frac{E^2 + \Delta^2}{E^2 - \Delta^2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2T} \right). \quad (9.14)$$

Знаменатель приводит к пику сразу ниже T_c , который и является пиком Хебеля-Слихтера. Как указывалось ранее [191], он должен подавляться в $s_{\pm}$ -состоянии.

Действительно, если $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}'} = \Delta$, то

$$\frac{1}{T_1} \propto \int_{\Delta(T)}^{\infty} dE \frac{E^2 - \Delta^2}{E^2 + \Delta^2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2T} \right) = \int_{\Delta(T)}^{\infty} dE \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2T} \right), \quad (9.15)$$

что есть функция, которая монотонно уменьшается при уменьшении температуры ниже T_c . То же самое можно показать для более общего случая $s_{\pm}$ -состояния с $|\Delta_{\mathbf{k}}| \neq |\Delta_{\mathbf{k}'}|$ [26].

Хорошо известно, что разрушающее куперовские пары рассеяние на примесях в обычных сверхпроводниках существенно увеличивает плотность состояний в щели сразу ниже T_c и даже слабое магнитное рассеяние может размыть и убрать пик Хебеля-Слихтера. В состоянии со знакопеременной щелью такой же эффект возникает из-за межзонных немагнитных примесей [401]. Поскольку пик Хебеля-Слихтера не присутствует в соединениях железа даже в чистом случае, см. уравнение (9.15), влияние беспорядка более тонкое: он приводит к тому, что вместо экспоненциального поведения ниже T_c , возникает степенное. Если вызванное примесями связанное состояние лежит на уровне Ферми, то скорость спин-решёточной релаксации приобретает линейную температурную зависимость Корринги-подобного вида в области температур, соответствующих ширине примесной зоны [429].

Качественные аргументы приводят к выводу, что для объяснения наблюдаемого поведения $1/T_1$ в рамках изотропного $s_{\pm}$ -состояния ни борновский, ни унитарный пределы не подходят: первый приводит к экспоненциальному поведению при низких температурах в достаточно чистых системах, а второй - к закону Корринги. Различные данные по системам типа 1111 лежат где-то между этими двумя пределами [207, 208, 353], см. Рисунок 9.7(b). Там же показан наш расчёт $1/T_1$ в простой модели $s_{\pm}$ -состояния [26]. Видно, что в $s_{\pm}$ -состоянии нет когерентного пика и, в отличие от борновского и унитарного пределов, промежуточный случай с σ , отличной от 0 и 1, может воспроизвести экспериментальное наблюдаемое поведение [26, 221, 402, 403, 415]. Этот результат, взятый отдель-

но, нельзя принимать как доказательство изотропного $s_{\pm}$ -состояния, поскольку в некоторых из этих систем вероятно присутствует сильная анизотропия, что также приведёт к более высокой плотности состояний квазичастиц, вносящих вклад при промежуточных температурах.

Что касается других систем, то данные по $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ в оптимально допированных образцах показывают линейную температурную зависимость $1/T_1$, переходящую в зависимость $\sim T^3$ выше $\sim 0.1T_c$ [213, 430], что согласуется с наличием линий нулей щели в этих соединениях, найденных в других экспериментах. В $\text{Ba}_{0.68}\text{K}_{0.32}\text{Fe}_2\text{As}_2$, $1/T_1$ имеет экспоненциальное поведение ниже $T \approx 0.45T_c$, согласующееся с полной щелью $s_{\pm}$ -типа [339]. В конце концов, в согласии с другими измерениями, ЯМР на системе LiFeAs показывает полную щель [212].

9.3. Магнитный беспорядок в многозонных сверхпроводниках

В нескольких недавних экспериментах на соединениях железа было показано, что T_c подавляется значительно слабее, чем ожидается из теории Абрикосова-Горькова, как в случае немагнитных [417–420, 431], так и магнитных [410, 417, 432–434] примесей.

Как было показано нами в предыдущем разделе для соединений железа, а также в работах [401, 416, 435] для других многозонных сверхпроводников, ситуация с немагнитными примесями не такая простая. В частности, T_c практически не зависит от интенсивности рассеяния на немагнитных примесях в (1) унитарном пределе для однородного потенциала примеси, т.е. при равных внутри- и межзонных компонентах [413] и (2) при $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ переходе в случае большого внутризонного притяжения в двухзонной модели сверхпроводника $s_{\pm}$ -типа [13]. Качественно этот результат был подтверждён согласием с результатами численного решения уравнений Боголюбова-де Жена [436, 437]. Хотя точная форма

потенциала примеси неизвестна, очень сложно представить себе, что внутри- и межзонная его части равны в различных случаях (например, при добавлении Zn и при облучении протонами). Это приводит к тому, что реализация случая (1) очень маловероятна. Случай (2), с другой стороны, очень привлекателен. Стоит отметить, что большое внутризонное притяжение в двухзонной модели не обязательно означает большую амплитуду внутризонного спаривания в многозонной модели. Внутризонное притяжение в двухзонной модели может возникнуть в процессе проектирования четырёхзонной модели с малым внутризонным притяжением и большим асимметричным по отношению к зонам межзонным отталкиванием [426]. Поскольку на сегодняшний день нет однозначного ответа на вопрос о том, является ли параметр порядка в соединениях железа знакопостоянным или меняющим знак, можно надеяться, что дополнительная информация может быть получена из исследований магнитных примесей.

Здесь мы рассмотрим двухзонные модели изотропных сверхпроводников $s_{\pm}$ - и s_{++} -типов с рассеянием на магнитных примесях, учитываемом в самосогласованном приближении T -матрицы [423]. Мы покажем, что зависимости T_c и параметра порядка имеют особенности, которые могут помочь идентифицировать параметр порядка в чистом случае. Широко распространено мнение, что магнитные примеси подавляют сверхпроводимость. Мы покажем, что, хотя в общем случае имеет место разрушение сверхпроводящего состояния при увеличении рассеяния на магнитных примесях, существует несколько режимов либо с отсутствием подавления T_c , либо с существенным уменьшением скорости этого подавления. даже если T_c уходит в ноль, её поведение может отличаться от предсказаний теории Абрикосова-Горькова для однозонных сверхпроводников. Примерами других типичных многозонных систем, где применима наша теория, могут быть MgB_2 и приближённое рассмотрение сверхпроводников d -типа, например, купратов, где части Ферми-поверхности с различными знаками параметра порядка можно очень грубо рассматривать как вклады различных зон.

9.3.1. Метод

Подход будет аналогичен, изложенному в предыдущем разделе, но в случае магнитных примесей есть своя специфика, связанная с необходимостью отдельно рассматривать спиновое пространство, поэтому мы изложим используемый метод с самого начала. Итак, мы используем подход Элиашберга для многозонных сверхпроводников [423] и вычислим ξ -интегрированную функцию Грина $\hat{\mathbf{g}}(\omega_n) = \int d\xi \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}, \omega_n) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{an} & 0 \\ 0 & \hat{g}_{bn} \end{pmatrix}$, где $\hat{g}_{an} = g_{0an}\hat{\tau}_0 \otimes \hat{\sigma}_0 + g_{2an}\hat{\tau}_2 \otimes \hat{\sigma}_2$, индексы a и b соответствуют двум различным зонам, индекс $\alpha = a, b$ связан с зонным пространством, матрицы Паули связаны с пространством Намбу ($\hat{\tau}_i$) и спиновым пространством ($\hat{\sigma}_i$). Здесь $\hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}, \omega_n) = [\hat{\mathbf{G}}_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega_n) - \hat{\Sigma}(\omega_n)]^{-1}$ - это матричная функция Грина квазичастицы с импульсом $\mathbf{k}$ и мадубаровской частотой $\omega_n = (2n + 1)\pi T$, определённая в зонном и комбинированном Намбу и спиновом пространствах, $\hat{G}_0^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega_n) = [i\omega_n\hat{\tau}_0 \otimes \hat{\sigma}_0 - \xi_{\alpha\mathbf{k}}\hat{\tau}_3 \otimes \hat{\sigma}_0]^{-1} \delta_{\alpha\beta}$ - это “голая” функция Грина, $\hat{\Sigma}(\omega_n) = \sum_{i=0}^3 \Sigma_{\alpha\beta}^{(i)}(\omega_n)\hat{\tau}_i$ - это матрица собственно-энергетической части, $\xi_{\alpha,\mathbf{k}} = v_{\alpha,F}(k - k_{\alpha,F})$ - линеаризованная дисперсия, g_{0an} и g_{2an} - это нормальная и аномальная ξ -интегрированные функции Грина:

$$g_{0an} = -\frac{i\pi N_\alpha \tilde{\omega}_{an}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{an}^2 + \tilde{\phi}_{an}^2}}, \quad g_{2an} = -\frac{\pi N_\alpha \tilde{\phi}_{an}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{an}^2 + \tilde{\phi}_{an}^2}}, \quad (9.16)$$

зависящие от плотности состояний на спин в соответствующей зоне на уровне Ферми $N_{a,b}$ и от перенормированных собственно-энергетической частью параметра порядка $\tilde{\phi}_{an}$ и частоты $\tilde{\omega}_{an}$,

$$i\tilde{\omega}_{an} = i\omega_n - \Sigma_{0a}(\omega_n) - \Sigma_{0a}^{\text{imp}}(\omega_n), \quad (9.17)$$

$$\tilde{\phi}_{an} = \Sigma_{2a}(\omega_n) + \Sigma_{2a}^{\text{imp}}(\omega_n). \quad (9.18)$$

Удобно ввести фактор перенормировки $Z_{an} = \tilde{\omega}_{an}/\omega_n$, который входит в функцию щели $\Delta_{an} = \tilde{\phi}_{an}/Z_{an}$.

Часть собственной-энергии, обусловленной спин-флуктуационным взаимо-

действием, можно записать следующим образом:

$$\Sigma_{0\alpha}(\omega_n) = T \sum_{\omega'_n, \beta} \lambda_{\alpha\beta}^z (n - n') \frac{g_{0\beta n}}{N_\beta}, \quad (9.19)$$

$$\Sigma_{2\alpha}(\omega_n) = -T \sum_{\omega'_n, \beta} \lambda_{\alpha\beta}^\phi (n - n') \frac{g_{2\beta n}}{N_\beta}, \quad (9.20)$$

Функции связи $\lambda_{\alpha\beta}^{\phi, z}(n - n') = 2\lambda_{\alpha\beta}^{\phi, z} \int_0^\infty d\Omega \Omega B(\Omega) / [(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega^2]$ зависят от нормированной бозонной спектральной функции $B(\Omega)$, представленной на Рисунке 9.2. В то время как матричные элементы $\lambda_{\alpha\beta}^\phi$ могут быть как положительными (притяжение), так и отрицательными (отталкивание) из-за вкладов спиновых флуктуаций и электрон-фононного взаимодействия [26, 424], матричные элементы $\lambda_{\alpha\beta}^z$ всегда положительны. Для простоты мы положим $\lambda_{\alpha\beta}^z = |\lambda_{\alpha\beta}^\phi| \equiv |\lambda_{\alpha\beta}|$ и пренебрежём возможной анизотропией каждого параметра порядка $\tilde{\phi}_{\alpha n}$.

Мы используем приближение T -матрицы, графически изображённое на Рисунке 9.3, для вычисления примесной собственно-энергетической части $\hat{\Sigma}^{\text{imp}}$:

$$\hat{\Sigma}^{\text{imp}}(\omega_n) = n_{\text{imp}} \hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}} \hat{\mathbf{g}}(\omega_n) \hat{\Sigma}^{\text{imp}}(\omega_n), \quad (9.21)$$

где n_{imp} - концентрация примесей. Потенциал примеси для некоррелированных примесей можно записать как $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{V} \otimes \hat{S}$, где

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{S} & 0 \\ 0 & -(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{S})^T \end{pmatrix} \quad (9.22)$$

является матрицей 4×4 , $(\dots)^T$ - операция транспонирования, а $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ - вектор спина [438]. Вектор $\hat{\sigma}$ составлен из τ -матриц: $\hat{\sigma} = (\hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2, \hat{\tau}_3)$. Величина потенциала определяется как $(\mathbf{V})_{\alpha\beta} = V_{\mathbf{R}_i=0}^{\alpha\beta}$. Для простоты внутризонная и межзонная части потенциала мы положим равными $\mathcal{I}$ и $\mathcal{J}$, соответственно, так, что $(\mathbf{V})_{\alpha\beta} = (\mathcal{I} - \mathcal{J})\delta_{\alpha\beta} + \mathcal{J}$. Тогда $\mathbf{V}$ имеет вид

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathcal{I} & \mathcal{J} \\ \mathcal{J} & \mathcal{I} \end{pmatrix}. \quad (9.23)$$

Компоненты матрицы примесного потенциала $\hat{\mathbf{U}}$ в этом случае равны $\hat{U}_{aa,bb} = \mathcal{I}\hat{S}$ и $\hat{U}_{ab,ba} = \mathcal{J}\hat{S}$, а сама матрица есть:

$$\hat{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} \mathcal{I}\hat{S} & \mathcal{J}\hat{S} \\ \mathcal{J}\hat{S} & \mathcal{I}\hat{S} \end{pmatrix}, \quad (9.24)$$

Система уравнений T -матрицы для aa и ba компонент собственной энергии в таких обозначениях становится равной

$$\hat{\Sigma}_{aa}^{\text{imp}} = n_{\text{imp}}\hat{U}_{aa} + \hat{U}_{aa}\hat{g}_a\hat{\Sigma}_{aa}^{\text{imp}} + \hat{U}_{ab}\hat{g}_b\hat{\Sigma}_{ba}^{\text{imp}}, \quad (9.25)$$

$$\hat{\Sigma}_{ba}^{\text{imp}} = n_{\text{imp}}\hat{U}_{ba} + \hat{U}_{ba}\hat{g}_a\hat{\Sigma}_{aa}^{\text{imp}} + \hat{U}_{bb}\hat{g}_b\hat{\Sigma}_{ba}^{\text{imp}}. \quad (9.26)$$

Решение этой системы в матричном виде есть

$$\hat{\Sigma}_{aa}^{\text{imp}} = n_{\text{imp}} \left[\hat{1} - \hat{U}_{aa}\hat{g}_a - \hat{U}_{ab}\hat{g}_b\hat{\zeta}\hat{U}_{ba}\hat{g}_a \right]^{-1} \left(\hat{U}_{aa} + \hat{U}_{ab}\hat{g}_b\hat{\zeta}\hat{U}_{ba} \right), \quad (9.27)$$

$$\hat{\Sigma}_{ba}^{\text{imp}} = \hat{\zeta}\hat{U}_{ba} \left(n_{\text{imp}} + \hat{g}_a\hat{\Sigma}_{aa}^{\text{imp}} \right), \quad (9.28)$$

где $\hat{\zeta} = \left[\hat{1} - \hat{U}_{bb}\hat{g}_b \right]^{-1}$. Перенормировки частоты и параметра порядка происходят из величин

$$\Sigma_{0a}^{\text{imp}} = \frac{1}{4} \text{Tr} \left[\hat{\Sigma}_{aa}^{\text{imp}} \cdot (\hat{\tau}_0 \otimes \hat{\sigma}_0) \right], \quad (9.29)$$

$$\Sigma_{2a}^{\text{imp}} = \frac{1}{4} \text{Tr} \left[\hat{\Sigma}_{aa}^{\text{imp}} \cdot (\hat{\tau}_2 \otimes \hat{\sigma}_2) \right]. \quad (9.30)$$

Уравнения на Σ_{0b}^{imp} и Σ_{2b}^{imp} получаются из приведённых выражений заменой индексов a и b .

9.3.2. Результаты

Нижеследующие результаты были получены при самосогласованном решении уравнений на частоту и параметр порядка (9.17) и (9.18) с примесной собственной энергией из решения уравнений (9.25)-(9.26) при произвольной температуре ниже T_c и на T_c . Выражения для $\Sigma_{0\alpha}^{\text{imp}}$ и $\Sigma_{2\alpha}^{\text{imp}}$ пропорциональны эффективной интенсивности рассеяния на примесях $\Gamma_{a,b}$ и, как и в предыдущем

разделе, содержат параметр обобщённого рассеяния на примесях σ , который помогает контролировать приближение для “силы” рассеяния на примеси. Последняя меняется от борновского предела (слабое рассеяние, $\pi \mathcal{J} N_{a,b} \ll 1$) до унитарного предела (сильное рассеяние, $\pi \mathcal{J} N_{a,b} \gg 1$):

$$\Gamma_{a,b} = \frac{2n_{\text{imp}}\sigma}{\pi N_{a,b}} \rightarrow \begin{cases} 2\pi \mathcal{J}^2 s^2 n_{\text{imp}} N_{b,a}, \text{ Born} \\ \frac{2n_{\text{imp}}}{\pi N_{a,b}}, \text{ unitary} \end{cases} \quad (9.31)$$

$$\sigma = \frac{\pi^2 \mathcal{J}^2 s^2 N_a N_b}{1 + \pi^2 \mathcal{J}^2 s^2 N_a N_b} \rightarrow \begin{cases} 0, \text{ Born} \\ 1, \text{ unitary} \end{cases} \quad (9.32)$$

Отметим, что Γ_α здесь в два раза больше той, которая использовалась в предыдущем разделе и в работе [13].

Мы предполагаем, что спины не поляризованы и $s^2 = \langle S^2 \rangle = S(S+1)$. Также мы введём параметр η , контролирующий отношение внутри- и межзонного потенциалов рассеяния: $\mathcal{I} = \mathcal{J}\eta$.

На Рисунках 9.8(a),(b) и 9.9 показаны зависимости от Γ_a критической температуры T_c и параметра порядка Δ_{an} для первой мацубаровской частоты $\omega_{n=1} = 3\pi T$ для различных значений параметра σ в случае сверхпроводников $s_\pm$ - и s_{++} -типов. Действительная часть аналитически продолженной на действительные частоты Δ_{an} - функции параметра порядка $\text{Re}\Delta_\alpha(\omega)$ - показана на Рисунках 9.8(c),(d). Во-первых мы обсудим $s_\pm$ -состояние. T_c становится нечувствительным к примесям для исключительно межзонного рассеяния $\mathcal{I} = 0$. Это частично подтверждает качественные аргументы о том, что $s_\pm$ -состояние с магнитными примесями ведёт себя как s_{++} -состояние с немагнитным беспорядком [401, 416] и согласуется с теоретическими расчётами в борновском пределе [439]. При конечном $\mathcal{I}$ внутризонное рассеяние на магнитных примесях приводит к усреднению щелей вплоть до нуля, следовательно, подавляется T_c . С другой стороны, в унитарном пределе ($\sigma = 1$) при $T \rightarrow T_c$ мы имеем $\tilde{\omega}_{an} = \omega_n + i\Sigma_{0a}(\omega_n) + \frac{\Gamma_a}{2}\text{sgn}(\omega_n)$ и $\tilde{\phi}_{an} = \Sigma_{2a}(\omega_n) + \frac{\Gamma_a}{2} \frac{\tilde{\phi}_{an}}{|\tilde{\omega}_{an}|}$ для произвольного значения η , включая случай исключительно внутризонных примесей

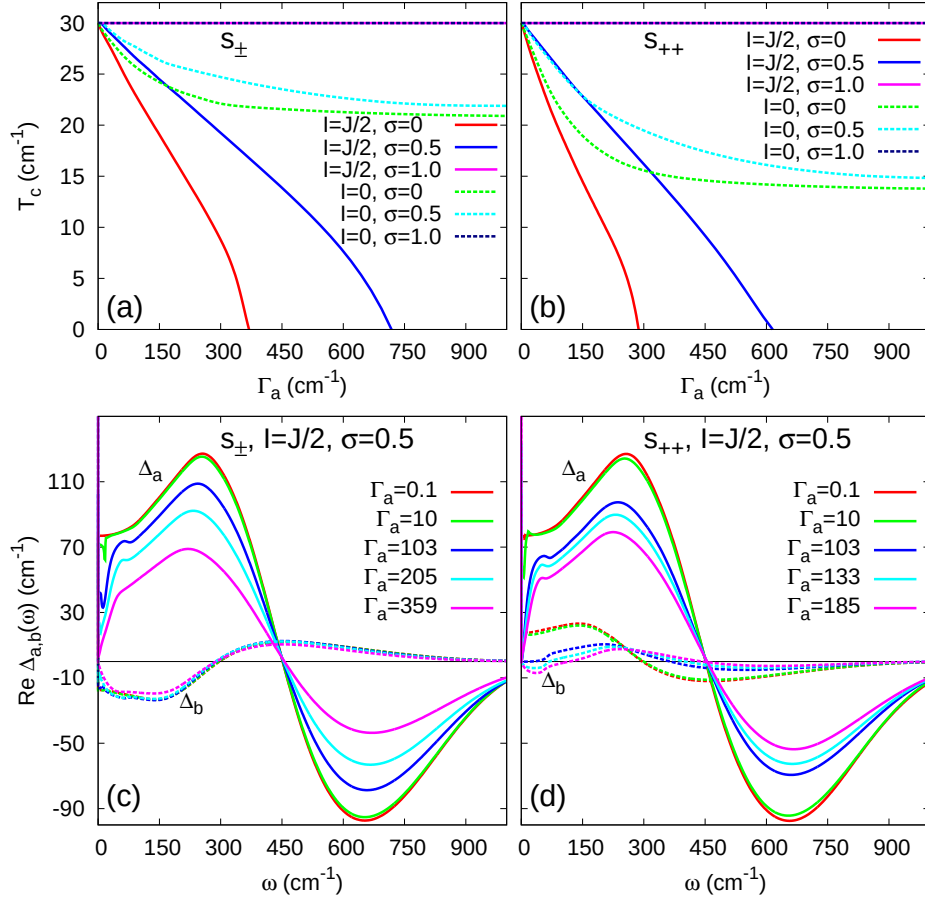


Рис. 9.8. Зависимость T_c от интенсивности рассеяния Γ_a (a),(b) и частотная зависимость параметра порядка $\text{Re}\Delta_\alpha(\omega)$ (c),(d) при различных значениях Γ_a для $s_{\pm}$ (a),(c) и s_{++} (b),(d) сверхпроводников. Здесь $N_b/N_a = 2$, а константы связи выбраны равными $(\lambda_{aa}, \lambda_{ab}, \lambda_{ba}, \lambda_{bb}) = (3, -0.2, -0.1, 0.5)$ так, что $\langle \lambda \rangle < 0$ для $s_{\pm}$ -состояния и равными $(3, 0.2, 0.1, 0.5)$ для s_{++} -состояния.

$1/\eta = 0$. Такая форма уравнений совпадает с уравнениями в случае немагнитных примесей и, следовательно, по аналогии с теоремой Андерсона, в этом случае нет вклада примесей в уравнения на T_c . Единственным исключением является специальный случай однородного потенциала примесей $\eta = 1$, когда $\tilde{\omega}_{an} = \omega_n + i\Sigma_{0a}(\omega_n) + \frac{n_{\text{imp}}}{\pi(N_a+N_b)}\text{sgn}(\omega_n)$ и $\tilde{\phi}_{an} = \Sigma_{2a}(\omega_n) + \frac{n_{\text{imp}}}{\pi(N_a+N_b)^2} \left(N_a \frac{\tilde{\phi}_{an}}{|\tilde{\omega}_{an}|} + N_b \frac{\tilde{\phi}_{bn}}{|\tilde{\omega}_{bn}|} \right)$. Параметры порядка обеих зон перемешаны в уравнении на $\tilde{\phi}_{an}$ и, следовательно, они стремятся к нулю при увеличении беспорядка. Это утверждение также справедливо вдали от унитарного предела и оно является источником утверждения о том, что однородный потенциал с $\mathcal{I} = \mathcal{J}$ - это исключительный случай, при котором возникает самое сильное подавление T_c . При изначально неравных

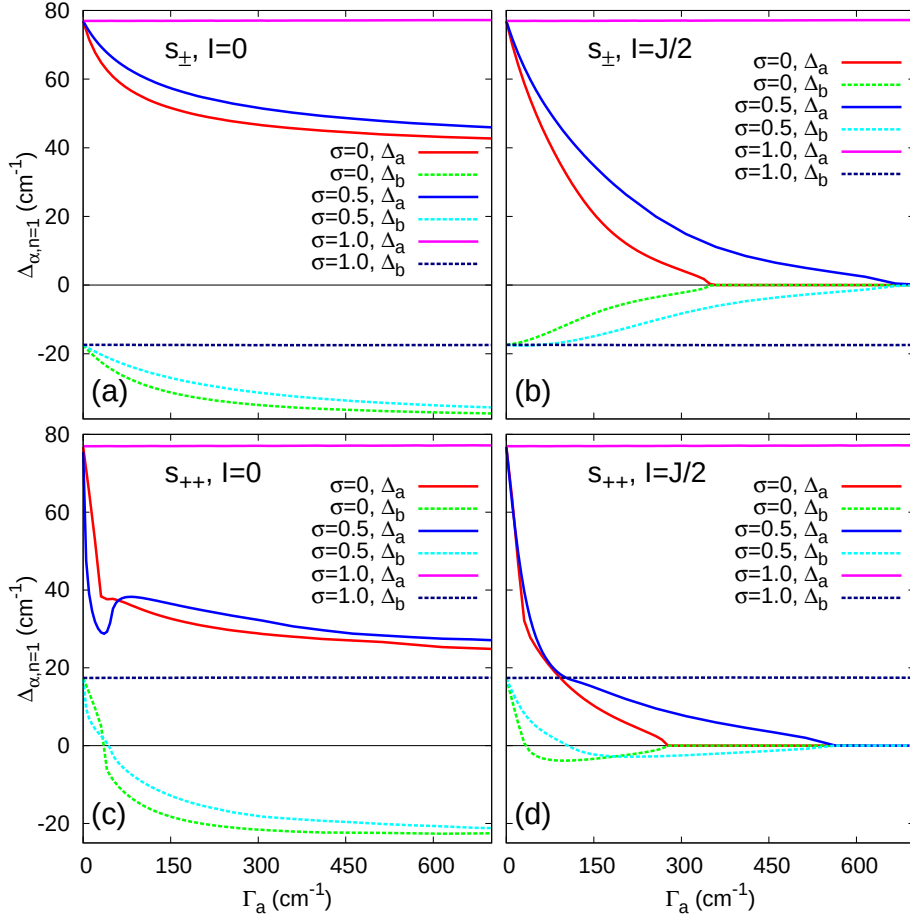


Рис. 9.9. Зависимость мацубаровского параметра порядка $\Delta_{\alpha n=1}$ от интенсивности рассеяния Γ_a для $s_{\pm}$ (a),(b) и s_{++} (c),(d) сверхпроводников с исключительно межзонным рассеянием $\mathcal{I} = 0$ (a),(c) и с $\mathcal{I} = \mathcal{J}/2$ (b),(d). Остальные параметры такие же, как и для Рисунка 9.8.

параметрах порядка $|\Delta_a| \neq |\Delta_b|$ имеет место изначальное уменьшение T_c при малых Γ_a , пока перенормированные параметры порядка не сравняются, и тогда T_c выходит на насыщение, поскольку реализуется аналог теоремы Андерсона.

В общем случае многозонное s_{++} -состояние должно всегда разрушаться парамагнитным беспорядком, поскольку магнитное рассеяние между зонами с параметрами порядка одинакового знака эквивалентно рассеянию с разрушением сверхпроводящих пар в одной (квази)изотропной зоне. Тем более удивительно, что мы обнаружили режим, в котором T_c выходит на насыщение при увеличении магнитного беспорядка, как раз после изначального падения (подобного предсказанному в теории Абрикосова-Горькова), см. Рисунок 9.8(b). Выход T_c на насыщение имеет место только для исключительно межзонного

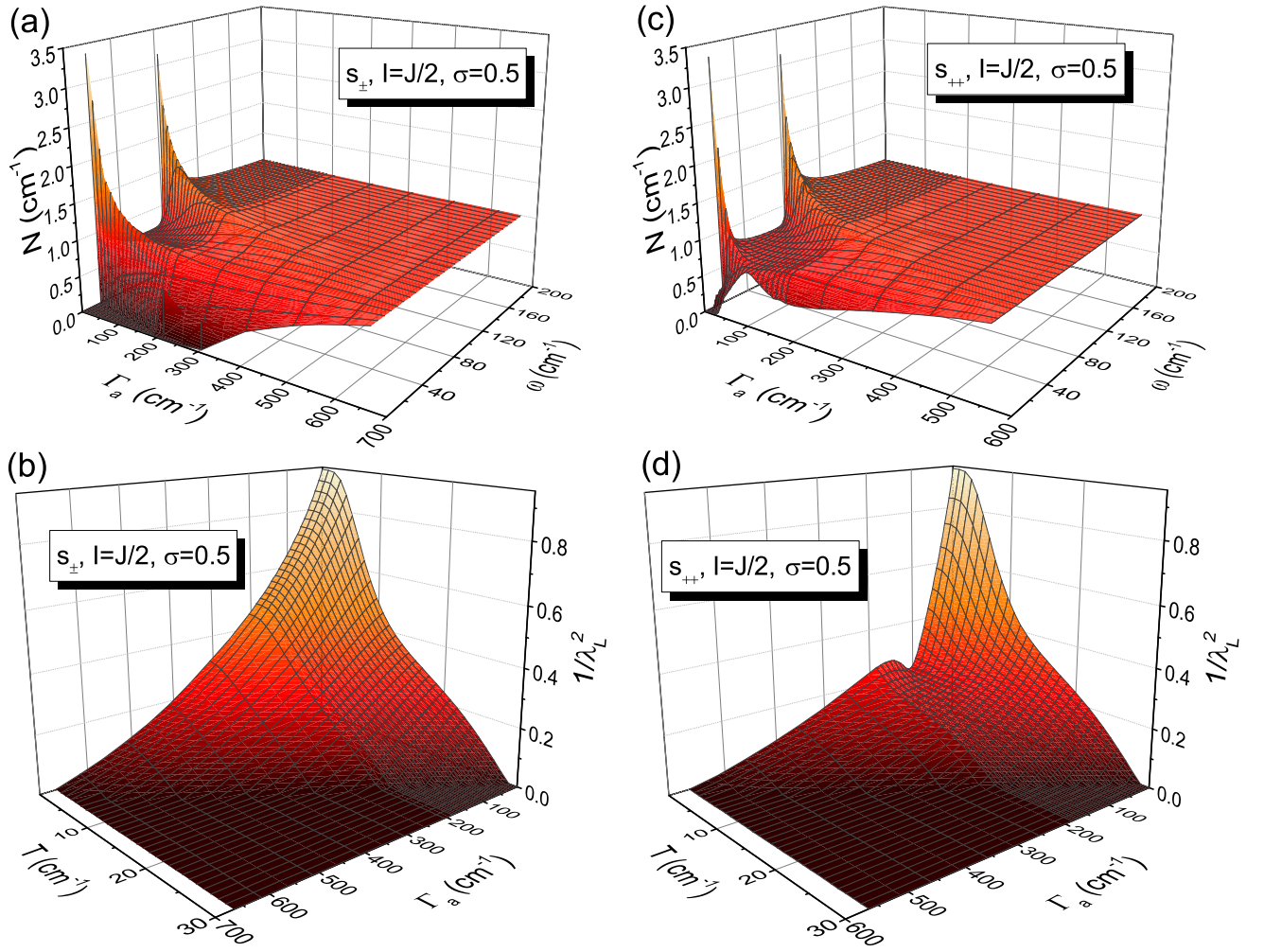


Рис. 9.10. Плотность состояний N как функция частоты ω и параметра интенсивности рассеяния на магнитных примесях Γ_a (a,c), а также зависимость обратного квадрата глубины проникновения $1/\lambda_L^2$ от Γ_a и температуры T (b,d) для $s_{\pm}$ (a,b) и s_{++} (c,d) сверхпроводников с $I = J/2$, $\sigma = 0.5$ и остальными параметрами, как на Рисунке 9.8. Отметим переход из s_{++} в $s_{\pm}$ -состояние при $\Gamma_a \sim 100 \text{ см}^{-1}$ и бесщелевую область сразу после перехода.

рассеяния, а присутствие внутризонного магнитного рассеяния в конце концов подавляет T_c до нуля. Но, в зависимости от “силы” рассеяния σ , уменьшение T_c может быть достаточно слабым по сравнению с теорией Абрикосова-Горькова.

Чтобы понять причину выхода T_c на насыщение мы проанализировали зависимость параметров порядка от интенсивности рассеяния Γ_a , см. Рисунок 9.9. Для s_{++} -состояния, после определённого значения интенсивности рассеяния, меньший параметр порядка Δ_b становится отрицательным. То, что мы видим - это переход $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$. Как только система становится эффективно $s_{\pm}$, влияние

рассеяния на магнитных примесях исчезает из уравнения на T_c подобно теореме Андерсона, и T_c становится постоянной. Перед выходом на насыщение имеет место изначальное падение, подобное получаемому из теории Абрикосова-Горькова. Упомянутый переход также виден в частотной зависимости параметра порядка на действительных частотах, см. Рисунок 9.8(d).

Подобно переходу $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ для немагнитных примесей, здесь существует простая физическая интерпретация перехода $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$. А именно, при увеличении межзонного магнитного беспорядка параметры порядка на различных Ферми-поверхностях стремятся к одному значению и, если один из них был больше другого, он пересекает ноль и меняет знак. Подобный эффект упоминался ранее в работах [401, 416, 428] по борновскому пределу для двухзонных систем с s_{++} -симметрией параметра порядка. Отметим, что здесь мы не рассматриваем возможную симметрию с нарушением инвариантности относительно обращения времени - состояние $s_{\pm} + i s_{++}$, которое может быть энергетически выгодно сразу ниже T_c в случае нарушения трансляционной симметрии [440].

Поскольку один из параметров порядка меняет знак, он с необходимостью проходит через ноль. Это соответствует бесщелевой сверхпроводимости. Следовательно, переход должен проявиться, во-первых, в плотности состояний, которую можно измерять в туннельных экспериментах и в ARPES: $N(\omega) = -\sum_{\alpha} \text{Im} g_{0\alpha}(\omega)/\pi$, где $g_{0\alpha}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta)$ - это запаздывающая функция Грина, а, во-вторых, в температурной зависимости лондоновской глубины проникновения λ_L . Последнюю мы можем вычислить как

$$\frac{1}{\lambda_L^2} = \sum_{\alpha} \frac{\omega_{P\alpha}^2}{c^2} T \sum_n \frac{g_{2\alpha n}^2}{\pi N_{\alpha}^2 \sqrt{\tilde{\omega}_{\alpha n}^2 + \tilde{\phi}_{\alpha n}^2}}, \quad (9.33)$$

где $\omega_{P\alpha}/c$ - это отношение плазменной частоты к скорости звука, которое мы для простоты полагаем равным единице. На Рисунке 9.10 показаны $N(\omega)$ и $1/(\omega_p \lambda_L)^2$ при $\mathcal{I} = \mathcal{J}/2$ и $\sigma = 0.5$ для сверхпроводников $s_{\pm}$ - и s_{++} -типа. В первом случае Рисунок 9.10 отражает ожидаемое поведение с постепенно уменьшающимися щелями. Бесщелевая сверхпроводимость с конечной остаточной

$N(\omega = 0)$ возникает при $\Gamma_a > 300 \text{ см}^{-1}$, когда $\text{Re}\Delta_\alpha(\omega = 0)$ становится равным нулю, см. Рисунок 9.8(с). Что касается s_{++} -состояния из Рисунка 9.10, при увеличении интенсивности примесного рассеяния Γ_a меньшая щель уходит в ноль, приводя к конечной остаточной плотности состояний $N(\omega = 0)$. Затем щель открывается снова и $\Delta_{bn} \neq 0$, пока T_c не достигает нуля при $\Gamma_a \sim 600 \text{ см}^{-1}$. Но при этом сверхпроводимость остаётся бесщелевой с конечным значением $N(0)$ из-за того, что $\text{Re}\Delta_\alpha(\omega = 0) \rightarrow 0$, см. Рисунок 9.8(d). Глубина проникновения в чистом пределе демонстрирует активационное поведение, определяемое меньшей щелью. В случае сверхпроводника s_{++} -типа поведение становится пропорционально T^2 в бесщелевом режиме, что приводит к существенному провалу в зависимости глубины проникновения вблизи $\Gamma_a = 100 \text{ см}^{-1}$, см. Рисунок 9.10, а затем переходит к новому активационному типу поведения в $s_\pm$ -состоянии после перехода.

9.4. Заключение

Мы показали, что в двухзонной модели $s_\pm$ -состояние может быть устойчиво по отношению к рассеянию на немагнитных примесях, что зависит от соотношения между внутри- и межзонными константами связи сверхпроводника. В системе даже может произойти переход в состояние s_{++} при увеличении беспорядка. Такой переход должен проявиться в термодинамических и транспортных свойствах.

Также мы показали, что, в отличие от широко распространённого мнения, в двухзонных моделях существует несколько исключительных случаев, когда при наличии магнитных примесей система может демонстрировать конечное значение критической температуры T_c . Эти случаи включают $s_\pm$ -состояние в унитарном пределе или с потенциалом рассеяния, имеющим исключительно межзонный характер. Последнее согласуется с качественными рассуждениями, что есть прямая связь между магнитными примесями в $s_\pm$ -состоянии

и немагнитными в изотропном s_{++} -состоянии. Показано, что сверхпроводимость s_{++} -типа может быть устойчива по отношению к магнитному беспорядку с исключительно межзонным потенциалом рассеяния из-за перехода в $s_{\pm}$ -состояние. Поскольку такой переход идёт через бесщелевое состояние, он должен проявляться в термодинамике системы. Например, его можно наблюдать в оптических и туннельных экспериментах, а также в фотоэмиссионной спектроскопии и туннельной проводимости в соединениях железа и других многозонных системах.

Общий вывод состоит в том, что если в системе в чистом пределе есть два взаимодействия - доминирующее (1) и не доминирующее (2), и взаимодействие (2) может привести к сверхпроводящему состоянию, устойчивому по отношению к разрушению на беспорядке, то система перейдёт в это состояние, когда беспорядок разрушит состояние, обусловленное взаимодействием (1). Так, $s_{\pm}$ -состояние возникает за счёт межзонного взаимодействия, а s_{++} - за счёт внутризонного. И если изначально было $s_{\pm}$ -состояние и не было внутризонной компоненты, то межзонные немагнитные примеси полностью разрушат его и подавят T_c . Если же есть $s_{\pm}$ -состояние с (небольшой) внутризонной компонентой взаимодействия, то такие же примеси подавят $s_{\pm}$ -состояние, но из-за остаточного внутризонного взаимодействия стабилизируется s_{++} -состояние, которое уже не подвержено разрушению немагнитными примесями. Это и будет переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$. В случае магнитных примесей ситуация обратная. Если изначально было s_{++} -состояние без межзонной компоненты взаимодействия, то межзонные магнитные примеси подавят его. Но при наличии хотя бы небольшого межзонного взаимодействия из него возникнет $s_{\pm}$ -состояние после подавления s_{++} -состояния магнитным беспорядком. Так и возникнет переход $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$.

Глава 10

Сверхпроводящее спаривание в соединениях железа в приближении главных угловых гармоник

Мы сформулируем эффективную низкоэнергетическую модель спаривания для сверхпроводников на основе железа с s - и d -типами параметра порядка и небольшим числом параметров и используем её для изучения зависимости от допирования симметрии и структуры сверхпроводящей щели. Главная идея заключается в том, чтобы “разложить” полное куперовское взаимодействие на вклады от процессов рассеяния между различными Ферми-поверхностями. Мы покажем, что эта модель описывает всё разнообразие парных состояний, обнаруженных до сих пор в соединениях железа, и позволяет понять механизм притяжения в $s_{\pm}$ - и $d_{x^2-y^2}$ -каналах, конкуренцию между s - и d -типом решений и природу сверхпроводимости в сильно допированных системах, где остаются только электронные или дырочные Ферми-карманы.

Существующие теоретические подходы к спариванию в соединениях железа можно разделить на две категории. В одной категории подразумевается, что фермионы на энергиях меньших, чем небольшая часть ширины зоны, можно рассматривать как делокализованные с умеренно-большой собственно-энергетической частью [10, 183–185, 187], хотя такие эффекты сильной связи, как перенормировка ширины зоны взаимодействием, необходимо учитывать [396, 441]. В подходе делокализованных электронов спаривание часто рассматривается в формализме БКШ или Элиашберга, взаимодействие в котором берётся в виде комбинации прямого электрон-электронного взаимодействия и эффективного взаимодействия посредством коллективных бозонных возбуждений. В другой категории предполагается, что система близка к моттовскому режиму и

на спаривание должна влиять тенденция перехода к моттовскому диэлектрику [226, 442].

Данная работа принадлежит к первой категории. Даже в рамках этой категории существует несколько, казалось бы, разных подходов: спин-флуктуационные подходы на основе приближения хаотических фаз (Random Phase Approximation-type Spin-Fluctuation, RPA-SF) [198–200, 394, 395, 443, 444], подход функциональной ренормгруппы (Functional Renormalization Group, fRG) [445–449] и аналитическая (логарифмическая) ренормгруппа, основанная на “минимальной” модели пниктидов [193, 221, 450, 451], в которой взаимодействие в каждом канале спаривания ограничено главными угловыми гармониками в этом канале. Что интересно, до сих пор все три подхода давали согласующиеся результаты по симметрии спаривания и структуре параметра порядка в дырочно- и электронно-допированных соединениях железа. А именно, все три подхода дают главную куперовскую нестабильность при малом и среднем уровне допирования в s -канале с параметром порядка, который, если усреднить его на индивидуальных Ферми-поверхностях, меняет знак между дырочными и электронными карманами - параметр порядка $s_{\pm}$ -типа. Щель $s_{\pm}$ -типа в общем случае изменяется на каждом Ферми-кармане. Если соединения железа рассматривать как двумерные системы (т.е. пренебрегается зависимостью взаимодействий от k_z), то вариации щели сильнее на электронной Ферми-поверхности и могут быть достаточно сильны, чтобы щель там имела нули. Все три подхода также сходятся к тому, что щель с нулями вероятнее всего реализуется в электронно-допированных соединениях, в то время как в допированных дырками сверхпроводниках щель не имеет нулей. Такой расширенный s -тип согласуется с данными ARPES, где наблюдают лишь небольшие изменения щели вдоль Ферми-поверхностей, центрированных на точке $(0, 0)$, и, таким образом, исключают d -тип симметрии, который имел бы там нули.

Однако, в сильно допированном дырками соединении железа KFe_2As_2 , в котором остаются только дырочные Ферми-карманы [452, 453], различные экс-

перименты [454, 455] указывают на присутствие нулей щели, что для данной геометрии Ферми-поверхности согласуется с d -типом параметра порядка. Такой тип симметрии был получен в fRG [447] для сильно допированного дырками соединения KFe_2As_2 . Анализ в рамках RPA-SF для этого случая [444] показал наличие притяжения с близкой величиной в s - и d -каналах.

Сверхпроводимость с достаточно высоким значением $T_c \sim 30$ К была найдена в материале AFe_2Se_2 ($\text{A}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) [456], в котором присутствуют только электронные Ферми-карманы [457]. Экспериментальные данные согласуются с полной щелью, но её симметрия и структура неизвестны. Формализмы RPA-SF и fRG применялись [443, 449, 458] для изучения сверхпроводимости и в этом случае. Их результаты в этом предельном случае снова согласуются: оба предсказывают, что параметр порядка должен иметь $d_{x^2-y^2}$ -симметрию, т.е. он должен иметь различные знаки на двух электронных карманах. Другие подходы, однако, предсказывают сверхпроводимость обычного s -типа [459, 460]. Также были предложены варианты параметра порядка с более сложной структурой, получающейся при учёте спин-орбитального взаимодействия и трёхмерности структуры [461, 462].

Разнообразие парных состояний приводит к вопросу о том, являются ли физика соединений железа универсальной, т.е. есть ли один механизм куперовского спаривания. Далее мы покажем, что все полученные до сих пор парные состояния можно получить из одного универсального сценария спаривания. Мы сформулируем эффективную низкоэнергетическую модель с небольшим числом параметров и покажем, что результаты подходов в приближении хаотических фаз и функциональной ренормгруппы сводятся на низких энергиях к нашей модели и отличаются только параметрами. Мы рассматриваем соединения железа как квазидвумерные и раскладываем куперовское взаимодействие в плоскости xy в s - и d -каналах на вклады от рассеяния между различными Ферми-поверхностями, а затем анализируем, как каждое рассеяние изменяется с допированием и при изменении параметров. Каждое взаимодействие очень

хорошо описывается низшими угловыми гармониками. Мы используем это приближение, приближение главных угловых гармоник (Leading Angular Harmonics Approximation, ЛАНА), для анализа взаимосвязи между взаимодействиями с и без спин-флуктуационной компоненты, природы притяжения в каналах $s_{\pm}$ и $d_{x^2-y^2}$, конкуренцию между ними, угловую зависимость $s_{\pm}$ -типа параметра порядка и условий, при которых в $s_{\pm}$ -щели возникают нули, а также для изучения зависимости спаривания от допирования в дырочно- и электронно-допированных соединениях железа. Мы покажем, что спаривание при малом (и среднем) и при очень большом допировании качественно отличаются: когда присутствуют электронные и дырочные карманы, спаривание возникает за счёт взаимодействия фермионов на дырочных и электронных карманах, в то время, как спаривание при большом допировании происходит из-за прямого взаимодействия только между электронными или только дырочными карманами.

Здесь стоит подробно остановиться на сравнении RPA-SF и ренормгруппового подходов. Эти два подхода отличаются предположением о том, каковы энергетические масштабы магнетизма и сверхпроводимости. В подходе ренормгруппы предполагается, что магнетизм и сверхпроводимость формируются одними и теми же низкоэнергетическими фермионами и должны рассматриваться на равных, начиная с модели, в которой есть только взаимодействия типа плотность-плотность и обмен между фермионами. Тогда спин-флуктуационная часть взаимодействия развивается вместе с куперовской вершиной - шаг за шагом строится “паркетная” перенормировка одновременно в каналах частица-частица и частица-дырка [221, 445, 451]. В подходе RPA-SF [198–200, 395] предполагается, что магнетизм предваряет сверхпроводимость и происходит от фермионов на энергиях, сопоставимых с шириной зоны, что находится выше верхней границы подхода ренормгруппы. В этом случае спин-флуктуационная компонента должна быть включена в “голое” взаимодействие, которое затем не должно перенормироваться в канале частица-дырка. В этой ситуации остаются важными только перенормировки в канале частица-частица, которые всегда

идут от низкоэнергетических фермионов, и подход ренормгруппы становится эквивалентен теории БКШ. Не существует хорошего оправдания выбору определённого набора диаграмм для перенормировки взаимодействий на высоких энергиях, но во многих случаях RPA, которое является суммированием серии диаграмм вершинных перенормировок в спиновом и зарядовом каналах и имеет нестабильность стонеровского типа на некоем векторе $\mathbf{Q}$, даёт довольно разумные эффективные взаимодействия, в особенности, вблизи магнитной нестабильности.

Какой из двух подходов лучше описывает сверхпроводимость в соединениях железа - это ещё большой вопрос. Величина магнитного момента в упорядоченном состоянии невелика, по крайней мере в пниктидах, и магнитные возбуждения, измеренные в нейтронном рассеянии, затухают на энергиях 100–150 мэВ. Такое поведение согласуется с идеей того, что магнетизм возникает от низкоэнергетических фермионов. Уравнения однопетлевой паркетной ренормгруппы для связанных потоков вершин строго обоснованы только когда дисперсия фермионов может быть приближённо записана как k^2 . Это не справедливо в большой области энергий, т.е. верхний предел ренормгруппового подхода соответствует только небольшой части ширины зоны.

Действительно ли эти два подхода фундаментально отличаются? Чтобы сравнить их, мы напомним, что потоки магнитных и сверхпроводящих величин остаются связанными только до энергий порядка E_F . На энергиях $E < E_F$, каждая вершина “течёт” независимо и поток куперовской вершины Γ_{sc} становится таким же, как и в теории БКШ ($d\Gamma_{sc}/d\log E = \Gamma_{sc}^2$). С этой точки зрения, настоящий результат ренормгруппы в отношении сверхпроводимости состоит в перенормировке куперовского взаимодействия из его голого значения до перенормированного на энергиях порядка E_F . Естественно, это справедливо только если поток ренормгруппы не достигает фиксированной точки на E_F , но это вряд ли случай сверхпроводников на основе железа, поскольку T_c и T_N малы, по сравнению с $E_F \sim 0.1$ эВ. Достаточно правдоподобно (хотя и не гаранти-

ровано) выглядит то, что независимые от угла компоненты перенормированных взаимодействий могут быть воспроизведены выбором неких других (чем изначальные) параметров в орбитальном базисе, т.е. эффекты потока ренормгруппы могут быть поглощены в модификацию зонной теории. То же самое справедливо и для подхода RPA-SF - независимая от угла компонента нового спин-флуктуационного взаимодействия скорее всего может быть воспроизведена перенормировкой параметров, хотя необходимые величины параметров U , U' , J и J' могут оказаться довольно экзотическими.

Ситуация с зависящими от угла компонентами взаимодействия более сложная. Ренормгруппа со связанными магнитными и сверхпроводящими вершинами может быть точно обоснована в слабой связи только если угловая зависимость вершин слабая и сохраняется при действии ренормгруппы. Это именно тот путь, которым был получен поток аналитической ренормгруппы [451]. Функциональная ренормгруппа включает некоторые вариации угловой зависимости взаимодействий, но это находится за пределами обоснованной логарифмической точности. Учитывая, что функциональная ренормгруппа и аналитическая ренормгруппа приводит к практически идентичным результатам, похоже, что единственный эффект перенормировок ренормгруппы до энергии E_F - это изменение масштаба общей величины взаимодействий. Если эффект добавления спин-флуктуационной компоненты ко взаимодействиям в подходе RPA-SF также в основном приводит к изменению масштаба величины взаимодействий, тогда оба подхода не являются фундаментально разными.

Это не означает, что подходы ренормгруппы и RPA-SF эквивалентны. Это скорее означает, что результат применения обоих формализмов - это новая "голая" теория с новыми параметрами. Это новые параметры действительно немного отличаются в RPA-SF и ренормгруппе, но отличие не должно играть роли, если симметрия спаривания и структура сверхпроводящей щели довольно устойчивы к вариациям параметров. Это ещё одна проблема, которую можно анализировать в формализме ЛАНА, поскольку он позволяет непрерывно изме-

нять параметры теории.

В конце главы мы рассмотрим вопрос симметрии щели в соединении KFe_2As_2 , которое является сверхпроводящим пниктидом только с дырочными Ферми-поверхностями. Предыдущие теоретические исследования в основном приводили к щели d -типа, поскольку транспортные и термодинамические измерения указывали на присутствие линий нулей параметра порядка. Однако, такая щель несовместима с результатами измерений лазерной ARPES. Мы получили сверхпроводимость A_{1g} -типа с нулями щели, вызванную немагнитными внутри- и межзонными взаимодействиями между фермионами в зонах, формирующих дырочные карманы. Параметр порядка имеет разный знак на дырочных карманах, а также угловую зависимость $\cos 4\theta$ и случайные нули на одном или нескольких дырочных карманах. Существенная угловая зависимость является следствием практической вырожденности межзонных и внутризонных взаимодействий.

10.1. Спин-флуктуационная теория сверхпроводящего спаривания

Исходно точкой формализма ЛАНА является куперовская вершина $\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)$. Здесь мы обсудим, как она возникает в теории сверхпроводящего спаривания за счёт спин-флуктуационного взаимодействия.

Прежде чем переходить к изложению многоорбитального варианта теории, опишем как строится спин-флуктуационная теория спаривания в однозонном случае с гамильтонианом Хаббардовского взаимодействия $H = \sum_f U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow}$, где U есть одноузельное кулоновское отталкивание (Хаббардовское), а $n_{f\sigma}$ - оператор числа частиц на узле f со спином σ . Сверхпроводящее взаимодействие в синглетном канале определяется куперовской вершиной $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$, которая в духе теории Берка-Шриффера [424, 463, 464] даётся диаграммным рядом в приближении RPA, изображенным на Рисунке 10.1. Базовым элементом является элек-

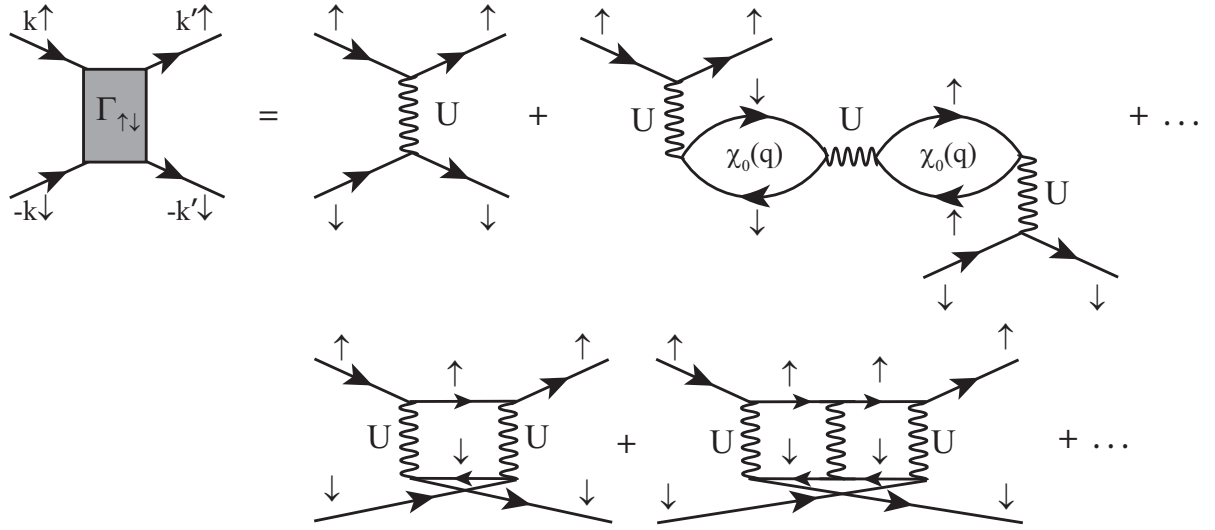


Рис. 10.1. Куперовская вершина $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ для синглетного сверхпроводящего состояния в приближении RPA.

трон-дырочная петля - “голая” восприимчивость $\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}})}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{p}}}$, где $f(\varepsilon_{\mathbf{p}})$ - фермиевская функция распределения для дисперсии электронов $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ и ω_n - мацубаровская частота. Сумма петель и лестниц даёт

$$\begin{aligned} \Gamma_{\uparrow\downarrow} &= U(1 + U^2\chi_0^2 + \dots) + U^2\chi_0(1 + U\chi_0 + \dots) = \\ &= \frac{U}{1 - U^2\chi_0^2} + \frac{U^2\chi_0}{1 - U\chi_0} = \frac{3}{2}U^2\chi_s - \frac{1}{2}U^2\chi_c + U, \end{aligned} \quad (10.1)$$

где спиновая и зарядовая восприимчивости есть

$$\chi_{s,c} = \frac{\chi_0}{1 \mp U\chi_0}. \quad (10.2)$$

В системе возникает магнитная нестабильность если выполняется критерий Стонера $1 = U\chi_0(\mathbf{q}, \omega = 0)$. Ферромагнитная соответствует $\mathbf{q} = 0$, а интересующая нас АФМ нестабильность возникает на антиферромагнитном волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$. Если мы уйдём непосредственно от нестабильности, например, с помощью допирования, дальний порядок не возникнет, но $U\chi_0(\mathbf{q}, \omega = 0)$ будет близко к единице, что приведет к большой величине спиновой восприимчивости χ_s и, соответственно, к очень большому её вкладу в куперовскую вершину $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$. Однако, в отличие от электрон-фоонного взаимодействия в теории БКШ, $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ приводит не к притяжению, а к эффективному отталкивательному взаимодействию $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Если записать гамильтониан системы в

среднем поле выделив в явном виде сверхпроводящее взаимодействие, $H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\bar{\sigma}}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma} a_{\mathbf{k}'\bar{\sigma}}$, где $\bar{\sigma} = -\sigma$, $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ - оператор рождения электрона с импульсом $\mathbf{k}$ и спином σ , то уравнение на щель будет иметь вид

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{2E_{\mathbf{k}'}} \Delta_{\mathbf{k}'}(T) \tanh \frac{E_{\mathbf{k}'}}{2T}, \quad (10.3)$$

где $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$. В случае электрон-фононного взаимодействия с константой связи g_{e-ph} в теории БКШ имеем $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -g_{e-ph}^2$ и уравнение (10.3) имеет решение $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0(T)$, что и соответствует s -типу сверхпроводящего параметра порядка. В соединениях железа орбитальные флуктуации, усиленные электрон-фононным взаимодействием, могут приводить к знакопостоянному решению, которое в многозонном случае называют s_{++} состоянием [227, 228]. С другой стороны, для спин-флуктуационного взаимодействия $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') > 0$ и s -тип решения не удовлетворяет уравнению (10.3). Для спиновых флуктуаций $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ имеет максимум на волновом векторе $\mathbf{Q}$, и если мы воспользуемся очень грубым приближением, что $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = |\lambda| \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{Q})$, то (10.3) перейдет в

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = -|\lambda| \frac{\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}(T)}{2E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2T}. \quad (10.4)$$

Очевидно, у этого уравнения есть решение, когда $\Delta_{\mathbf{k}}$ и $\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ имеют разные знаки. В простейшем случае $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ и уравнение переходит в $1 = |\lambda| \frac{1}{2E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2T}$. Решением будет щель, меняющая знак на векторе $\mathbf{Q}$. Если этот вектор соединяет различные зоны квазичастиц (Ферми-поверхности, принадлежащие различным зонам), что и реализуется в соединениях железа, то решение такого типа с симметрией A_{1g} называется $s_{\pm}$ состоянием [191]. Конкурирующими будут состояния с симметрией B_{1g} - d_{xy} и $d_{x^2-y^2}$ типы параметра порядка.

Куперовская вершина в многоорбитальном случае выглядит подобно одно-

зонному случаю (10.1),

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow}^{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \left[\frac{3}{2} \hat{U}_s \hat{\chi}_s(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \hat{U}_s - \frac{1}{2} \hat{U}_c \hat{\chi}_c(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \hat{U}_c + \frac{1}{2} \hat{U}_s + \frac{1}{2} \hat{U}_c \right]_{l_1 l_2 l_3 l_4}, \quad (10.5)$$

где $\hat{\chi}_{s,c} = \left(\hat{1} \mp \hat{\chi}_0 \hat{U}_{s,c} \right)^{-1} \hat{\chi}_0$ - спиновая (s) и зарядовая (c) восприимчивости, $\hat{U}_{s,c}$ - матрицы взаимодействия в спиновом и зарядовом каналах, $l_1 - l_4$ - орбитальные индексы.

Если же спин-флуктуационная компонента отсутствует, то выражение для вершины существенно упрощается:

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow}^{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \left[\frac{1}{2} \hat{U}_s + \frac{1}{2} \hat{U}_c \right]_{l_1 l_2 l_3 l_4}. \quad (10.6)$$

Необходимость строить теорию в орбитальном представлении вызвана тем, что именно в нём взаимодействие Хаббардовского типа, содержащееся в (5.12), остаётся локальным. Сверхпроводящие пары, однако, формируются на уровне зон, а не орбиталей, поэтому мы должны преобразовать куперовскую вершину в зонное представление с помощью матричных элементов $\varphi_{\mathbf{k}m}^\mu$ (5.9),

$$\tilde{\Gamma}_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4} \varphi_{\mathbf{k}l_2}^{\mu*} \varphi_{-\mathbf{k}l_3}^{\mu*} \Gamma_{\uparrow\downarrow}^{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) \varphi_{\mathbf{k}'l_1}^\nu \varphi_{-\mathbf{k}'l_4}^\nu. \quad (10.7)$$

Как показывают расчёты, $\tilde{\Gamma}_{\mu\nu}$ спадает быстро с увеличением частоты, на частотах много меньше ширины зоны. Хотя уравнение на сверхпроводящую щель зависят, вообще говоря, от $\text{Im} \tilde{\Gamma}_{\mu\nu}$, импульсы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, дающие главный вклад в спаривание, должны соответствовать малым частотам, где эти импульсы лежат вблизи Ферми-поверхности. Аналогично тому, как для электрон-фоонного взаимодействия константа связи определяется интегралом по частотам от функции Элиашберга $\alpha^2 F(\omega)$, здесь, используя соотношения Крамерса-Кронига получаем

$$\int_0^\infty d\omega \frac{\text{Im} \tilde{\Gamma}_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)}{\omega} = \text{Re} \tilde{\Gamma}_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega = 0) \equiv \Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (10.8)$$

Таким образом, задача вычисления эффективного спаривающего взаимодей-

ствия сводится к нахождению реальной части $\tilde{\Gamma}_{\mu\nu}$ на нулевой частоте, что существенно облегчает вычисления.

Куперовская вершина $\Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ содержит все компоненты спаривания для интересующей нас тетрагональной группы симметрии D_{4h} : A_{1g} (s -тип симметрии щели), B_{1g} ($d_{x^2-y^2}$ -тип), B_{2g} (d_{xy} -тип) и A_{2g} (g -тип). Параметр порядка s -типа $\Delta_s(k_x, k_y)$ симметричен относительно замен $k_x \rightarrow \pm k_x, k_y$, а параметр порядка $d_{x^2-y^2}$ -типа $\Delta_{d_{x^2-y^2}}(k_x, k_y)$ изменяет знак при замене $k_x \rightarrow k_y$.

Если записать параметр порядка $\Delta_{\mathbf{k}}$ в виде произведения амплитуды Δ_0 на угловую часть $g_{\mathbf{k}}$, то можно определить безразмерный параметр связи λ как результат решения задачи на собственные значения (λ) и собственные вектора ($g_{\mathbf{k}}$) [200]:

$$\lambda g_{\mathbf{k}} = - \sum_{\nu} \oint_{\nu} \frac{d\mathbf{k}'_{\parallel}}{2\pi} \frac{1}{2\pi v_{F\mathbf{k}'}} \Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') g_{\mathbf{k}'}, \quad (10.9)$$

где $v_{F\mathbf{k}}$ - скорость Ферми, контурный интеграл берётся по $\mathbf{k}'_{\parallel}$, принадлежащему ν -той Ферми-поверхности, а μ однозначно определяется тем, на какой Ферми-поверхности лежит импульс $\mathbf{k}$. Положительные λ соответствуют притяжению, наибольшей из них будет соответствовать максимальное T_c , т.е. наиболее выгодная симметрия спаривания и щели, определяемая $g_{\mathbf{k}}$. Выстроив λ по убыванию, можно увидеть, какие симметрии и структуры щелей будут наиболее выгодны и какие будут конкурировать.

10.2. Формализм ЛАНА

С точки зрения механизма сверхпроводящего спаривания, как спин-флуктуационные теории [198–200] и их самосогласованные обобщения в приближении FLEX (FLuctuation-EXchange) [224, 397, 465], так и ренорм-групповой анализ [221, 446], являются довольно сложными численными методами. Но поскольку для спаривания важна амплитуда рассеяния в канале частица-частица на Ферми-поверхности, угловую зависимость этой амплитуды можно разложить

по тем же гармоникам, что и $\Delta_{\mathbf{k}}$. Такой метод ЛАНА (Lowest Angular Harmonics Approximation, приближение низших угловых гармоник) позволяет с помощью ограниченного набора параметров и без привлечения сложных расчётов описать спаривание в соединениях железа как при малом допировании, так и в случаях экстремального допирования электронами или дырками [7, 11, 12]. Основное предположение ЛАНА состоит в том, что куперовская вершина $\Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ факторизуется по импульсам $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ и может быть представлена как

$$\Gamma^{\eta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{m,n} C_{mn}^{\eta} \Psi_m^{\eta}(\mathbf{k}) \Psi_n^{\eta}(\mathbf{k}'), \quad (10.10)$$

где индекс η соответствует группе симметрии параметра порядка, C_{mn}^{η} - коэффициенты, а функции Ψ и есть разложение по угловым гармоникам. В зависимости от η , разложения имеют различную функциональную форму. Так, например для A_{1g} и B_{1g} представлений $\Psi_m^{A_{1g}}(\mathbf{k}) = a_m + b_m \cos 4\phi_{\mathbf{k}} + c_m \cos 8\phi_{\mathbf{k}} + \dots$ и $\Psi_m^{B_{1g}}(\mathbf{k}) = a_m^* \cos 2\phi_{\mathbf{k}} + b_m^* \cos 6\phi_{\mathbf{k}} + c_m^* \cos 10\phi_{\mathbf{k}} + \dots$. После этого задачу можно свести к нахождению функции Γ_{ab}^{η} , где a и b соответствуют номерам Ферми-поверхностей. Так, на Рисунке 5.7, это дырочные $\alpha_{1,2}$ и электронные $\beta_{1,2}$ Ферми-карманы. Коэффициенты C_{mn}^{η} и все a, b и т.д., входящие в разложение Ψ , можно получить из сравнения с расчётом полной $\Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ с помощью уравнений (10.5) и (10.7). Сравнение результатов для параметра порядка показало, что подход ЛАНА очень хорошо воспроизводит результаты RPA-SF [11].

Основная идея ЛАНА - смоделировать $\Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ простой функцией двух импульсов так, что уравнение на щель может быть решено и проанализировано аналитически. В купратах многие исследователи описывали B_{1g} -тип щели первыми гармониками $\cos k_x - \cos k_y$ ($\cos 2\phi$ для круговой Ферми-поверхности) и пренебрегали высшими гармониками $\cos 6\phi$, $\cos 10\phi$ и т.д. Малость членов $\cos(4n+2)\phi$ с $n \geq 1$ не следует из какого-либо физического принципа, но численно приближение $\cos 2\phi$ работает очень хорошо.

Такое приближение должно ещё лучше работать в соединениях железа, потому что все Ферми-поверхности там небольшие и практически круг-

лые, хоть и электронные обладают небольшой эллиптичностью. По аналогии с купратами можно попробовать описать собственную волновую функцию представления A_{1g} константой на каждой Ферми-поверхности, а параметр порядка B_{1g} -симметрии - функцией $\cos 2\phi$. Существует, однако, одна особенность - такое приближение справедливо только для параметра порядка на дырочных Ферми-поверхностях, центрированных на точках $k_x = \pm k_y$, т.е. на $\mathbf{k} = (0, 0)$ и $\mathbf{k} = (\pm\pi, \pm\pi)$. Электронные Ферми-поверхности центрированы на точках $X = (\pi, 0)$ и $Y = (0, \pi)$, которые не симметричны относительно операции $k_x \rightarrow \pm k_y$. Как результат, некоторые функции A_{1g} -типа, например, $\cos k_x + \cos k_y$, ведут себя как $\pm \cos 2\theta$, где θ - это угол на электронном кармане, а некоторые функции B_{1g} -типа, как, например, $\cos k_x - \cos k_y$, являются константами на электронных карманах. В последнем случае единственным “воспоминанием” о B_{1g} -типе является отличие знаков этих констант на двух электронных Ферми-поверхностях.

Следствием этого является, в рамках ЛАНА, то, что зависящие от угла члены $\cos 2\theta$ должны появляться в A_{1g} - и B_{1g} -каналах куперовской вершины со сравнимой амплитудой. Простой анализ показывает, что явный вид вершины зависит от того, находятся ли фермионы на дырочной или электронной Ферми-поверхностях. Для вершины фермионов на дырочном кармане имеем в ЛАНА:

$$\Gamma_{hh}(\phi, \phi') = A_{hh} + \tilde{A}_{hh} \cos 2\phi \cos 2\phi', \quad (10.11)$$

где ϕ и ϕ' - это углы на дырочной Ферми-поверхности (отсчитываются от оси k_x), члены A и $\tilde{A}$ - это A_{1g} - и B_{1g} -компоненты, соответственно. Для куперовской вершины фермионов с дырочной и электронной Ферми-поверхностей имеем:

$$\Gamma_{eh}(\phi, \theta) = A_{eh} (1 + 2\alpha \cos 2\theta) + \tilde{A}_{eh} \cos 2\phi (1 + 2\tilde{\alpha} \cos 2\theta), \quad (10.12)$$

где θ - это угол на электронной Ферми-поверхности (также отсчитывается от оси k_x). И для вершины фермионов на электронном кармане получаем в ЛАНА:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ee}(\theta, \theta') &= A_{ee} [1 + 2\alpha (\cos 2\theta + \cos 2\theta') + 4\beta \cos 2\theta \cos 2\theta'] + \\ &+ \tilde{A}_{ee} [1 + 2\tilde{\alpha} (\cos 2\theta + \cos 2\theta') + 4\tilde{\beta} \cos 2\theta \cos 2\theta']. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Здесь компоненты A_{1g} - и B_{1g} -типа выглядят идентично, но они по разному преобразуются при переходе от внутризонного к межзонному каналам с участием электронных карманов.

Далее представлен результат ЛАНА для $\Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ для Ферми-поверхности, состоящей из двух дырочных и двух электронных карманов. Обобщение на случай трёх дырочных карманов тривиально. Имеем

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{h_i h_j}(\phi, \phi') &= U_{h_i h_j} + \tilde{U}_{h_i h_j} \cos 2\phi \cos 2\phi', \\
 \Gamma_{h_i e_j}(\phi, \theta) &= U_{h_i e} (1 \pm 2\alpha_{h_i e} \cos 2\theta) + \tilde{U}_{h_i e} (\pm 1 + 2\tilde{\alpha}_{h_i e} \cos 2\theta) \cos 2\phi, \\
 \Gamma_{e_i e_i}(\theta, \theta') &= U_{ee} [1 \pm 2\alpha_{ee} (\cos 2\theta + \cos 2\theta') + 4\beta_{ee} \cos 2\theta \cos 2\theta'] + \\
 &\quad + \tilde{U}_{ee} [1 \pm 2\tilde{\alpha}_{ee} (\cos 2\theta + \cos 2\theta') + 4\tilde{\beta}_{ee} \cos 2\theta \cos 2\theta'], \\
 \Gamma_{e_1 e_2}(\theta, \theta') &= U_{ee} [1 + 2\alpha_{ee} (\cos 2\theta - \cos 2\theta') - 4\beta_{ee} \cos 2\theta \cos 2\theta'] + \\
 &\quad + \tilde{U}_{ee} [-1 - 2\tilde{\alpha}_{ee} (\cos 2\theta - \cos 2\theta') + 4\tilde{\beta}_{ee} \cos 2\theta \cos 2\theta'],
 \end{aligned} \tag{10.14}$$

где верхний знак соответствует электронному карману e_1 , а нижний - электронному карману e_2 ; $i, j \in 1, 2$ - это индексы зон. Внутризонные компоненты A_{1g} -типа $U_{h_i h_i}$ и U_{ee} представляют собой полные внутри- и межорбитальные кулоновские (хаббардовские) взаимодействия. Они положительны, т.е. соответствуют отталкиванию. Знак $U_{h_i e}$ определяется относительными величинами внутриорбитального U и межорбитального V членов. Для простейшей (“игрушечной”) модели двух орбиталей, которые при гибридизации дают одну дырочную и одну электронную Ферми-поверхности, $U_{he} > 0$ если внутриорбитальное U больше межорбитального V , но $U_{he} < 0$, если $V > U$ [221]. Внутриорбитальное взаимодействие как правило самое большое и ниже мы предполагаем, что U_{he} положительно. Если, однако, $V > U$, взаимодействие между электронами и дырками будет притяжением, что благоприятствует обычному s -типу сверхпроводимости [227]. Знак компоненты B_{1g} -типа взаимодействия ($\tilde{U}_{ee, hh}$) определяется более сложным соотношением между U и J .

Далее мы будем использовать вместо U_{ij} безразмерные взаимодействия

$$u_{ij} = U_{ij}(N_{F,i}N_{F,j})^{1/2}, \quad (10.15)$$

где $N_{F,i}$ - плотность состояний на уровне Ферми для i -ой зоны.

10.2.1. Уравнение на щель

Уравнение на щель в виде проблемы на собственные значения (10.9) можно записать как

$$-\sum_j \oint_{C_j} \frac{dk'_{\parallel}}{2\pi} \frac{1}{2\pi v_F(\mathbf{k}'_F)} \Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F) \Delta_{\alpha,j}(\mathbf{k}'_F) = \lambda_{\alpha} L \Delta_{\alpha,i}(\mathbf{k}_F), \quad (10.16)$$

где α - это тип симметрии и равен или A_{1g} (s -тип, включающий решения $s_{\pm}$ и s_{++}), или B_{1g} ($d_{x^2-y^2}$ -тип), а $L \sim \ln\left(\frac{E_F}{T_c}\right)$. Для круглой Ферми-поверхности уравнение (10.16) упрощается и имеет следующий вид:

$$-\sum_j \int_0^{2\pi} \frac{d\psi'}{2\pi} N_{F,j} \Gamma_{ij}(\psi, \psi') \Delta_{\alpha,j}(\psi') = \lambda_{\alpha} L \Delta_{\alpha,i}(\psi) \quad (10.17)$$

где $N_{F,j} = m_j/2\pi$ - это плотность состояний на Ферми-поверхности j , ψ и ψ' - это углы вдоль i -ой и j -ой Ферми-поверхностей, соответственно.

Уравнения (10.16) и (10.17) - это интегральные уравнения, которые в общем случае могут быть решены только численно. Выбирая M -точек на каждой Ферми-поверхности, получаются M собственных функций и M различных собственных значений λ в каждом из каналов спаривания. Для A_{1g} -типа некоторые собственные функции соответствуют параметру порядка s_{++} -типа, а другие - $s_{\pm}$ -типу. Собственная функция, соответствующая наибольшему положительному λ_{α} описывает куперовское состояние ниже T_c .

В ЛАНА уравнение на Δ_{α_i} и λ_{α} такое же, как и уравнение (10.17). Однако, в этом случае нам не надо решать интегральные уравнения на параметр порядка, так как для вершины Γ_{ij} , определяемой уравнениями (10.14), параметры порядка для A_{1g} - и B_{1g} -симметрий имеют только по четыре компоненты

каждая. В случае двух дырочных карманов уравнения на параметр порядка A_{1g} -типа имеет вид:

$$\begin{aligned}\Delta_{h_1}(\phi) &= \Delta_{h_1}, \quad \Delta_{e_1}(\theta) = \Delta_e + \bar{\Delta}_e \cos 2\theta, \\ \Delta_{h_2}(\phi) &= \Delta_{h_2}, \quad \Delta_{e_2}(\theta) = \Delta_e - \bar{\Delta}_e \cos 2\theta,\end{aligned}\quad (10.18)$$

а для B_{1g} -типа:

$$\begin{aligned}\Delta_{h_1}(\phi) &= \Delta_{h_1} \cos 2\phi, \quad \Delta_{e_1}(\theta) = \Delta_e + \bar{\Delta}_e \cos 2\theta, \\ \Delta_{h_2}(\phi) &= \Delta_{h_2} \cos 2\phi, \quad \Delta_{e_2}(\theta) = -\Delta_e + \bar{\Delta}_e \cos 2\theta.\end{aligned}\quad (10.19)$$

Чтобы получить λ_α и соответствующие собственные функции нам необходимо записать и диагонализировать матричные уравнения размерности 4×4 . Для этого удобно ввести “голые” куперовские вершины Δ_i^0 и решить обычные лестничные уравнения на полную вершину Δ_i . Представим их в виде векторов $\mathbf{\Delta} = (\Delta_{h_1}, \Delta_{h_2}, \Delta_e, \bar{\Delta}_e)^T$ и $\mathbf{\Delta}^0 = (\Delta_{h_1}^0, \Delta_{h_2}^0, \Delta_e^0, \bar{\Delta}_e^0)^T$. Для A_{1g} -симметрии получаем

$$\begin{pmatrix} 1 + u_{h_1 h_1} L & u_{h_1 h_2} L & 2u_{h_1 e} L & 2\alpha_{h_1 e} u_{h_1 e} L \\ u_{h_1 h_2} L & 1 + u_{h_2 h_2} L & 2u_{h_2 e} L & 2\alpha_{h_2 e} u_{h_2 e} L \\ u_{h_1 e} L & u_{h_2 e} L & 1 + 2u_{ee} L & 2\alpha_{ee} u_{ee} L \\ 2\alpha_{h_1 e} u_{h_1 e} L & 2\alpha_{h_2 e} u_{h_2 e} L & 4\alpha_{ee} u_{ee} L & 1 + 4\beta_{ee} u_{ee} L \end{pmatrix} \cdot \mathbf{\Delta} = \mathbf{\Delta}^0. \quad (10.20)$$

Собственные значения λ_s и соответствующие собственные функции получаются при диагонализации этой матрицы. Результат можно представить как

$$(\hat{1} - \hat{\lambda}_s L) \cdot \mathbf{\Delta} = \mathbf{\Delta}^0, \quad (10.21)$$

где $\hat{\lambda}_s$ - матрица собственных значений λ_s .

Для B_{1g} -симметрии имеем

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{\tilde{u}_{h_1 h_1}}{2} L & \frac{\tilde{u}_{h_1 h_2}}{2} L & 2\tilde{u}_{h_1 e} L & 2\tilde{\alpha}_{h_1 e} \tilde{u}_{h_1 e} L \\ \frac{\tilde{u}_{h_1 h_2}}{2} L & 1 + \frac{\tilde{u}_{h_2 h_2}}{2} L & 2\tilde{u}_{h_2 e} L & 2\tilde{\alpha}_{h_2 e} \tilde{u}_{h_2 e} L \\ \frac{\tilde{u}_{h_1 e}}{2} L & \frac{\tilde{u}_{h_2 e}}{2} L & 1 + 2\tilde{u}_{ee} L & 2\tilde{\alpha}_{ee} \tilde{u}_{ee} L \\ \tilde{\alpha}_{h_1 e} \tilde{u}_{h_1 e} L & \tilde{\alpha}_{h_2 e} \tilde{u}_{h_2 e} L & 4\tilde{\alpha}_{ee} \tilde{u}_{ee} L & 1 + 4\tilde{\beta}_{ee} \tilde{u}_{ee} L \end{pmatrix} \cdot \mathbf{\Delta} = \mathbf{\Delta}^0. \quad (10.22)$$

Диагонализуя эту матрицу, мы получаем λ_d и соответствующие собственные функции.

Отметим, что уравнения на λ_s и λ_d - это алгебраические уравнения четвёртого порядка. Следовательно, существует только четыре параметра, которые определяют эффективные константы связи и структуру щели в каждом канале. Это совпадает с минимальным числом параметров взаимодействия в исходной орбитальной модели.

Ситуация упрощается ещё больше, если две дырочные Ферми-поверхности принять совпадающими, т.е. положить $u_{h_i h_j} = u_{hh}$, $u_{h_1 e} = u_{h_2 e} = u_{he}$ и $\alpha_{h_1 e} = \alpha_{h_2 e} = \alpha$, что достаточно хорошо согласуется с подгонкой под результаты подхода RPA-SF. Тогда $\Delta_{h_1} = \Delta_{h_2} = \Delta_h$ и матричное уравнение на сверхпроводящую щель уменьшается до размерности 3×3 , что уже может быть легко проанализировано аналитически. В случае A_{1g} -типа параметра это матрица

$$\begin{pmatrix} 1 + 2u_{hh}L & 2u_{he}L & 2\alpha_{he}u_{he}L \\ 2u_{he}L & 1 + 2u_{ee}L & 2\alpha_{ee}u_{ee}L \\ 4\alpha_{he}u_{he}L & 4\alpha_{ee}u_{ee}L & 1 + 4\beta_{ee}u_{ee}L \end{pmatrix}, \quad (10.23)$$

а для случая B_{1g} -симметрии матрица равна

$$\begin{pmatrix} 1 + \tilde{u}_{hh}L & 2\tilde{u}_{he}L & 2\tilde{\alpha}_{he}\tilde{u}_{he}L \\ \tilde{u}_{he}L & 1 + 2u_{ee}L & 2\tilde{\alpha}_{ee}\tilde{u}_{ee}L \\ 2\tilde{\alpha}_{he}\tilde{u}_{he}L & 4\tilde{\alpha}_{ee}\tilde{u}_{ee}L & 1 + 4\tilde{\beta}_{ee}\tilde{u}_{ee}L \end{pmatrix}. \quad (10.24)$$

В случае трёх дырочных Ферми-поверхностей необходимо вводить три различных Δ_{h_i} и матричное уравнение на параметр порядка становится размерности 5×5 .

10.2.2. Общий анализ

Перед тем, как идти дальше, мы сделаем простой анализ матричных 3×3 уравнений (10.23) и (10.24). Сначала рассмотрим уравнения на щель

s -типа (10.23). Предположим пока, что все взаимодействия не зависят от углов, т.е. $\alpha_{he} = 0$, $\alpha_{ee} = 0$ и $\beta_{ee} = 0$. Тогда мы имеем три решения

$$\lambda_s = \begin{cases} 0 \\ -\frac{u_{hh}+u_{ee}}{2} - \sqrt{\left(\frac{u_{hh}-u_{ee}}{2}\right)^2 + u_{he}^2} \\ -\frac{u_{hh}+u_{ee}}{2} + \sqrt{\left(\frac{u_{hh}-u_{ee}}{2}\right)^2 + u_{he}^2} \end{cases} \quad (10.25)$$

Положительная (соответствует притяжению) λ_s появляется только при $u_{eh}^2 > u_{ee}u_{hh}$, т.е. когда межзонное взаимодействие типа парного перескока больше внутризонного отталкивания. Собственная функция, соответствующая положительной λ_s - это знакопеременный параметр порядка $s_{\pm}$ -типа с $\Delta_e = -\Delta_h$, а соответствующий отрицательной λ_s - обычный параметр порядка s^{++} -симметрии с $\Delta_e = \Delta_h$.

Предположим теперь, что угловая зависимость взаимодействий присутствует. Тогда становятся ненулевыми $\pm \cos 2\theta$ -компоненты параметра порядка вдоль электронных карманов. Решая кубическое уравнение на λ_s мы получаем три ненулевых решения. При $u_{eh}^2 > u_{ee}u_{hh}$ решение с самой большой λ_s постепенно эволюционирует от того, что было при не зависящих от угла взаимодействиях. Когда α_{he} , α_{ee} и β_{ee} увеличиваются, $\cos 2\theta$ -компоненты $\bar{\Delta}_e$ увеличиваются и, в какой-то момент, становятся больше Δ_e , что приводит к формированию линий нулей щели. Это один сценарий. Другой сценарий возникает из анализа поведения при $u_{eh}^2 < u_{ee}u_{hh}$, где не существует решения $s_{\pm}$ -типа без угловой зависимости взаимодействий. В этом случае одно из λ_s нулевое. Когда присутствует угловая зависимость взаимодействий, этот компонент λ_s становится конечным и его знак определяется знаком

$$S = u_{ee}u_{hh} (\alpha_{ee}^2 - \beta_{ee}) + u_{eh}^2 (\alpha_{eh}^2 + \beta_{ee} - 2\alpha_{ee}\alpha_{eh}). \quad (10.26)$$

При $S > 0$ получается $\lambda_s > 0$, т.е. в системе возникает притяжение в канале s -типа только за счёт угловой зависимости взаимодействий. Собственные функции, соответствующие такому λ_s имеют линии нулей даже когда угловая зависимость взаимодействий мала. С точки зрения физики, система находит способ

минимизировать эффект сильного внутризонного отталкивания u_{ee} увеличивая $\cos 2\theta$ -компоненты параметра порядка на электронных карманах, поскольку эти компоненты не связаны с независимыми от угла компонентами взаимодействия.

Отметим, что знак S в основном зависит от соотношения между угловой зависимостью электрон-дырочных и электрон-электронных взаимодействий. Когда $\alpha_{eh} \gg \alpha_{ee}$ или когда $\alpha_{ee}^2 > \beta_{ee}$, то $S > 0$ даже при $u_{ee}u_{hh} \gg u_{eh}^2$, т.е. сверхпроводимость $s_{\pm}$ -типа с нулями щели возникает несмотря на то, что внутризонное отталкивание является самым сильным. В частности, S точно положительно если импульсную зависимость имеет только электрон-дырочное взаимодействие, т.е. когда $\alpha_{ee} = \beta_{ee} = 0$. В этом случае $S = u_{eh}^2 \alpha_{eh}^2 > 0$.

Рассмотрим следующий предел, когда дырочные Ферми-поверхности отсутствуют, а присутствуют только электронные. На первый взгляд, спаривание s -типа за счёт отталкивательного взаимодействия не может возникнуть. Однако, при близком рассмотрении, из уравнения (10.23) следует, что даже если мы положим $u_{eh} = 0$, одна из λ_s для s -типа всё равно положительна, если $\beta_{ee} < \alpha_{ee}^2$, не зависимо от того, насколько мала угловая зависимость электрон-электронного взаимодействия. Собственная функция такого решения имеет нули. Физическая причина такая же, как и в прошлом случае: независимая от угла часть взаимодействий соответствует отталкиванию, но система находит способ преодолеть это сильное отталкивание увеличивая $\cos 2\theta$ -компоненты параметра порядка на электронных Ферми-поверхностях.

Рассмотрим уравнение на d -тип щели (10.24). Основные рассуждения аналогичны приведённым для s -типа. А именно, для взаимодействий, независимых от $\cos 2\theta$, решение, соответствующее притяжению в d -канале, существует при $\tilde{u}_{eh}^2 > \tilde{u}_{ee}\tilde{u}_{hh}$. Для зависящих от угла взаимодействий одна из λ_d положительна (притяжение) даже если это условие не выполняется, но $\tilde{S}$, являющееся аналогом S из уравнения (10.26) для d -типа, положительно. Существует, однако, одно критическое отличие от случая s -типа: взаимодействия d -типа $\tilde{u}_{hh}$ и $\tilde{u}_{ee}$ не обязательно положительные. В частности, $\tilde{u}_{ee}$ - это разница между независимыми

Таблица 10.1. Шесть наборов параметров взаимодействия, использованных при сравнении результатов подхода RPA-SF и ЛАНА. Все значения в эВ.

	набор 1	набор 2	набор 3	набор 4	набор 5	набор 6
U	1.67	1.0	1.2	1.0	1.0	1.0
J	0.21	0.25	0.0	0.9	4.0	0.9
V	1.41	0.69	1.2	-1.25	-4.0	-0.7

ми от угла компонентами внутризонного и межзонного взаимодействий между электронными карманами. Как только межзонное взаимодействие становится больше внутризонного (т.е. когда магнитные флуктуации имеют пик на векторе (π, π)), то $\tilde{u}_{ee} < 0$ и система демонстрирует притяжение в d -канале, даже когда d -компонента электрон-дырочного взаимодействия мала. Это особенно важно в случае, когда присутствуют только электронные карманы, т.е. в приближении БКШ $\tilde{u}_{eh}$ можно положить равным нулю. Если в этом случае $\tilde{u}_{ee} < 0$, то возникает решение d -типа с изменяющей между двумя электронными карманами знак щелью. Альтернативная возможность реализуется при $\tilde{u}_{ee} > 0$, но $\tilde{\alpha}_{ee}^2 > \tilde{\beta}_{ee}$, и притяжение в d -канале возникает из-за зависящей от угла части d -компоненты взаимодействия. В этом случае $\cos 2\theta$ -компоненты параметра порядка d -типа велики и щель имеет нули на двух электронных карманах.

10.2.3. Процедура вычислений

Мы используем куперовскую вершину $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$, полученную в подходе RPA-SF, как входные данные и осуществляем подгонку её функциональной формы с помощью уравнений (10.14). Это позволяет определить U_{ij} , α_{ij} и β_{ij} . Для простоты мы предполагаем, что $N_{F,j}$ одинаковы для всех Ферми-поверхностей, преобразуем U_{ij} в $u_{ij} = N_F U_{ij}$ и анализируем матричные уравнения на щель размерности 4×4 и 5×5 . Затем мы варьируем параметры и проверяем, насколько устойчивы решения. Этот подход можно обобщить на случай, когда $N_{F,j}$ зависит от j , но такая зависимость вряд ли изменит получающуюся

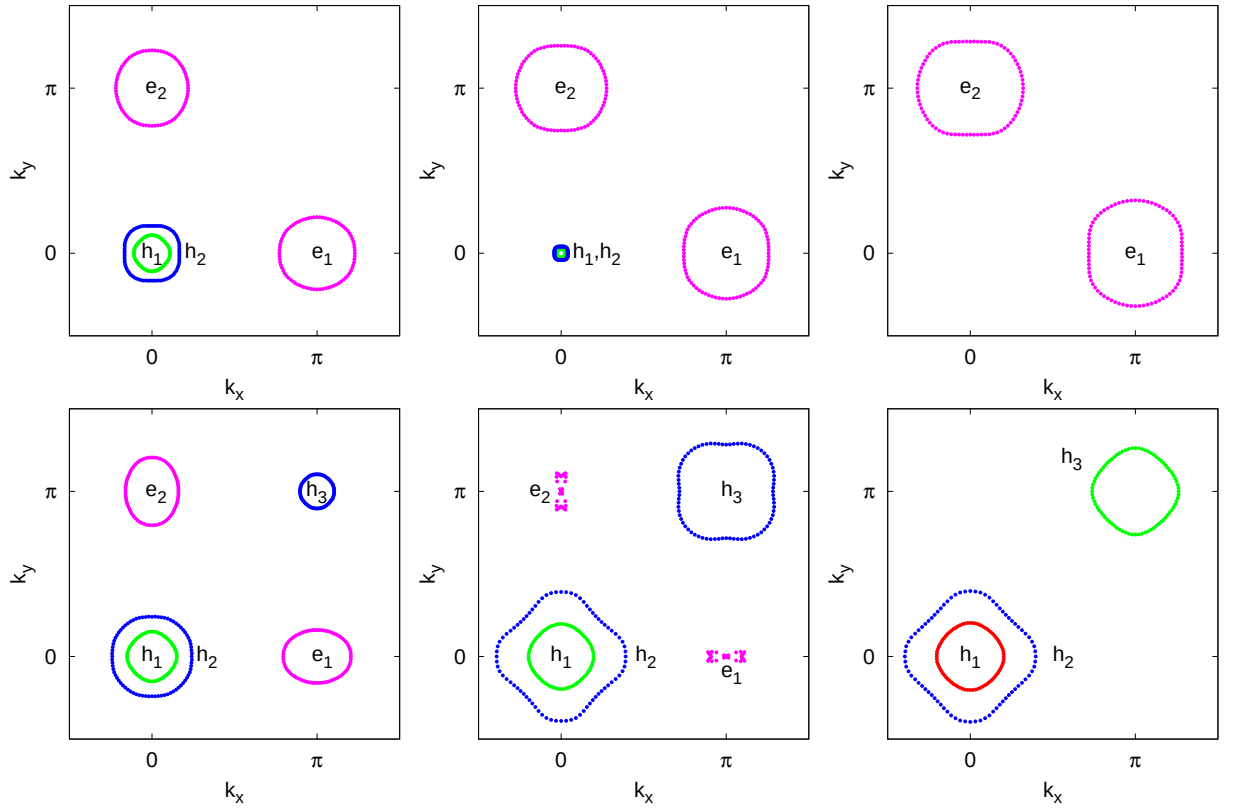


Рис. 10.2. Ферми-поверхности в пятиорбитальной модели соединений железа при различном уровне допирования. Верхний ряд: слева направо увеличивается электронное допирование с $\mu = 0.05, 0.18, 0.3$. Нижний ряд: слева направо увеличивается дырочное допирование с $\mu = -0.05, -0.18, -0.2$. При $\mu = -0.2$ остаются только дырочные карманы, притом h_1 и h_2 центрированы на точке Γ , а h_3 - на точке (π, π) . Для этого случая энергия орбитали $d_{3z^2-r^2}$ была немного изменена по сравнению с работой [11], чтобы убрать дополнительный “паразитный” дырочный карман в точке (π, π) .

физику.

Мы проанализировали шесть различных наборов параметров взаимодействия и несколько уровней допирования, которые характеризовались своей величиной химпотенциала μ , от $\mu = -0.2$ до $+0.2$, что описывает допирование от дырочного (отрицательные μ) до электронного (положительные). Параметры представлены в Таблице 10.1, а Ферми-поверхности, соответствующие различным значениям μ - на Рисунке 10.2. Результаты для всех наборов довольно похожи и далее мы представим их только для некоторых типичных случаев.

Использовать ЛАНА имеет смысл только если результат подгонки $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ с помощью уравнений (10.14) будет достаточно хорошо воспроиз-

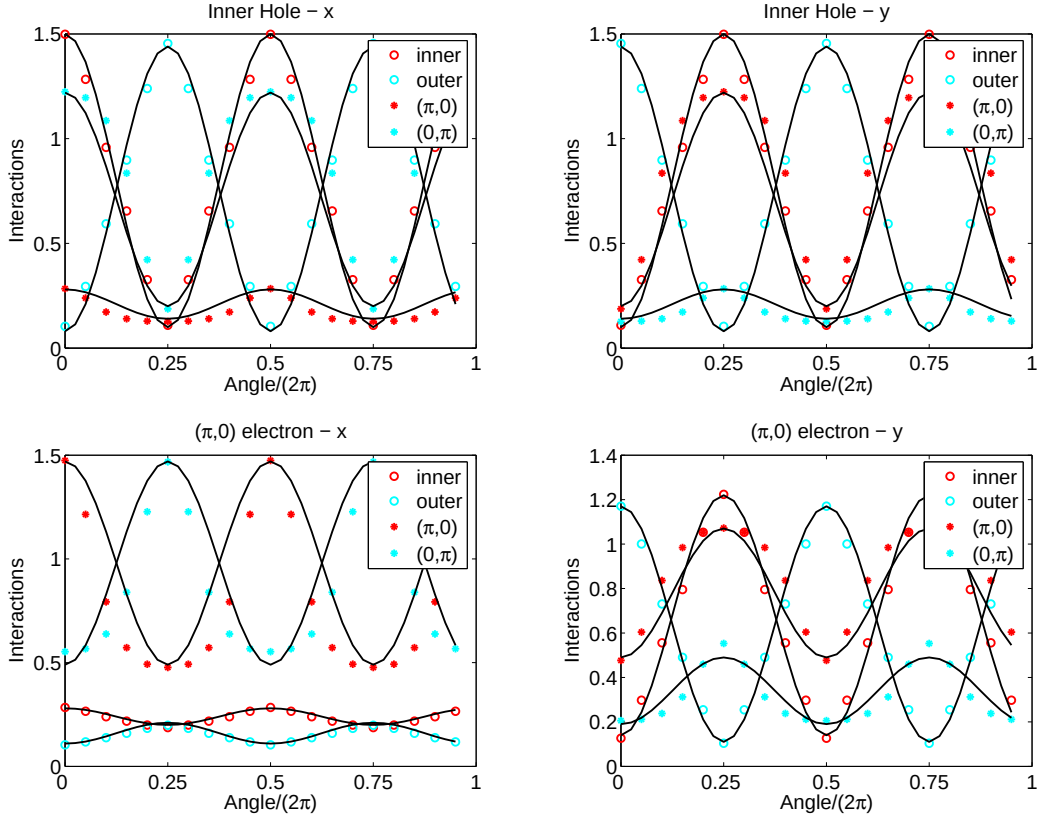


Рис. 10.3. Результат подгонки параметров ЛАНА (сплошные линии) с помощью уравнений (10.14) и куперовская вершина $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ в 5-орбитальной модели без спин-флуктуационной компоненты (точки) для набора параметров №1 и химпотенциала $\mu = 0.08$, что соответствует электронному допированию. Мы выбираем $\mathbf{k}_F$ в $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ либо вдоль направления x или вдоль направления y на данной Ферми-поверхности (её положение и направление $\mathbf{k}_F$ указано над каждой панелью) и изменяем $\mathbf{k}'_F$ на каждой Ферми-поверхности. Угол θ' отсчитывается от оси k_x . Согласие довольно хорошее.

водить Γ_{ij} из подхода RPA-SF. На Рисунках 10.3 и 10.4 показаны результаты подгонки для случая $\mu = 0.08$ (допирование электронами с $n_e = 6.12$) и взаимодействиями из набора №1 ($U = 1.67$, $J = J' = 0.21$, $V = 1.41$), как и в работе [394]. Один из импульсов $\mathbf{k}_F$ мы полагаем направленным вдоль направления оси x или y на одной из четырёх Ферми-поверхностей и изменяем другой импульс ($\mathbf{k}'_F$) вдоль всех четырёх Ферми-поверхностей. Из-за того, что мы принимаем Ферми-поверхности круглыми, длина вектора импульса фиксирована и переменной является только угол. Полученные при подгонке параметры взаимодействий в A_{1g} - и B_{1g} -каналах представлены в Таблице 10.2. Из Рисунков

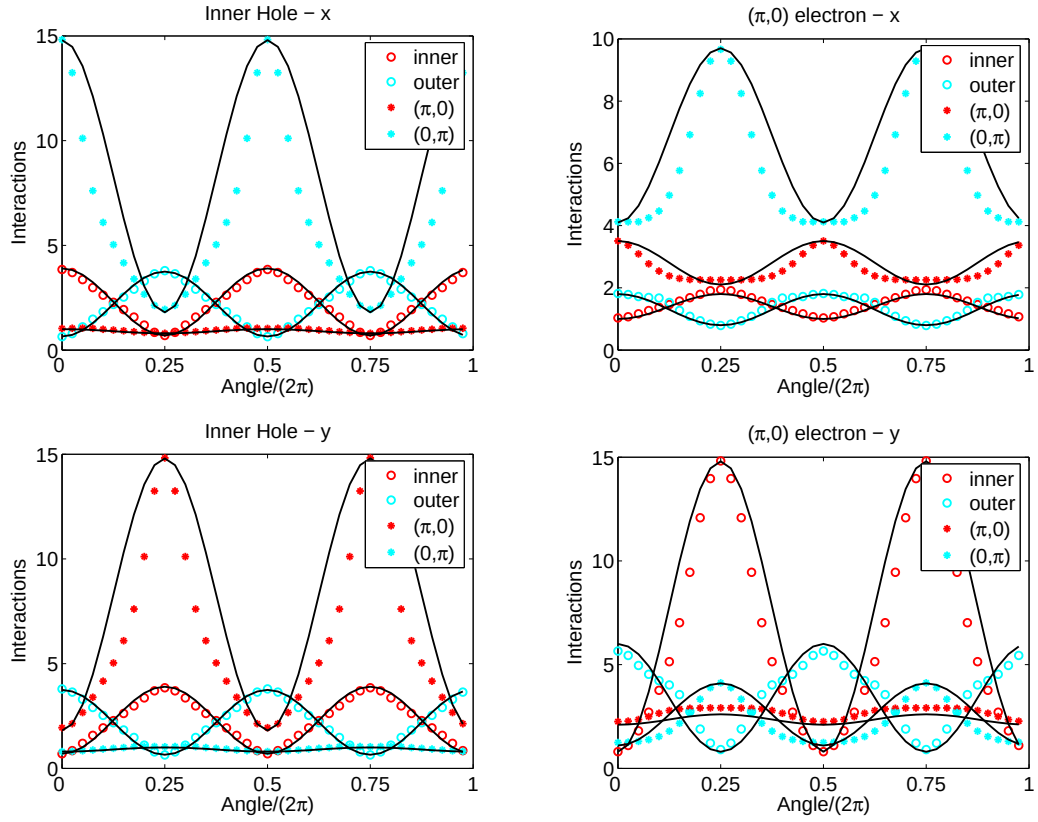


Рис. 10.4. То же, что и на Рисунке 10.3, но расчёты в 5-орбитальной модели были сделаны со спин-флуктуационной компонентой. Согласие достаточно хорошее. Как будет указано ниже, мы убедились, что различия подгонки LANA и результатов метода RPA-SF исчезают, когда мы добавляем гармоники 4θ ко взаимодействию в LANA.

видно, что согласие очень хорошее. В случае отсутствия спин-флуктуационных членов (NSF), см. уравнение 10.6, все $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ хорошо описываются уравнениями (10.14). В случае полного взаимодействия из уравнения 10.5, включающего спин-флуктуационную компоненту (SF), все $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ описываются довольно неплохо, а отличия можно ликвидировать учётом членов $\cos 4\theta$ во взаимодействиях, см. раздел 10.2.4. Для других наборов параметров результаты похожи.

Отметим, что $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$, получаемое методом RPA-SF, в эВ. В нашем приближении равных на всех Ферми-поверхностях $N_{F,j}$ безразмерные взаимодействия u_{ij} пропорциональны $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ с точностью до множителя. Этот множитель влияет на общий масштаб собственных значений λ , но не влияет на знак и на относительные величины λ_s и λ_d , что нас и интересует. Для простоты мы полагаем этот множитель равным единице.

Таблица 10.2. Параметры A_{1g} - и B_{1g} -каналов уравнений (10.14), полученные подгонкой куперовской вершина $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ для набора параметров №1 при $\mu = 0.08$. Здесь и далее аббревиатуры NSF и SF означают, что были взяты “голые” взаимодействия, т.е. без спин-флуктуационной компоненты (No Spin-Fluctuation), и полные взаимодействия со спин-флуктуационной компонентой (Spin-Fluctuation), соответственно.

A_{1g}	$u_{h_1h_1}$	$u_{h_2h_2}$	$u_{h_1h_2}$	u_{h_1e}	α_{h_1e}	u_{h_2e}	α_{h_2e}	u_{ee}	α_{ee}	β_{ee}
NSF	0.8	0.76	0.78	0.46	-0.24	0.4	-0.30	0.77	0.14	0.09
SF	2.27	2.13	2.22	4.65	-0.34	2.29	-0.22	3.67	0.15	0.04
B_{1g}	$\tilde{u}_{h_1h_1}$	$\tilde{u}_{h_2h_2}$	$\tilde{u}_{h_1h_2}$	$\tilde{u}_{h_1e}$	$\tilde{\alpha}_{h_1e}$	$\tilde{u}_{h_2e}$	$\tilde{\alpha}_{h_2e}$	$\tilde{u}_{ee}$	$\tilde{\alpha}_{ee}$	$\tilde{\beta}_{ee}$
NSF	0.7	0.66	-0.68	-0.25	-0.58	0.24	-0.42	0.11	-0.5	0.25
SF	1.50	1.40	-1.50	-3.73	-0.44	1.44	-0.32	1.03	-0.49	-0.02

Можно численно оценить точность ЛАНА рассматривая вклады угловых гармоник высшего порядка. В Таблице 10.3 сравниваются величины главных и следующих за ними угловых гармоник в A_{1g} - и B_{1g} -каналах. Видно, что высшие гармоники меньше главных которые, напомним, являются постоянными или членами $\cos 2\phi$ для взаимодействий внутри дырочных карманов в A_{1g} - или B_{1g} -каналах, соответственно, а для электрон-дырочных взаимодействий являются постоянными и членами $\cos 2\theta$, когда угол меняется на электронной Ферми-поверхности.

Далее мы будем обсуждать то, как спин-флуктуационная компонента влияет на симметрию спаривания и структуру щели для набора параметров взаимодействий №1.

10.2.4. Увеличение точности ЛАНА

Точность ЛАНА может быть увеличена, если добавить следующие за главными гармоники $\cos 4\phi$ к каждому подклассу членов ЛАНА. Например, на Рисунке 10.5 приведено сравнение результатов для $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ в ЛАНА и в подходе RPA-SF при сильном допировании дырками (уже нет электронных карманов)

Таблица 10.3. Величины различных гармоник вершины Γ_{ij} в A_{1g} - и B_{1g} -каналах для набора параметров №2 и $\mu = -0.05$. Мы зафиксировали позицию на одной Ферми-поверхности, отмеченной первой, и изменяли угол на другой, отмеченной второй. Угол $\psi = \theta$, если он на электронном кармане, и $\psi = \phi$, если он на дырочном.

	$A_{1g} (h_2 - h_1)$	$B_{1g} (h_2 - h_1)$	$A_{1g} (h_2 - e_1)$	$B_{1g} (h_2 - e_1)$
константа	0.88	0	0.95	0.56
2ψ	0	0.51	0.26	0.26
4ψ	0.01	0	0.13	0.14
6ψ	0	0.05	0.06	0.06
8ψ	0.00	0	0.03	0.03

с и без членами $\cos 4\phi$. Очевидно, что согласие между результатами метода RPA-SF и ЛАНА становится лучше, когда учитываются члены $\cos 4\phi$.

Влияние членов $\cos 4\phi$ на структуру параметра порядка таково, что в параметре порядка на дырочных Ферми-поверхностях появляются угловые гармоники $\cos 4\phi$. В случае, показанном на Рисунке 10.5, чтобы минимизировать число параметров, члены $\cos 4\phi$ были добавлены только к компонентам куперовской вершины, связанным с карманом h_2 . Поэтому только на кармане h_2 параметр порядка становится зависящим от угла. Величина λ_s не изменяется сильно и из 0.13 становится равной 0.10. В разделе 10.5 мы подробно обсудим влияние членов $\cos 4\phi$ и сравнение результатов ЛАНА с экспериментальными данными по пниктидам KFe_2As_2 и LiFeAs .

10.3. Влияние $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ на структуру параметра порядка

В этом разделе мы попытаемся установить, как и какие параметры уравнений (10.14) влияют на структуру параметра порядка. Сначала мы используем параметры, полученные для набора взаимодействий №1 и решим матричные уравнения 4×4 в ЛАНА. Результаты для случая отсутствия спин-флуктуаци-

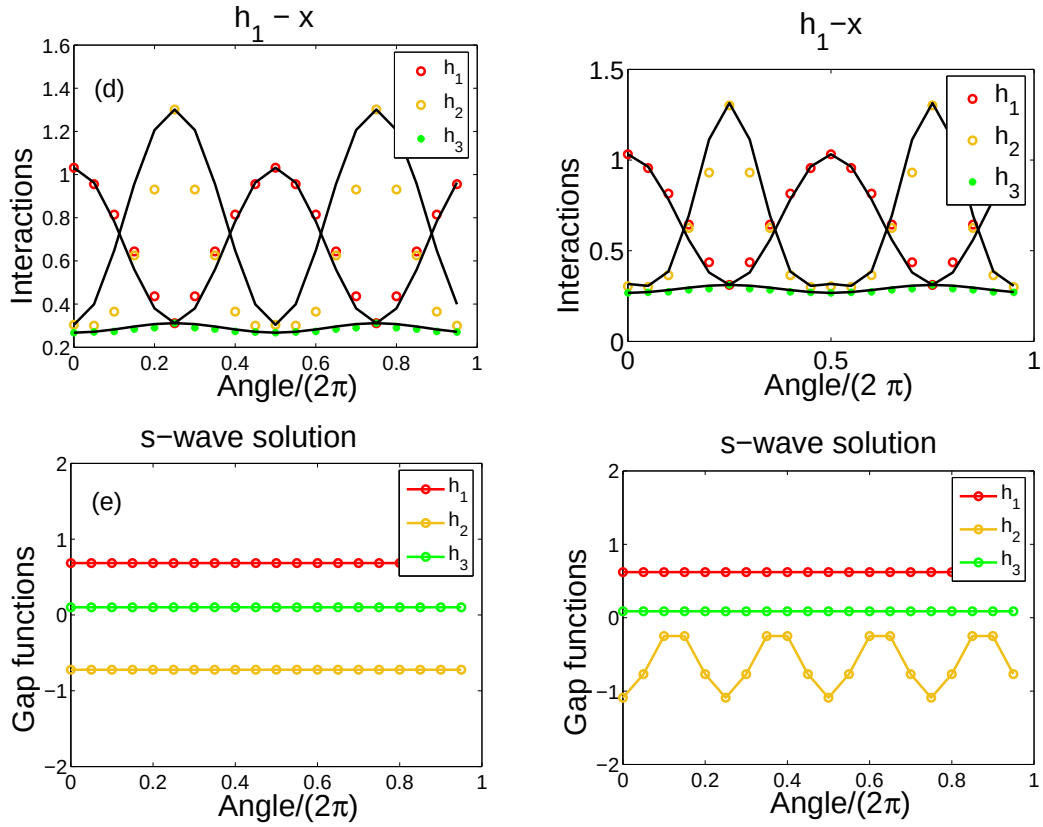


Рис. 10.5. Сравнение результатов ЛАНА для $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ и параметра порядка без (левая панель) и с (правая панель) членами $\cos 4\phi$. Точками показаны результаты численного расчёта RPA-SF. $\mathbf{k}_F$ отсчитывается от x -направления на дырочной Ферми-поверхности h_1 (внутренний карман вблизи точки $(0, 0)$). Чтобы минимизировать количество параметров, члены $\cos 4\phi$ были добавлены только к компонентам куперовской вершины, связанным с карманом h_2 , для которого отличие самое большое.

онной компоненты показаны на Рисунке 10.6. Для сравнения также приведены зависимости от угла параметров порядка, полученные в полностью численном расчёте RPA. Решения ЛАНА и RPA практически эквивалентны, что ещё раз подчёркивает, насколько хорошо работает подгонка в ЛАНА. Результаты для полного взаимодействия со спин-флуктуационной компонентой показаны на Рисунке 10.7 с численным результатом RPA-SF для s -типа параметра порядка. Снова, решения ЛАНА и RPA-SF согласуются очень хорошо. Единственное отличие в том, что значение параметра порядка на внешней дырочной Ферми-поверхности больше в подходе RPA-SF. Как было указано ранее, это следствие того, что для подгонки $\Gamma_{h_2,e}(\phi, \theta)$ в ЛАНА надо добавить компоненты $\cos 4\theta$.

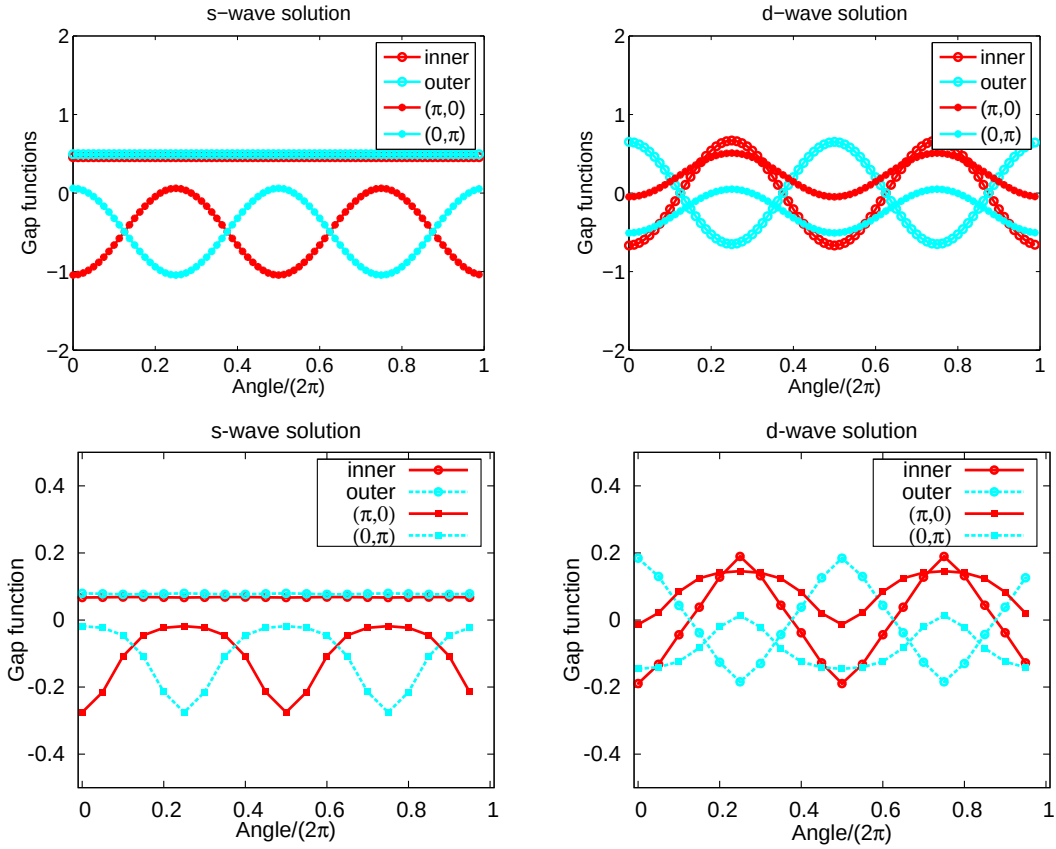


Рис. 10.6. Решения s -типа (слева) и d -типа (справа), полученные в LANA (вверху) для набора параметров №1 с $\mu = 0.08$ и полученные численно (внизу) в 5-орбитальной модели без спин-флуктуационной (NSF) компоненты. Решений с положительными λ нет, поэтому мы приводим решения с минимальными отрицательными λ . Согласие структуры параметра порядка очень хорошее. В LANA решению s -типа соответствует $\lambda_s = -1.02$ и d -типу $\lambda_d = -0.99$ ($\lambda_s/\lambda_d \approx 1.0$). Полученные из численного RPA-расчёта λ_s и λ_d также отрицательны и их отношение равно $\lambda_s/\lambda_d = 0.6$.

Как только мы их добавляем, параметр порядка на внешней дырочной Ферми-поверхности идёт вверх, что приводит к ещё более хорошему согласию с результатами RPA-SF.

Мы видим, что LANA работает довольно хорошо как для “голых” взаимодействий, так и для полных взаимодействий, включающих спин-флуктуационную компоненту. Мы удостоверились, что практическая эквивалентность параметров порядка в подходе RPA-SF и в LANA выполняется для всех наборов параметров из Таблицы 10.1. Это позволяет быть уверенными, что основную физику можно понять анализируя матричные уравнения 4×4 в A_{1g} - и B_{1g} -каналах

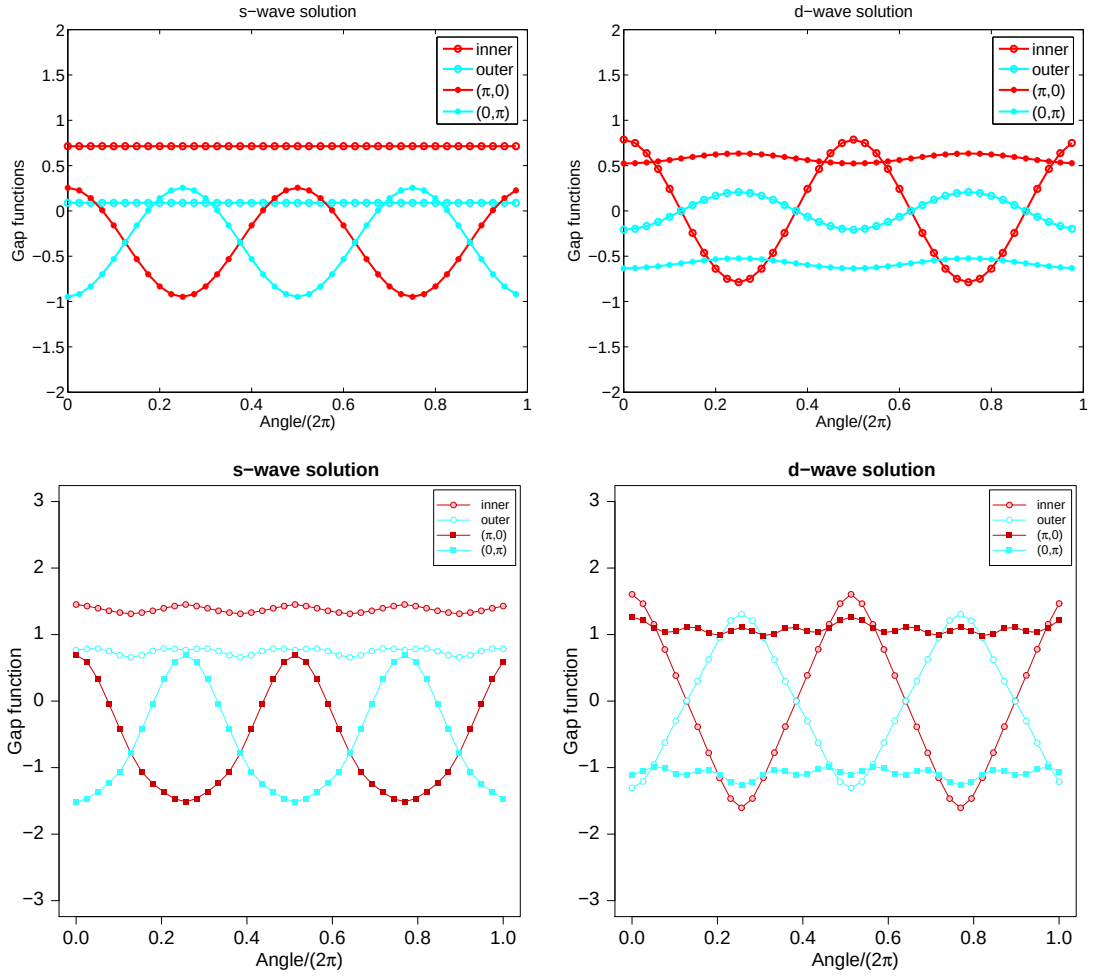


Рис. 10.7. То же, что и на Рисунке 10.6, но расчёты в 5-орбитальной модели были сделаны со спин-флуктуационной (SF) компонентой. Собственные значения теперь положительны: $\lambda_s = 4.6$ и $\lambda_d = 4.8$, так что $\lambda_s/\lambda_d \approx 0.96$ в ЛАНА и примерно 1.1 в расчётах RPA-SF [394].

в ЛАНА. Начнём со случая A_{1g} -симметрии.

10.3.1. A_{1g} -симметрия

Влияние спиновых флуктуаций на $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$

Сначала внимательно рассмотрим значения в Таблице 10.2. Сравнивая величины $u_{h_i h_j}$, $u_{h_i e}$ и u_{ee} видны две тенденции. Во-первых, как только добавляется спин-флуктуационная компонента, возникает общее увеличение примерно в три раза *всех* взаимодействий, включая взаимодействия внутри дырочных карманов. Кроме этого присутствует ещё один эффект - электрон-дырочное взаимодействие u_{he} ещё больше увеличивается, в сравнении с u_{hh} и u_{ee} . Это

дополнительное увеличение, примерно в 3-4 раза, приводит к тому, что в итоге u_{h_1e} увеличивается в 10 раз (u_{h_2e} увеличивается немного меньше).

Мы связываем общее увеличение с “голой” спин-флуктуационной компонентой $u^2\chi_0(\mathbf{q})$, а дополнительное увеличение - с относительным увеличением восприимчивости в RPA $\chi(\mathbf{q})/\chi_0(\mathbf{q})$ вблизи импульса $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ или $(0, \pi)$. Аргументация основана на сравнении результатов работы [200] для “голой” и перенормированной в RPA спиновой восприимчивости. Перенормированное в RPA $\chi(\mathbf{Q})$ в 3-4 раза больше, чем $\chi_0(\mathbf{Q})$, в то время, как $\chi(0) \approx \chi_0(0)$. То же самое справедливо для взаимодействия между электронными карманами, для которых u_{ee} является усреднённой величиной межзонных взаимодействий с $\chi(0) \approx \chi_0(0)$ (вклад от взаимодействий внутри одного кармана) и с $\chi(\pi, \pi) \approx 2.4\chi_0(\pi, \pi)$ (вклад от взаимодействий между карманами). Ожидаемое общее увеличение u_{ee} равно $1 + 2[(1 + 2.4)/2] = 4.4$. Как видно из Таблицы 10.2, u_{ee} увеличивается на похожую величину.

Сравним теперь коэффициенты при угловых зависимостях α_{he} , α_{ee} и β_{ee} . Из Таблицы 10.2 видно, что α_{he} и α_{ee} сильно не меняются. β_{ee} изменяется и становится в 2.5 раза меньше при учёте спин-флуктуационной компоненты. Однако, как будет показано далее, структура параметра порядка не чувствительна к изменениям β_{ee} и существенно не изменяется даже если мы положим $\beta_{ee} = 0$ (см. Рисунок 10.9).

Пренебрегая изменениями β_{ee} мы можем сделать вывод, что спин-флуктуационный вклад в куперовское взаимодействие приводит к общему увеличению Γ_{ij} и к дополнительному увеличению электрон-дырочных взаимодействий (u_{h_1e} и u_{h_2e}) и, в меньшей степени, электрон-электронных взаимодействий u_{ee} , но не изменяет существенно угловые зависимости электрон-дырочных взаимодействий. Общее увеличение куперовской вершины не влияет на структуру параметра порядка и, следовательно, единственный важный эффект спин-флуктуационной компоненты в увеличении межзонного (электрон-дырочного) взаимодействия в сравнении с внутризонными (электрон-электронным и дырочно-

дырочным) взаимодействиями.

Как было указано ранее, поток взаимодействий в ренормгруппе приводит точно к такому-же результату: угловая зависимость не изменяется, а относительная величина электрон-дырочного взаимодействия увеличивается. С этой точки зрения подходы ренормгруппы и RPA-SF, хотя и формально разные, приводят к очень похожим физическим результатам.

Роль угловой зависимости электрон-дырочных и электрон-электронных взаимодействий

Здесь мы проанализируем, насколько чувствительна структура параметра порядка к зависящим от угла компонентам Γ_{ij} . В рамках ЛАНА мы легко можем изменить угловую зависимость и увидеть, к каким последствиям это приводит. Сначала рассмотрим зависящие от угла компоненты электрон-дырочного взаимодействия.

На Рисунках 10.8 и 10.9 показаны результаты для параметра порядка $s_{\pm}$ -типа при различных значениях α_{h_ie} . Сравнивая их с Рисунком 10.6 мы видим, что влияние α_{h_ie} на параметр порядка отличается для “голового” и полного взаимодействий. Исходно для “голового” взаимодействия не существует решения s -типа с положительной λ_s , но оно возникает при увеличении α_{h_ie} выше определённого значения. Это легко понять из анализа матричных уравнений 4×4 для параметра порядка: для “голового” взаимодействия внутризонные отталкивания $u_{h_i h_j}$ и u_{ee} больше, чем межзонное u_{h_ie} , следовательно, спаривание может быть вызвано только зависящей от угла частью взаимодействий, когда величина S , даваемая уравнением (10.26), станет положительной. Для исходных параметров $S < 0$, но когда мы увеличиваем α_{h_ie} , S меняет знак и возникает решение с $\lambda_s > 0$. Соответствующий параметр порядка сильно осциллирует на электронной Ферми-поверхности и имеет “случайные”, т.е. не обусловленные симметрией щели, линии нулей.

Рассмотрим теперь полное взаимодействие, включающее в себя спин-флук-

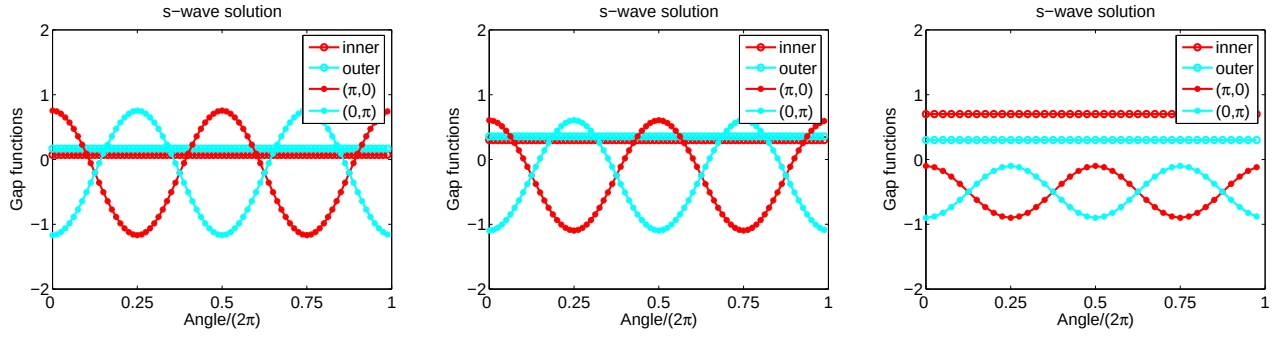


Рис. 10.8. Влияние электрон-дырочных взаимодействий: решение s -типа для набора параметров №1 без спин-флуктуационной компоненты (NSF) и $\mu = 0.08$ с нулевыми угловыми частями электрон-дырочных взаимодействий α_{hie} (слева) и с увеличенными вдвое (в центре). λ_s равны -0.16 и 0.226 , притом положительное λ_s соответствует увеличенному значению α_{hie} . Если ввести дополнительное увеличение общего множителя электрон-дырочных взаимодействий ~ 4 , то линии нулей щели исчезают (справа).

туационную компоненту. В этом случае u_{hie} увеличивается и решение с $\lambda_s > 0$ существует даже при $\alpha_{hie} = 0$ (см. Рисунок 10.9). Единственное отличие между решениями с малой и большой α_{hie} в том, что в первом случае щель $s_{\pm}$ -типа не имеет нулей на двух электронных карманах. Следовательно, роль α_{hie} при наличии спин-флуктуационной компоненты в том, чтобы модифицировать уже существующее решение $s_{\pm}$ -типа добавляя угловые гармоники параметра порядка на электронных Ферми-поверхностях.

Проанализируем чувствительность решения на параметр порядка к изменениям угловой компоненты электрон-электронных взаимодействий, определяемых членами α_{ee} и β_{ee} . На нижней панели Рисунка 10.9 показаны результаты для параметра порядка, полученные при увеличенных в два раза, уменьшенных в два раза и при равных нулю α_{ee} и β_{ee} . Сравнивая их с нижней панелью Рисунка 10.6 мы видим, что изменения α_{ee} и β_{ee} приводят к очень малым изменениям структуры параметра порядка и величин λ . Параметр порядка в основном остался таким же, как и на Рисунке 10.6, даже если α_{ee} и β_{ee} равны нулю. Следствие этого состоит в том, что в случае полного взаимодействия структура параметра порядка определяется угловой зависимостью электрон-дырочного взаимодействия, а электрон-электронные взаимодействия с хорошей точностью

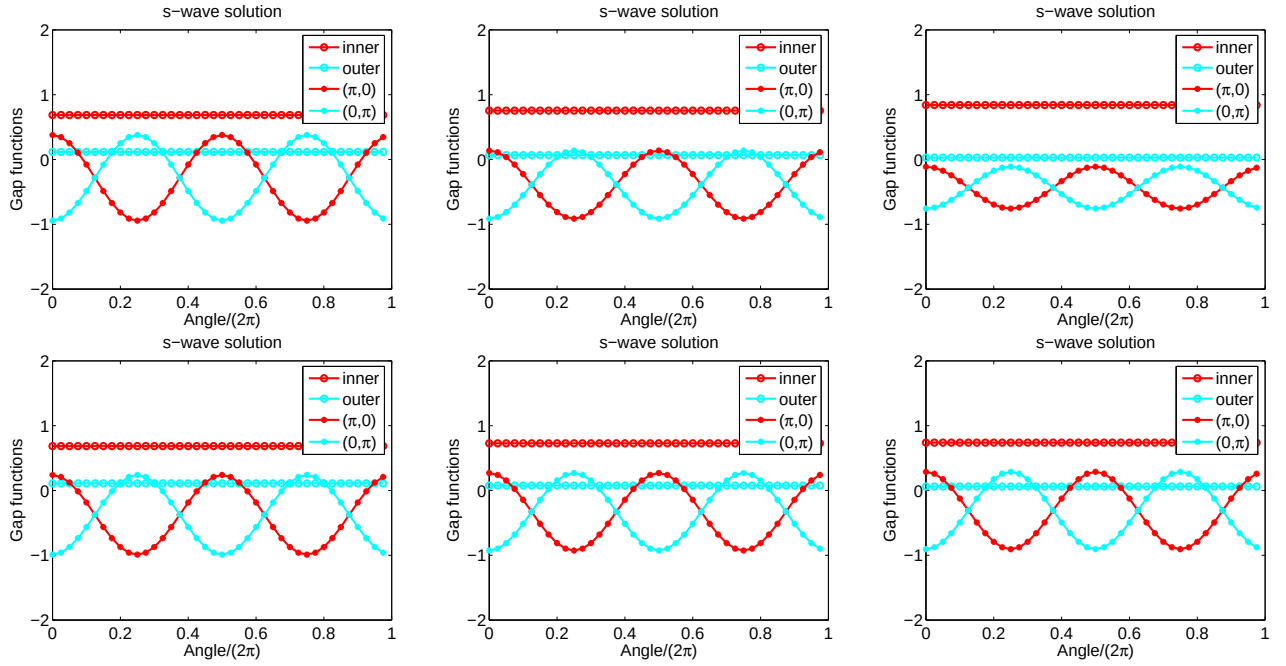


Рис. 10.9. Зависимость структуры параметра порядка s -типа от величины зависящей от угла части взаимодействий для набора параметров №1 со спин-флуктуационной компонентой (SF) и $\mu = 0.08$. Решение для исходной $\alpha_{h_{ie}}$ показано на Рисунке 10.6. Верхние три панели: структура параметра порядка для случая увеличенной в два раза (слева), уменьшенной в два раза (в центре) и нулевой (справа) угловой части электрон-дырочных взаимодействий $\alpha_{h_{ie}}$, при исходных значениях угловых частей электрон-электронных взаимодействий (α_{ee} и β_{ee}). Соответствующие значения λ_s есть 7.3, 3.4 и 2.5. Угловая зависимость изменяется и, в частности, линии нулей вдоль дырочной Ферми-поверхности исчезают при $\alpha_{h_{ie}} = 0$. Нижние три панели: то же, что и на верхних, но величины $\alpha_{h_{ie}}$ зафиксированы и равны исходным, а меняются угловые части электрон-электронных взаимодействий α_{ee} и β_{ee} : увеличены в два раза (слева, $\lambda_s = 4.5$), уменьшены в два раза (в центре, $\lambda_s = 4.7$) и равны нулю (справа, $\lambda_s = 4.0$). Видно, что эти изменения очень слабо влияют на структуру параметра порядка.

можно заменить на независящий от угла член u_{ee} .

Структура щель A_{1g} -типа в случае четырёх Ферми-поверхностей

Результатом предыдущих исследований структуры параметра порядка в случае четырёх Ферми-поверхностей в подходе RPA-SF была щель со случайными линиями нулей на электронных карманах [200, 394]. Решение $s_{\pm}$ -типа без линий нулей возникало только для электронной структуры с дополнительной, пятой, Ферми-поверхностью, центрированной на точке (π, π) . Как видно из при-

ведённого выше анализа, этот результат является наиболее вероятным, но не универсальным: для полного взаимодействия щель может иметь линии нулей или не иметь их в зависимости от величины α_{he} и от соотношения между u_{he}^2 и $u_{ee}u_{hh}$ (для простоты рассуждений мы полагаем совпадающими две дырочные Ферми-поверхности). При $u_{he}^2 < (u_{ee}u_{hh})$ существует только решение $s_{\pm}$ -типа с линиями нулей на электронных карманах, а в противоположном случае решение может иметь или не иметь линии нулей, в зависимости от α_{he} . Чем больше соотношение $u_{he}^2/(u_{ee}u_{hh})$, тем большая требуется величина α_{he} для формирования линий нулей.

Чтобы это проиллюстрировать, на Рисунке 10.8(справа) мы приводим решение матричных уравнений 4×4 для параметра порядка в случае, когда u_{h_1e} и u_{h_2e} увеличены, а все остальные параметры, включая α_{h_1e} , зафиксированы. Видно, что линии нулей на электронных Ферми-поверхностях исчезают при достаточно больших значениях u_{h_1e} и u_{h_2e} .

В подходе RPA-SF, чтобы больше увеличить u_{h_1e} по сравнению с остальными параметрами, нужно подойти ещё ближе к антиферромагнитной неустойчивости. Для тех наборов параметров, с которыми мы имеем дело, увеличивать u_{h_1e} надо в существенное число раз, так что для исчезновения нулей щели требуется аккуратная подгонка вблизи антиферромагнитной неустойчивости. Тем не менее, решение без линий нулей обязательно существует в некоторой области параметров.

10.3.2. B_{1g} -симметрия

Рассмотрение B_{1g} -симметрии подобно случаю A_{1g} -симметрии. Спаривание B_{1g} -типа может быть из-за притяжения за счёт не зависящей от угла части взаимодействия, или оно может быть индуцировано зависящей от угла частью взаимодействий, даже если $\lambda_d < 0$ в отсутствие зависящих от угла членов. Мы воздержимся от обсуждения всех возможных случаев потому, что во многом их анализ подобен таковому для A_{1g} -симметрии. Отметим, однако, что отрицатель-

ные λ_d в случае “голых” взаимодействий (NSF) гораздо меньше по абсолютной величине, чем в случае A_{1g} -спаривания, т.е. присутствует “меньше отталкивания” в канале B_{1g} . Как результат, нужно значительно меньше “усилий”, чтобы превратить отталкивание в канале B_{1g} в притяжение. Это можно сделать изменяя значения $\tilde{\alpha}_{h_e e}$, $\tilde{\alpha}_{ee}$ и $\tilde{\beta}_{ee}$. Как только мы добавляем спин-флуктуационную компоненту, все B_{1g} -компоненты взаимодействия возрастают, но, как и в случае A_{1g} -симметрии, больше всего увеличивается электрон-дырочное взаимодействие. Этого увеличения достаточно для того, чтобы в уравнениях на параметр порядка возникло решение с $\lambda_d > 0$ даже если мы положим равными нулю зависящие от угла компоненты электрон-дырочного и электрон-электронного взаимодействия. В последнем случае параметр порядка на двух электронных карманах равны $\pm\Delta_e$. Если мы не кладем в ноль зависящую от угла компоненту, то в параметре порядка на электронных карманах возникают гармоники $\cos 2\theta$, но, как видно из Рисунка 10.6, они довольно малы.

Также отметим, что величины λ_s и λ_d для полного взаимодействия довольно близки. Для набора параметров взаимодействия №1 обнаружено, что в ЛАНА λ_d немного больше, чем λ_s для параметров ЛАНА, полученных из подгонки, но λ_d и λ_s очень близки и λ_s становится больше при малых изменениях параметров. Решение на параметр порядка в RPA также показывает, что для этого набора параметров λ_s и λ_d очень близки, но при этом $\lambda_s \geq \lambda_d$. Однако, в любом случае решение A_{1g} -типа становится преобладающим над решением B_{1g} -типа ($\lambda_s > \lambda_d$) когда система приближается к антиферромагнитной неустойчивости.

10.4. Зависимость от допирования и передопированные системы

Теперь мы перейдем к исследованию зависимости решений ЛАНА от допирования. Наиболее интересным оказывается сравнение передопированных си-

Таблица 10.4. Некоторые из параметров ЛАНА для электронного допирования, полученные подгонкой вершины $\Gamma(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ из численного расчёта RPA-SF, см. Рисунок 10.10.

	Рисунок 10.10(a)-(c)						Рисунок 10.10(d)-(f)		
<i>s</i> -тип	$u_{h_1 h_1}$	$u_{h_1 e}$	$\alpha_{h_1 e}$	u_{ee}	α_{ee}	λ_s	u_{ee}	α_{ee}	λ_s
	0.75	0.67	-0.19	0.88	0.1	0.21	0.84	0.09	-0.12
<i>d</i> -тип	$\tilde{u}_{h_1 h_1}$	$\tilde{u}_{h_1 e}$	$\tilde{\alpha}_{h_1 e}$	$\tilde{u}_{ee}$	$\tilde{\alpha}_{ee}$	λ_d	$\tilde{u}_{ee}$	$\tilde{\alpha}_{ee}$	λ_d
	0.51	-0.32	-0.50	-0.05	0.9	0.35	-2.57	0.29	5.9

стем когда один из типов Ферми-поверхностей (дырочные или электронные) либо почти исчез, либо исчез совсем. На этих случаях мы и сконцентрируемся. На Рисунках 10.10 и 10.11 показан результат подгонки параметров ЛАНА с помощью уравнений (10.14) рассчитанной куперовской вершины $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ в рамках RPA-SF для допирования электронами и дырками, соответственно. Согласие очень хорошее. Небольшие отличия исчезают, как описано выше, если добавить гармоники $\cos 4\theta$ в ЛАНА. Мы убедились, что эти дополнительные члены не изменяют симметрию параметра порядка, а только вносят небольшие изменения в структуру щели. Некоторые из параметров ЛАНА, которые далее нам понадобятся для анализа, приведены в Таблицах 10.4 и 10.5 для электронного и дырочного допирования, соответственно. Мы представляем результаты для таких уровней допирования, когда один из типов Ферми-поверхностей либо почти исчез, либо исчез совсем. Мы увидим, что эти два режима существенно отличаются.

Мы руками меняли величины и угловые зависимости для того, чтобы увидеть, какие именно параметры больше всего влияют на величину λ и структуру щели. Было обнаружено, что некоторые свойства системы чувствительны к соотношениям параметров, а некоторые - универсальны.

При допировании электронами чувствительные к изменениям параметров свойства - это, во-первых, симметрия щели, поскольку величины λ_s и λ_d сравнимы при присутствии дырочных и электронных Ферми-поверхностей (см. Таб-

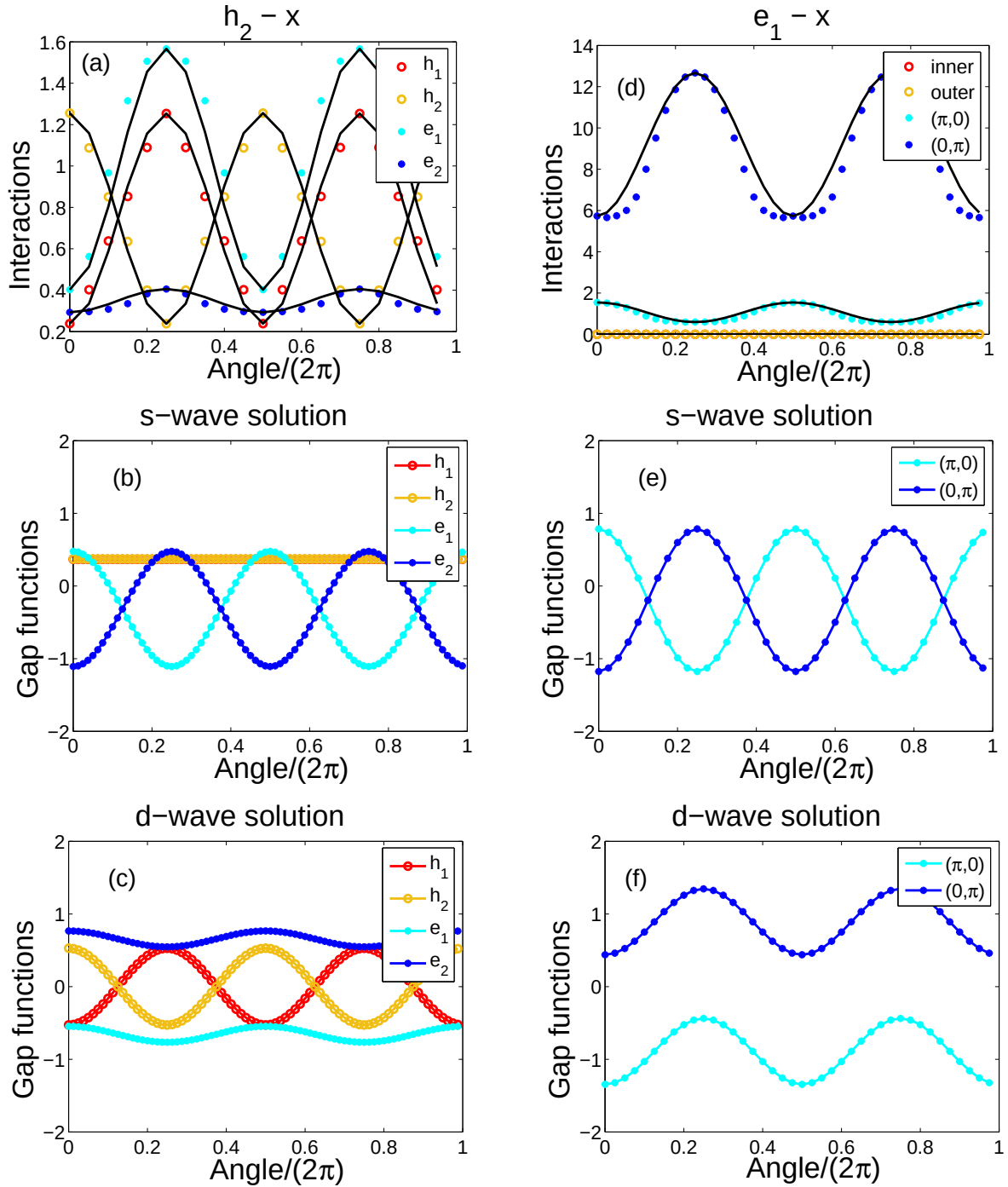


Рис. 10.10. Допирование электронами. Мы моделируем Ферми-поверхность двумя дырочными h_1 и h_2 и двумя электронными карманами e_1 и e_2 . (a)-(c) Подгонка с помощью ЛАНА вершины $\Gamma(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ и получающиеся параметры порядка s - и d -типа для случая очень маленьких дырочных карманов. $\mathbf{k}_F$ выбрано вдоль направления оси k_x на кармане h_2 , а угол, характеризующий $\mathbf{k}'_F$, изменяется на каждой Ферми-поверхности. Точки представляют результаты численного расчёта RPA-SF в 5-орбитальной модели пниктидов [200], сплошные линии - результат подгонки с помощью уравнения (10.14). Угол измеряется относительно направления k_x . На панелях (d)-(f) то же самое, что и на панелях (a)-(c), но для большего уровня допирования электронами, когда уже не остаётся дырочных карманов.

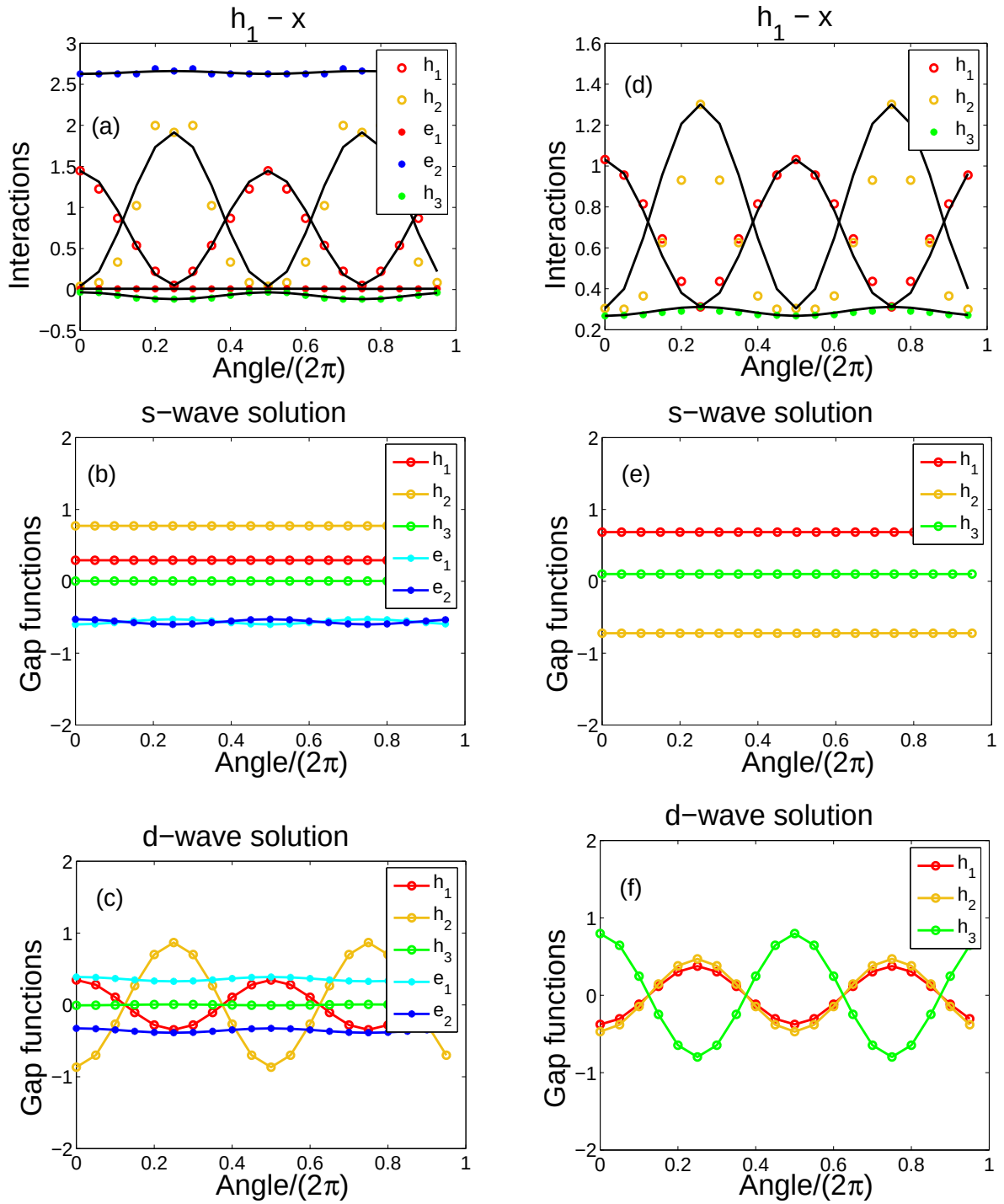


Рис. 10.11. То же, что и на Рисунке 10.10, но для допирования дырками. При этом присутствуют три дырочных кармана. Случай очень малых электронных карманов показан на панелях (a)-(c), а на панелях (d)-(f) показан случай очень сильного допирования дырками, когда электронных карманов уже нет.

Таблица 10.5. Некоторые из параметров ЛАНА для дырочного допирования, полученные подгонкой вершины $\Gamma(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F)$ из численного расчёта RPA-SF, см. Рисунок 10.11.

	Рисунок 10.11(a)-(c)					Рисунок 10.11(d)-(f)				
s -тип	$u_{h_1h_1}$	u_{h_1e}	α_{h_1e}	u_{ee}	λ_s	$u_{h_1h_1}$	$u_{h_1h_2}$	$u_{h_1h_3}$	$u_{h_3h_3}$	λ_s
	0.75	1.36	0.08	1.40	1.8	0.67	0.8	0.29	1.37	0.13
d -тип	$\tilde{u}_{h_1h_1}$	$\tilde{u}_{h_1e}$	$\tilde{\alpha}_{h_1e}$	$\tilde{u}_{ee}$	λ_d	$\tilde{u}_{h_1h_1}$	$\tilde{u}_{h_1h_2}$	$\tilde{u}_{h_1h_3}$	$\tilde{u}_{h_3h_3}$	λ_d
	0.70	-1.32	0.0	1.45	1.2	0.36	-0.5	-0.02	-0.17	0.11

лицу 10.4), и, во-вторых, присутствие или отсутствие случайных, т.е. не обусловленных симметрией параметра порядка, линий нулей щели A_{1g} -типа, хотя для большинства значений параметров щель имеет нули, как показано на Рисунке 10.10(b). Универсальным свойством оказалось то, что главной силой, приводящей к притяжению в A_{1g} - и B_{1g} -каналах является межзонное электрон-дырочное взаимодействие (члены u_{h_1e} и $\tilde{u}_{h_1e}$), *не зависимо от того, насколько малы дырочные карманы*. При наличии большой спин-флуктуационной компоненты u_{h_1e} и $\tilde{u}_{h_1e}$ становятся больше дырочно-дырочных и электрон-электронных взаимодействий. Тогда $\lambda_{s,d}$ положительны, даже если пренебречь членами $\cos 2\theta$ в уравнениях (10.14). Для двух одинаковых дырочных Ферми-поверхностей условия таковы: $u_{he}^2 > u_{hh}u_{ee}$ и $\tilde{u}_{he}^2 > \tilde{u}_{hh}\tilde{u}_{ee}$. В этом случае члены $\cos 2\theta$ в параметрах порядка A_{1g} - и B_{1g} -типов (10.19)-(10.20) изменяются пропорционально соответствующей величине α_{he} . Для малой величины спин-флуктуационной компоненты, когда $u_{he}^2 < u_{hh}u_{ee}$ (этот случай соответствует Рисунку 10.10 и Таблице 10.4), электрон-дырочное взаимодействие всё ещё приводит к решениям с $\lambda_{s,d} > 0$, только на этот раз в параметре порядка сильны компоненты $\cos 2\theta$, что эффективно уменьшает взаимодействие u_{ee} . Для использованных нами параметров все u_{h_1e} положительны (отталкивание) и параметр порядка A_{1g} -типа имеет сдвиг на π между дырочной и электронной Ферми-поверхностями (щель $s_{\pm}$ -типа). Однако, если бы u_{h_1e} было отрицательно (притяжение), то параметр порядка A_{1g} -симметрии был бы обычного s_{++} -типа [227].

Ситуация качественно меняется, когда исчезают дырочные карманы, см. Рисунок 10.10(d)-(f). Из Таблицы 10.4 видно, что λ_s уменьшается, а λ_d увеличивается, т.е. для d -типа решения T_c возрастает. Сравнивая параметры ЛАНА для двух случаев допирования мы видим, в чём причина: как только дырочные карманы исчезают, прямое электрон-электронное взаимодействие d -типа $\tilde{u}_{ee}$ становится притяжением. Чтобы понять причины этого, заметим, что u_{ee} и $\tilde{u}_{ee}$ - это симметричные и антисимметричные комбинации внутризонных и межзонных электрон-электронных взаимодействий: $u_{ee} = u_{\text{intra}}^{ee} + u_{\text{inter}}^{ee}$, $\tilde{u}_{ee} = u_{\text{intra}}^{ee} - u_{\text{inter}}^{ee}$. Когда u_{inter}^{ee} и u_{intra}^{ee} положительны, как в нашем случае, то $u_{ee} > 0$, но знак $\tilde{u}_{ee}$ зависит от соотношения между u_{inter}^{ee} и u_{intra}^{ee} . Когда дырочный карман присутствует, спиновая восприимчивость имеет пик вблизи $\mathbf{q} = (0, \pi)$ и $(\pi, 0)$, которые находятся на одинаковом расстоянии от относительного импульса $\mathbf{q} = 0$ для u_{intra}^{ee} и $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ для u_{inter}^{ee} . В такой ситуации u_{intra}^{ee} и u_{inter}^{ee} остаются близки по величине и $\tilde{u}_{ee}$ мало. Когда дырочный карман исчезает, пик в спиновой восприимчивости в RPA сдвигается к точке (π, π) [443] и u_{inter}^{ee} за счёт спин-флуктуационной компоненты увеличивается больше, чем u_{intra}^{ee} . Отрицательная величина $u_{\text{intra}}^{ee} - u_{\text{inter}}^{ee}$ тогда приводит к параметру порядка типа “плюс-минус” на двух электронных карманах. Такой параметр порядка имеет разный знак на карманах, которые отличаются заменой $k_x \rightarrow k_y$ и, следовательно, обладает $d_{x^2-y^2}$ -симметрией [443, 449]. Однако, если взаимодействие u_{inter}^{ee} было отрицательно и по величине больше, чем u_{intra}^{ee} , константы связи A_{1g} - и B_{1g} -типа поменяются местами, т.е. тот же самый механизм приведёт к спариванию s -типа с одинаковыми знаками параметра порядка на двух электронных карманах [227].

Теперь рассмотрим случай дырочного допирования. Результат подгонки ЛАНА в случае, когда электронные карманы малы, но всё ещё присутствуют, и когда остаются только дырочные Ферми-поверхности, показаны на Рисунке 10.11. Соответствующие параметры приведены в Таблице 10.5. Мы проанализировали эти и другие уровни допирования и снова обнаружили универсальные и чувствительные к изменениям параметров свойства системы. Зависящее

от параметров свойство - это снова присутствие или отсутствие случайных линий нулей щели A_{1g} -симметрии на электронных Ферми-поверхностях. Для широкого спектра параметров у щели нет линий нулей (см. Рисунок 10.11) так как u_{he} увеличивается из-за дополнительного вклада u_{h_3e} , но для некоторых параметров всё ещё формируются линии нулей на электронных карманах. Универсальным свойством является то, что когда присутствуют и электронные и дырочные карманы, тогда (1) главная нестабильность имеет A_{1g} -симметрию ($\lambda_s > \lambda_d > 0$) и (2) притяжение в A_{1g} - и B_{1g} -каналах снова обусловлено межзонным электрон-дырочным взаимодействием (члены u_{he} и $\tilde{u}_{he}$), *не зависимо от того, насколько малы электронные карманы*. В канале B_{1g} электрон-дырочное взаимодействие меняет знак между двумя дырочными карманами на $(0,0)$ и, как результат, щель B_{1g} -типа на этих Ферми-поверхностях имеет сдвиг фазы равный π , см. Рисунок 10.11(c).

Ситуация быстро меняется, как только электронные карманы исчезают. Собственное значение B_{1g} -типа λ_d увеличивается по отношению к λ_s и для допирования, показанного на Рисунке 10.11, почти превышает его. Скорее всего, d -тип станет главной нестабильностью при большем увеличении допирования и поэтому мы сфокусируемся на этом канале. Сравнивая $\tilde{u}$ в Таблице 10.5 для случая наличия и отсутствия электронных карманов видим, что в d -канал есть притяжение в отсутствие электрон-дырочного взаимодействия по двум причинам. Во-первых, внутризонное взаимодействие d -типа $\tilde{u}_{h_3h_3}$ становится отрицательным, что соответствует притяжению. Во-вторых, межзонное взаимодействие $\tilde{u}_{h_1h_2}$ по величине больше, чем внутризонные отталкивания $\tilde{u}_{h_1h_1}$ и $\tilde{u}_{h_2h_2}$. Тогда решение с положительными λ_d будет существовать отдельно для Ферми-поверхностей $h_{1,2}$ и h_3 , а остаточное межзонное взаимодействие просто устанавливает относительные величины и фазы между параметрами порядка на h_3 и $h_{1,2}$. Поскольку $\tilde{u}_{h_1h_2}$ является притяжением, две щели d -типа на $h_{1,2}$ будут в фазе, т.е. это решение d -типа является другой собственной функцией, чем та, что имела фазовый сдвиг π при меньшем допировании. Отличие хорошо видно при срав-

нении панелей (с) и (f) Рисунка 10.11. Симметрия d -типа при большом допировании и совпадающие по фазе параметры порядка на карманах $h_{1,2}$ согласуются с решением fRG [447].

10.5. Симметрия щели в KFe_2As_2 и гармоники $\cos 4\theta$ в LiFeAs

Здесь мы обсудим системы, в которых есть только дырочные Ферми-поверхности. Главным примером таких систем является KFe_2As_2 , находящееся на самом “конце” семейства дырочно-допированного соединения $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. Синхротронные ARPES-измерения на этом материале [452, 466] показывают наличие двух дырочных карманов, центрированных на точке Γ ($\mathbf{k} = (0, 0)$) и маленьких дырочных “пропеллеров” вблизи точки (π, π) , но никаких электронных карманов. В последующих лазерных ARPES-измерениях [467] были выявлены три дырочных кармана вблизи точки Γ , из которых внутренний и внешний имеют орбитальный характер d_{xz}/d_{yz} , а третий, внешний Ферми-карман, имеет d_{xy} -характер. Электронная структура с тремя дырочными карманами вблизи точки Γ и дырочными “пропеллерами” в углах зоны Бриллюэна согласуется с первопринципными зонными расчётами (см., например, [453]) и с тенденциями, обнаруженными в ARPES на $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ при увеличении x .

Измерения глубины проникновения и транспортных свойств KFe_2As_2 [454, 455] показывают линейную по температуре зависимость, подобно наблюдаемой в $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$. Есть два теоретических сценария такого поведения. Один из них состоит в том, что щель имеет симметрию $d_{x^2-y^2}$, вызванную, в основном, внутризонным взаимодействием на $2k_F$ внутри самого большого дырочного кармана. В этом случае параметр порядка имеет нули вдоль направления $k_x = k_y$, что естественным образом объясняет наблюдаемое линейное по T поведение. Другой сценарий состоит в том, что усиленное магнитными флуктуациями электрон-дырочное взаимодействие всё ещё может привести к $s_{\pm}$ -состоянию [444],

несмотря на то, что электронные карманы зашелены. При этом линейная зависимость от T возникает либо за счёт малости щели на одном из карманов, либо из-за возможного присутствия горизонтальной линии нулей при каком-то k_z на другом дырочном кармане. Исследования в fRG [447] указывают на d -тип, как на главную нестабильность, в то время, как RPA-SF анализ [444] и наш аналитический подход в ЛАНА [11, 12] показывают, что s - и d -типы решений очень близки.

Так как наличие щели d -типа естественным образом объясняет линейную зависимость от температуры, она рассматривалась как наиболее вероятный кандидат. Это привело к спекуляциям о возможном состоянии с нарушенной симметрией по отношению к обращению времени, спаривании $s + id$ -типа, в $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ при $x \leq 1$ [468]. Однако, измерения щелей на трёх дырочных карманах с помощью лазерной ARPES [467] не подтверждают наличие щели d -типа. Данные ARPES показывают, что: 1) на внешнем кармане самая маленькая из измеренных щелей, хотя все теоретические расчёты говорят о том, что она должна быть самой большой [11, 12, 444, 447] для d -типа симметрии; 2) щель на самом малом дырочном кармане (внутреннем) имеет угловую зависимость, но не имеет нулей; 3) щель на среднем дырочном кармане имеет случайные линии нулей. Все три результата не согласуются с наличием щели d -типа. Эти данные частично согласуются с теоретическими предсказаниями для A_{1g} -симметрии щели [11, 12, 444] в том, что меньшая щель находится на внешнем кармане. Однако, существенная угловая зависимость щелей и линии нулей на среднем дырочном кармане не согласуется с не зависящей от угла щелью A_{1g} -типа в ЛАНА [11, 12], а также противоречит спин-флуктуационному анализу, согласно которому параметр порядка A_{1g} -типа не имеет линий нулей, кроме как на определённом k_z , где он на среднем кармане просто равен нулю. С точки зрения эксперимента в лазерном ARPES измеряется щель, усреднённая по некоторой области значений k_z [467], так что горизонтальные линии нулей не должны давать вклад.

Далее мы покажем, что сверхпроводящее состояние с расширенной s -симметрией (A_{1g}) и линиями нулей естественным образом возникает, когда присутствуют только дырочные карманы и если взаимодействие между фермионами наиболее сильно при малых переданных импульсах. Это случай, когда спиновые и зарядовые флуктуации не сильны и эффективное куперовское взаимодействие довольно хорошо описывается членами первого порядка по взаимодействию, описываемому комбинацией хаббардовского и хундовского внутри- и межорбитальных взаимодействий, одетых матричными элементами перехода от орбитального к зонному базису. Мы рассмотрим только прямое взаимодействие между атомами железа и пренебрежём взаимодействием через пниктид As. В такой ситуации можно работать в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe на ячейку (1-FeBZ), где дырочные “пропеллеры” будут расположены вблизи $(\pi, 0)$ и связанных с ней по симметрии точках, а внешний дырочный карман, имеющий d_{xy} -характер, будет центрирован на точке (π, π) .

Когда взаимодействия в 1-FeBZ максимальны на малых волновых векторах, дырочный карман в районе точки (π, π) и “пропеллеры” в $(\pi, 0)$ не очень важны, т.к. вся физика определяется внутри- и межзонным взаимодействием двух дырочных карманов, центрированных на точке Γ . Для не зависящего от угла взаимодействия сверхпроводимость возможна только когда межзонное взаимодействие превышает внутризонное. Тогда в системе возникает состояние $s_{\pm}$ -типа, в котором параметр порядка имеет разные знаки на двух дырочных Ферми-поверхностях. Мы, однако, покажем, что если присутствует угловая зависимость, сверхпроводимость возникает даже если внутризонное взаимодействие является самым большим. Более того, когда внутри- и межзонные взаимодействия сравнимы, что соответствует случаю KFe_2As_2 , поскольку оба дырочных кармана малы и центрированы на одной точке, угловая компонента внутризонного взаимодействия увеличивается и в параметре порядка возникает сильная угловая зависимость на дырочных Ферми-поверхностях, а также случайные линии нулей, даже если угловая компонента мала.

10.5.1. Подход

Далее мы будем рассматривать только A_{1g} -тип симметрии параметра порядка, так как B_{1g} -тип был подробно рассмотрен нами ранее. Взаимодействия $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$ в общем случае зависят от углов на Ферми-поверхностях. В разделе 10.2 мы рассматривали случай, когда в A_{1g} -канале на дырочных Ферми-поверхностях присутствовали только не зависящие от угла члены, что приводило к независимости Δ_{h_i} от угла, см. (10.19). Здесь мы идём на один шаг дальше и добавляем следующие за главными гармоники $\cos 4\theta_{i,j}$ и, далее, также члены $\cos 8\theta_{i,j}$ в $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$. Это приводит к возникновению угловой зависимости $\cos 4\theta_i$ и $\cos 8\theta_i$ параметра порядка Δ_{h_i} . Мы не рассматриваем более высокие гармоники, поскольку полученные в эксперименте щели хорошо описываются с помощью $\cos 4\theta_i$ и $\cos 8\theta_i$ [467].

Величина зависящих от углов членов во взаимодействии $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$ определяется структурой интегралов перескока в орбитальном базисе [200], то есть конкретным веществом. Тем не менее, данные ARPES по слабо- и средне-допированному $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ практически не показывают угловых вариаций щелей на дырочных карманах, что, скорее всего, означает малость зависящих от угла членов $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$ в допированных калием системах 122 [469]. Можно также было бы ожидать слабую угловую зависимость щелей A_{1g} -типа в соединении KFe_2As_2 . Однако, как мы покажем, это несправедливо, если куперовское взаимодействие в KFe_2As_2 вовлекает два дырочных кармана, центрированных на точке Г. Тогда член с угловой зависимостью $\cos 4\theta$ в параметре порядка увеличивается и может привести к нулям щели.

Возникновение линий нулей и сильной угловой зависимости щели ($\sim 4\theta$) было показано ранее [395] при изучении трёхмерной зонной структуры $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ при наличии электронных карманов и спаривании за счёт спиновых флуктуаций. Однако, линии нулей присутствовали только при определённых k_z . Здесь мы рассматриваем квазидвумерный случай и щель в трёхмерии

будет иметь вертикальные линии нулей, присутствующие при любом k_z .

Чтобы продемонстрировать возникающую физику, мы сначала аналитически рассмотрим случай двух дырочных карманов h_1 и h_2 вблизи точки $(0, 0)$, добавим $\cos 4\theta$ -зависимость внутризонного $h_1 - h_2$ взаимодействия и покажем, как возникают линии нулей либо на обоих, либо на одном из дырочных карманов, даже для слабо зависящего от угла взаимодействия. Затем в разделе 10.5.3 мы рассмотрим полную модель с тремя дырочными карманами, используем в качестве исходных данных взаимодействия $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$, полученные из пятиорбитальной модели, осуществим подгонку с помощью первых трёх угловых гармоник (константа, $\cos 4\theta_i$ и $\cos 8\theta_i$) и решим матричные 9×9 уравнения на щель. Мы покажем, что меж- и внутризонные взаимодействия, связанные с карманами h_1 и h_2 , практически одинаковы и что угловая зависимость взаимодействий довольно слаба. Тем не менее, решение матричного уравнения на щель A_{1g} -типа приводит к не обусловленным симметрией нулям по крайней мере на одном дырочном кармане. Этот анализ также показывает, что щель на Ферми-поверхности вблизи точки (π, π) довольно мала, т.е. спаривание в основном определяется взаимодействиями между фермионами вблизи точки Γ .

В разделе 10.5.4 мы рассмотрим относительную фазу членов $\cos 4\theta$ на различных Ферми-поверхностях и покажем, что знак этих членов на какой-либо определённой Ферми-поверхности (по крайней мере частично) определяется её формой. Там же мы обсудим ситуацию с пниктидом LiFeAs, в котором гармоники $\cos 4\theta$ были обнаружены на дырочных и электронных карманах [470–472].

10.5.2. Модель с двумя дырочными карманами вблизи точки $(0, 0)$

Как было сказано ранее, мы оставим гармоники $\cos 4\theta$ в угловой зависимости межзонного взаимодействия $U_{h_1 h_2}$, а внутризонные взаимодействия $U_{h_1 h_1}$ и

$U_{h_2h_2}$ оставляем константами, т.е.

$$\begin{aligned} U_{h_1h_1}(k, p) &= U_{11}, \quad U_{h_2h_2}(k, p) = U_{22}, \\ U_{h_1h_2}(k, p) &= U_{12} (1 + \alpha_{12} \cos 4\theta_k + \alpha_{21} \cos 4\theta_p), \end{aligned} \quad (10.27)$$

где углы θ отсчитываются от направления оси x .

Линеаризованное уравнение БКШ на параметр порядка имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta_{h_1}(p) &= -LN_{F_1} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_k}{2\pi} U_{h_1h_1}(p, k) \Delta_{h_1}(k) - LN_{F_2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_k}{2\pi} U_{h_1h_2}(p, k) \Delta_{h_2}(k), \\ \Delta_{h_2}(p) &= -LN_{F_1} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_k}{2\pi} U_{h_2h_1}(p, k) \Delta_{h_1}(k) - LN_{F_2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_k}{2\pi} U_{h_2h_2}(p, k) \Delta_{h_2}(k), \end{aligned} \quad (10.28)$$

где $L \sim \ln \left(\frac{E_F}{T_c} \right)$ и $N_{F_{1,2}}$ - плотности состояний соответствующих дырочных зон. Для взаимодействий (10.27) структура параметра порядка получается равна

$$\Delta_{h_{1,2}}(p) = \Delta_{1,2} (1 + r_{1,2} \cos 4\theta_p). \quad (10.29)$$

Одинаковые дырочные карманы

Сначала мы рассмотрим случай одинаковых плотностей состояний на уровне Ферми для двух дырочных карманов $N_{F_1} = N_{F_2} \equiv N_F$ и затем обобщим на случай $N_{F_1} \neq N_{F_2}$. В первом случае естественно взять $U_{11} = U_{22} = U$ и $\alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha$, а также ввести безразмерные константы связи $u_{12} = N_F U_{12}$ и $u = N_F U$. При положительном u_{12} , что мы и рассматриваем, решением уравнения на параметр порядка является $\Delta_{h_1} = -\Delta_{h_2}$ и $r_1 = r_2 = u_{12}\alpha L$, где

$$L = \frac{-(u - u_{12}) + \sqrt{(u - u_{12})^2 + 2(u_{12}\alpha)^2}}{(u_{12}\alpha)^2}. \quad (10.30)$$

Отметим, что для любого $\alpha \neq 0$ получается $L > 0$, т.е. $T_c > 0$, не зависимо от того, каковы знаки $u_{12} - u$ и α (см. работу [473]). Также отметим, что такая структура щели $s_{\pm}$ -типа с различными знаками параметра порядка

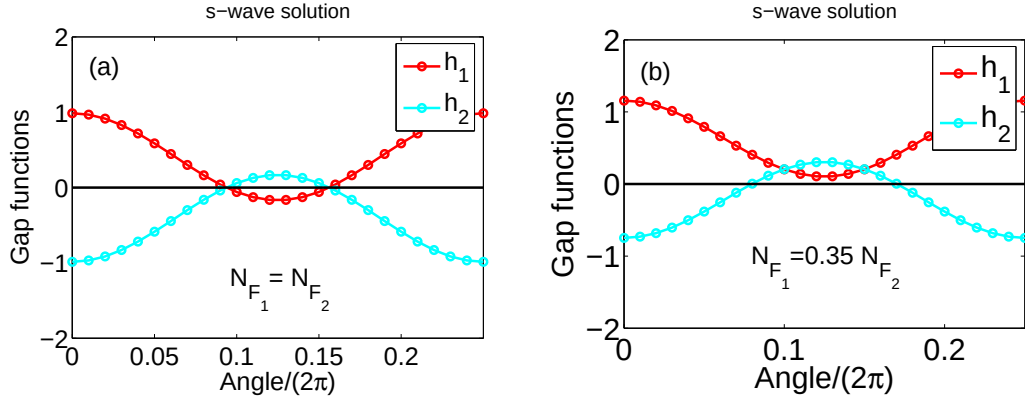


Рис. 10.12. (а) Зависимость параметра порядка от угла на соответствующей Ферми-поверхности (h_1 и h_2) для равных плотностей состояний $N_{F_1} = N_{F_2}$ на обоих дырочных карманах. Мы использовали параметры $U_{11} = U_{22} = U_{12}$ и $\alpha = 0.1$. Параметр порядка удовлетворяет соотношениям $\Delta_{h_1} = -\Delta_{h_2} = \Delta(1 + \sqrt{2} \cos 4\theta)$ и имеет нули на обеих Ферми-поверхностях. На панели (b) показан случай $N_{F_1} = 0.35 N_{F_2}$. При этом параметры порядка неэквивалентны и на внутреннем дырочном кармане есть угловая зависимость, но нет нулей.

на различных Ферми-поверхностях отличается от предложенной в работе [444], где параметр порядка на дырочных карманах имеет одинаковый знак, а на той части электронной дисперсии, которая могла бы сформировать электронный карман, открывается щель другого знака.

Стоит обсудить свойства такого решения, рассматривая различные наборы параметров. При малых α и при $u > u_{12}$ получается $L = \frac{2(u-u_{12})}{(u_{12}\alpha)^2}$ и $r_1 = \frac{2(u-u_{12})}{|u_{12}\alpha|}$. При малых α это приводит к решению с линиями нулей ($r_1 > 1$), хотя T_c при этом мало. При $u < u_{12}$ получается $L = \frac{1}{|u-u_{12}|}$ и $r_1 = \frac{|u_{12}\alpha|}{|u-u_{12}|} < 1$. При малых α щель не имеет нулей и T_c больше, чем в предыдущем случае. Самый интересный случай, относящийся к KFe_2As_2 , это когда $u = u_{12}$ (внутри- и межзонные взаимодействия неразличимы, поскольку обе Ферми-поверхности центрированы на одной и той же точке Γ). В этом случае мы получаем $r_1 = \sqrt{2}$, независимо от значения α , что означает появление линий нулей щели даже при очень слабой зависимости взаимодействия от угла [473]. На Рисунке 10.12(а) показана структура параметра порядка для этого случая.

Неэквивалентные дырочные карманы

Здесь мы рассмотрим случай неэквивалентных дырочных карманов, когда $N_{F_1} \neq N_{F_2}$ и, в общем случае, $U_{11} \neq U_{22}$. Каждое из этих условий приводит к тому, что $u_{11} = N_{F_1}U_{11}$ отличается от $u_{22} = N_{F_2}U_{22}$. В принципе, α_{12} также отличается от α_{21} , но, поскольку нас интересуют малые α , эта неэквивалентность не важна и мы будем принимать их равными $\alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha$.

Возникают сразу два вопроса: существует ли решение для всех параметров и какова структура двух щелей? Из выражений (10.28) получаем уравнение четвёртого порядка для L :

$$\begin{aligned} \frac{(u_{12}\alpha)^4}{4}L^4 - \frac{(u_{12}\alpha)^2(u_{11} + u_{22})}{2}L^3 + [u_{11}u_{22} - u_{12}u'_{12} - (u_{12}\alpha)^2]L^2 + \\ + (u_{11} + u_{22})L + 1 = 0, \end{aligned} \quad (10.31)$$

где $u_{12} = N_{F_1}U_{12}$ и $u'_{12} = N_{F_2}U_{12}$. Сверхпроводящее решение, т.е. конечное T_c , существует, если это уравнение имеет решение с $L > 0$. Полный анализ уравнения (10.31) элементарен, хотя и сложен [451], и показывает, что для произвольных U_{11} , U_{22} и U_{12} , решение существует, когда параметры удовлетворяют определённому неравенству. Однако, в случае, имеющем отношение к KFe_2As_2 , т.е. когда $U_{11} = U_{22} = U_{12}$ и $u_{11}u_{22} = u_{12}u'_{12}$, решение существует для произвольных N_{F_1}/N_{F_2} и L оказывается порядка $1/(\sqrt{u_{12}u'_{12}}\alpha)$. Мы проанализировали структуру щели в этом случае и обнаружили, что, как и ожидалось, параметры порядка на двух карманах более не удовлетворяют соотношению $\Delta_{h_1} = -\Delta_{h_2}$, а также $r_1 \neq r_2$. Как результат, в некоторой области значений N_{F_1}/N_{F_2} одна щель имеет нули, а другая - нет. Такая ситуация показана на Рисунке 10.12(b).

Следовательно, решение $s_{\pm}$ с нулями щели в общем случае наиболее выгодно при $U_{11} \approx U_{22} \approx U_{12}$, что соответствует случаю KFe_2As_2 , и даже бесконечно малая величина α приводит к возникновению нулей щели. T_c для решения с нулями ниже, чем для решения без нулей (для которого T_c не зависит от α при малых α), что также согласуется с малым T_c в KFe_2As_2 в сравнении с оптимально допированным соединением $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$.

Таблица 10.6. Параметры A_{1g} -компоненты куперовской вершины, полученные подгонкой с помощью уравнения (10.32) куперовской вершины из подхода RPA-SF в 5-орбитальной модели при сильном допировании дырками ($\mu = -0.20$, $U = 1$ эВ, $J = 0.25$ эВ и $V = 0.69$ эВ). Значения, выделенные жирным шрифтом, это величины взаимодействий, в которые вовлечены фермионы с карманов h_1 и h_2 .

U_{11}	α_{11}, β_{11}	U_{22}	α_{22}	β_{22}	U_{12}	α_{12}	α_{21}	β_{12}, β_{21}	U_{33}	U_{13}	U_{23}
0.48	0	0.42	0.08	0	0.44	0	0.08	0	0.87	0.24	0.15

10.5.3. Пятиорбитальная модель с тремя дырочными карманами

Сейчас мы рассмотрим “более микроскопический” подход и решим задачу сверхпроводимости используя “голые” взаимодействия $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$, полученные из 5-орбитальной модели. При этом одноузельные хаббардовские и хундовские меж- и внутриорбитальные взаимодействия в орбитальном базисе преобразуются в зонный базис, т.е. взаимодействия “одеваются” зависящими от углов матричными элементами межбазисного перехода [11, 12, 200]. Мы используем зонную структуру для такого дырочного допирования, когда электронные карманы исчезают, оставляя только два дырочных кармана вблизи точки Γ и один дырочный карман вблизи точки (π, π) . Ферми-поверхность показана на Рисунке 10.2. Мы осуществляем подгонку всех A_{1g} -компонент куперовской вершины первыми тремя угловыми гармониками:

$$U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j}) = U_{ij} (1 + \alpha_{ij} \cos 4\theta_k + \alpha_{ji} \cos 4\theta_p + \beta_{ij} \cos 8\theta_k + \beta_{ji} \cos 8\theta_p). \quad (10.32)$$

Результат подгонки параметров показан на Рисунке 10.13. Согласие с результатом RPA-SF практически идеальное, что вселяет уверенность в законности пренебрежения высшими гармониками. Значения параметров U_{ij} , α_{ij} и β_{ij} приведены в Таблице 10.6. Отметим, что величины U_{11} , U_{22} и U_{12} сопоставимы, а зависящая от угла часть довольно мала. Это именно тот режим, что мы рассматривали аналитически выше.

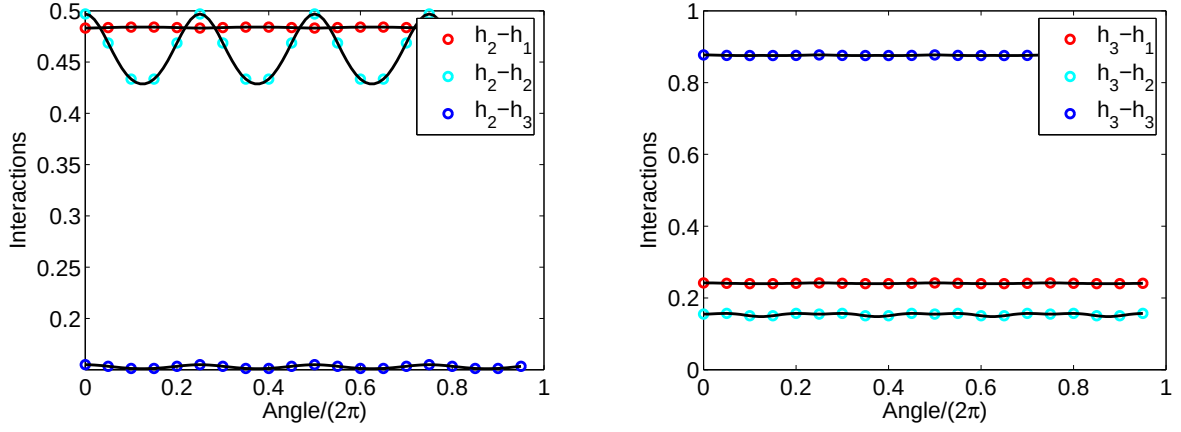


Рис. 10.13. Результат подгонки $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$ в ЛАНА в A_{1g} -канале (сплошные линии) и куперовская вершина в RPA-SF (точки) для 5-орбитальной модели при сильном допировании дырками с $\mu = -0.2$, когда электронные карманы только исчезли. Мы зафиксировали $\mathbf{k}_{F_i}$ вдоль направления x на кармане h_2 (слева) и h_3 (справа), а $\mathbf{k}_{F_j}$ меняется на каждой из трёх Ферми-поверхностей.

Для куперовской вершины из уравнения (10.32) все параметры порядка Δ_{h_i} имеют вид

$$\Delta_{h_i} = \Delta_i (1 + r_i \cos 4\theta + \bar{r}_i \cos 8\theta). \quad (10.33)$$

Мы получаем Δ_{h_i} решая матричные уравнения 9×9 и выбирая решение с наибольшим собственным значением, соответствующим притяжению. Для простоты мы положили все N_{F_i} равными. Результат представлен на Рисунке 10.14(а). Главная особенность состоит в том, что щель A_{1g} -типа имеет нули, хотя зависящий от угла член взаимодействия довольно мал, см. Таблицу 10.6. Мы видим, что щель на внешнем дырочном кармане меньше остальных, как мы и ожидали, т.е. доминирующее взаимодействие, приводящее к сверхпроводимости $s_{\pm}$ -типа, это взаимодействие между карманами h_1 и h_2 . Для использованного нами набора параметров 5-орбитальной модели соотношения взаимодействий в куперовской вершине таково, что параметр порядка самый большой на Ферми-поверхности h_2 и имеет там нули. Это является следствием того факта, что внутризонное отталкивание фермионов на кармане h_1 больше, чем на h_2 . Мы, однако, удостоверились, что соотношение параметров порядка на карманах h_1

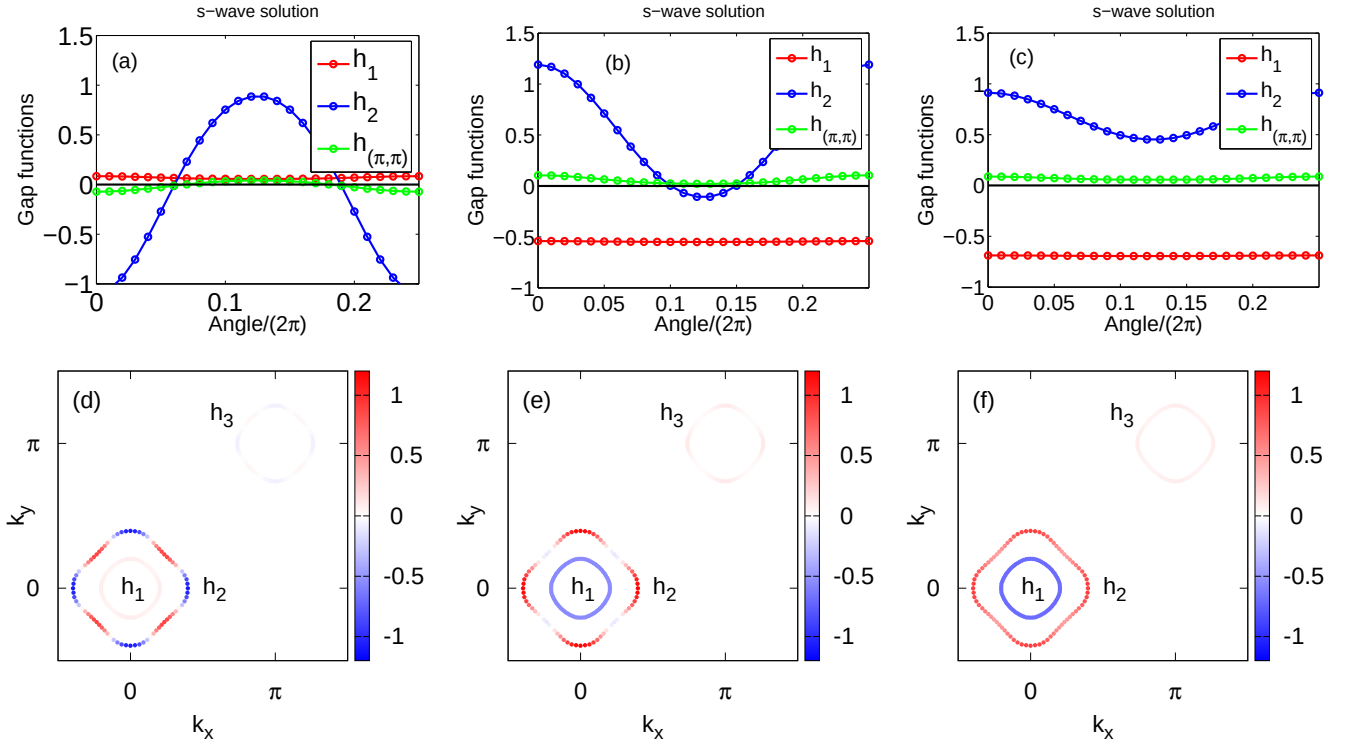


Рис. 10.14. (a,d) Параметр порядка A_{1g} -типа, полученный при решении матричного уравнения 9×9 для 5-орбитальной модели. Параметры приведены в Таблице 10.6. Параметр порядка A_{1g} -типа на панелях (b,e) и (c,f) получен при изменении $U_{11} \rightarrow 0.97U_{11}$ и $U_{11} \rightarrow 0.95U_{11}$, соответственно. Видно, что структура параметра порядка существенно меняется при малых изменениях U_{11} . Щель на кармане h_3 очень мала и практически не видна.

и h_2 зависит от деталей взаимодействий и параметры порядка становятся сравнимы по величине, когда мы совсем немного изменяем входные параметры. Чтобы это проиллюстрировать, параметры порядка для случаев, когда была немного изменена величина внутризонного отталкивания U_{11} , показаны на Рисунках 10.14(b) и (c) для $U_{11} \rightarrow 0.97U_{11}$ и $U_{11} \rightarrow 0.95U_{11}$, соответственно. Видно, что такое малое изменение величины взаимодействия существенно влияет на структуру параметра порядка, приводя к тому, что величины параметров порядка на карманах h_1 и h_2 становятся сравнимы, а нули исчезают с кармана h_2 .

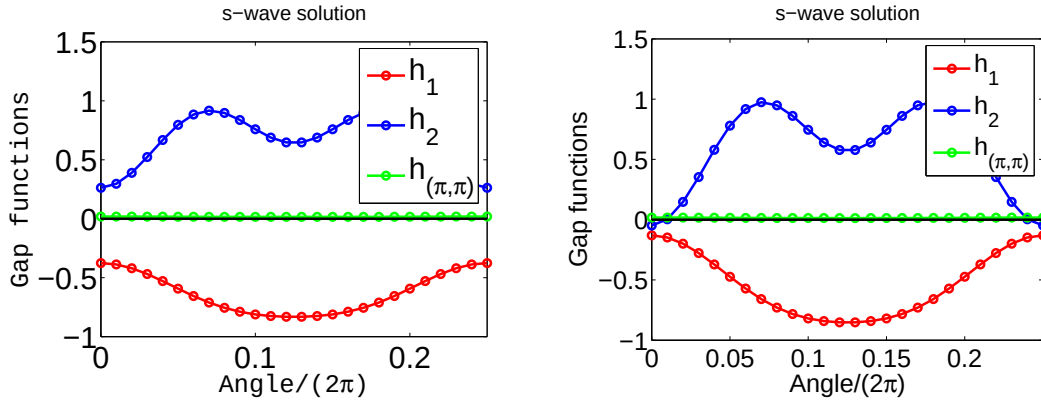


Рис. 10.15. Слева показан параметр порядка A_{1g} -типа на Ферми-поверхностях h_1 и h_2 , полученный при решении матричных уравнений 9×9 с $U_{h_i, h_j}(\mathbf{k}_{F_i}, \mathbf{k}_{F_j})$ из 5-орбитальной модели с полным взаимодействием в RPA. Основной эффект перенормировок RPA на дырочно-дырочное взаимодействие состоит в увеличении U_{ij} . Оно немного больше для U_{12} , чем для U_{11} и U_{22} , поскольку перенормированное взаимодействие всё ещё больше на больших импульсах. Справа показано то же самое, но при немного увеличенном внутризонном взаимодействии $U_{11,22} \rightarrow 1.23U_{11,22}$ и немного уменьшенном межзонном взаимодействии $U_{12} \rightarrow 0.85U_{12}$. В этом случае щель на кармане h_2 имеет нули. Основное отличие от Рисунка 10.14 состоит во вращении направления максимума щели на 45° .

10.5.4. Относительная фаза компонент щели $\cos 4\theta$ на различных Ферми-поверхностях

Здесь мы обсудим, что определяет относительные фазы осцилляций $\cos 4\theta$ параметра порядка A_{1g} -типа на различных Ферми-поверхностях не только в KFe_2As_2 , но и в других соединениях железа, в которых имеются дырочные и электронные карманы. Такой анализ имеет отношение к экспериментам поскольку угловые зависимости были обнаружены не только в KFe_2As_2 [467], но и в LiFeAs [470–472], где присутствуют как дырочные, так и электронные карманы [255].

Общий результат состоит в том, что не существует простого соотношения между знаком компоненты $\cos 4\theta$ и геометрией Ферми-поверхности. Анализ 5-орбитальной модели отражает эту неуниверсальность: максимум щели на кармане h_2 расположен вдоль направления удлинения этой Ферми-поверхности, см. Рисунок 10.14, если мы используем “голые” взаимодействия, но его

положение смещается на 45° , если мы используем полное взаимодействие со спин-флуктуационной компонентой в RPA, результат которого представлен на Рисунке 10.15. В предыдущих исследованиях 5-орбитальной модели при малом допировании дырками, когда присутствовали дырочные и электронные карманы [198, 200], параметр порядка A_{1g} -типа имел максимумы на карманах h_1 и h_2 вдоль направления удлинения каждой из двух Ферми-поверхностей. Однако неизвестно, насколько этот результат чувствителен к изменениям параметров.

Такое простое соотношение удивительно хорошо работает при анализе экспериментальных данных. Согласно лазерному ARPES [467], Ферми-поверхности h_1 и h_2 удлинены вдоль x и y направлений, а Δ_{h_1} и Δ_{h_2} имеют члены $\cos 4\theta$ с отрицательными множителями, т.е. поведение аналогично представленному на Рисунке 10.15. Оно также работает для другого соединения железа, LiFeAs, где в ARPES [470, 471] и в STM [472] обнаружены вариации щели $\cos 4\theta$ на дырочных карманах. Дырочные карманы вблизи точки Γ в LiFeAs, согласно ARPES [253] и экспериментам по квантовым осцилляциям [254], имеют следующую форму: внутренний карман очень мал, либо вообще не существует, а внешний вытянут вдоль направления $x = \pm y$. Если зависимость $\cos 4\theta$ в основном из-за удлинения, максимум щели на кармане h_3 должен быть повернут на 45° по отношению к направлению на электронный карман. Это согласуется с результатами ARPES и STM [470, 472]. Существует отличие результатов измерений ARPES и квантовых осцилляций в размере среднего дырочного кармана, который в последнем случае получается больше. Тем не менее, согласно этим экспериментам средний карман удлинён вдоль направлений x и y , и, следовательно, максимум щели должен быть в направлении на электронный карман, т.е. вдоль направления $x = \pm y$. Вариации щели $\cos 4\theta$ на кармане h_2 не были обнаружены в ARPES, но были получены из анализа данных STM, см. работу [472], и находятся в согласии с нашей простой оценкой. Действительно ли антикорреляция между направлением удлинения Ферми-поверхности и направлением, вдоль которого A_{1g} -щель имеет максимум, специфична для KFe_2As_2 и

LiFeAs или более универсальна, ещё предстоит выяснить.

10.6. Обсуждение

Одним из преимуществ ЛАНА является возможность варьировать эффективные параметры взаимодействия U_{ij} и $\tilde{U}_{ij}$, таким образом определяя насколько стабильно какое-либо конкретное решение для щели. В такой фермиологической картине можно понять, какое именно взаимодействие приводит к спариванию. На Рисунке 10.16 схематически показаны фазовая диаграмма и Ферми-поверхности для различных уровней допирования. В зависимости от топологии и взаимного объёма дырочных и электронных карманов может возникнуть конкуренция $s_{\pm}$ - и d -типов щелей. Однако, при наличии и электронных и дырочных карманов выигрывает всегда $s_{\pm}$ -состояние. Доминирующее взаимодействие U_{ij} и $\tilde{U}_{ij}$, которое было получено из анализа ЛАНА, показано стрелками, связывающими частицы на Ферми-поверхностях. Так, главное взаимодействие при слабом допировании - это взаимодействие между электронными и дырочными карманами, $U_{\alpha\beta}$, и доминирует $s_{\pm}$ состояние. При электронном допировании большой величиной обладает отталкивание внутри электронного кармана $U_{\beta\beta}$, и системе выгодно сформировать знакопеременную щель на электронных карманах чтобы уменьшить этот вклад. Тогда возникает $s_{\pm}$ состояние с линиями нулей на электронной Ферми-поверхности. При экстремальном электронном допировании, соответствующем $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$, когда дырочные карманы пропадают, система формирует d -тип сверхпроводимости из-за сильного взаимодействия между электронными Ферми-карманами. Остаётся открытым вопрос, будет ли выгодно такое состояние по сравнению со связующе-антисвязующим $s_{\pm}$ состоянием [10, 461] при переходе в зону Бриллюэна, соответствующую двум атомам Fe на элементарную ячейку. Казалось бы, из-за спин-орбитального взаимодействия, которое там очевидно присутствует [340], и следующей из него гибридизации вдоль симметричных направлений, связующе-антисвязующее $s_{\pm}$ состояние

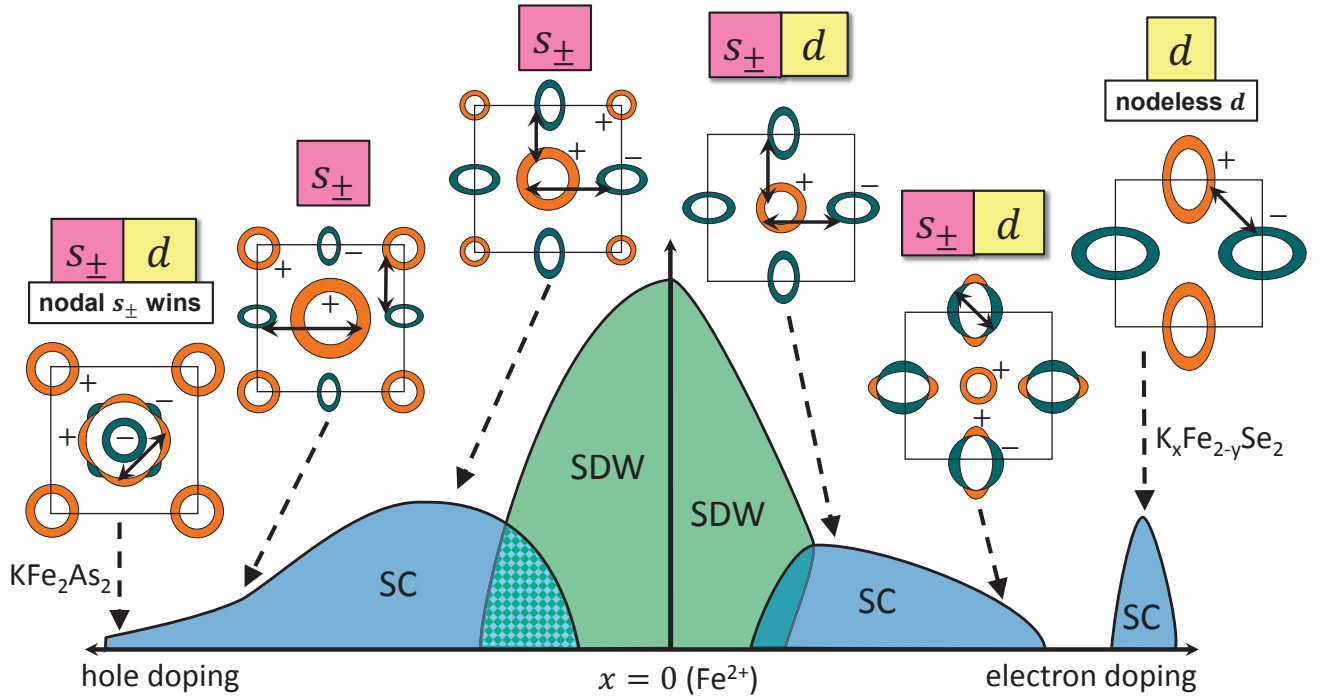


Рис. 10.16. Схематическая фазовая диаграмма соединений железа для допирования дырками и электронами. Сосуществование АФМ (SDW) и сверхпроводящей (SC) фаз является микроскопическим для электронного и макроскопическим (разбивка на SDW и SC области) для дырочного допирования. Качественная картина симметрий сверхпроводящего параметра, следующая из спин-флуктуационной теории [10, 198, 200] и приближения ЛАНА [7, 11, 12] для двумерной системы, показана над фазовой диаграммой на схематических Ферми-поверхностях. Подписи ($s_{\pm}$, d) обозначают доминирующую и сабдоминирующую симметрию спаривания. Стрелками ($\leftrightarrow$) показано доминирующее взаимодействие.

должно быть наиболее выгодным [474]. Но как показывают расчёты в 10-орбитальной модели для $K_{0.8}Fe_{1.7}Se_2$ и $K_{0.85}Fe_{1.8}Se_2$, доминирующим всегда является $d_{x^2-y^2}$ -тип спаривания [462].

При дырочном допировании, наоборот, из-за возникновения нового дырочного кармана γ вблизи точки (π, π) стабилизируется $s_{\pm}$ -состояние без нулей на Ферми-поверхности. В эту картину вносит вклад орбитальный характер зон. Так как карман γ сформирован в большей степени d_{xy} орбиталью, как и малые области на электронных карманах (см. Рисунок 5.7), то новый канал рассеяния на него с электронных карманов приводит к изотропизации щели на электронных карманах. При дальнейшем допировании дырками, когда электронные кар-

маны исчезают, как в KFe_2As_2 , сильное взаимодействие внутри дырочного кармана α_2 заставляет систему сформировать знакопеременную щель с линиями нулей на этом кармане. Симметрия щели по прежнему относится к представлению A_{1g} и представляет собой $s_{\pm}$ -состояние с добавленными высшими угловыми гармониками [7].

Основной вывод нашего подхода состоит в том, что все сверхпроводящие состояния, полученные до сих пор, можно получить в рамках одного универсального сценария сверхпроводящего спаривания, основанного на спиновых флуктуациях. Более того, показано, что все эти сверхпроводящие состояния естественным образом возникают в эффективной низкоэнергетической модели с небольшим числом параметров.

Нами получены ответы на ряд вопросов, которые можно сформулировать следующим образом:

- *Какова природа сильной угловой зависимости параметра порядка $s_{\pm}$ -типа на электронных карманах?*

Найдено, что природа различна в случае “голого” и полного взаимодействий. Для “голых” взаимодействий (без спин-флуктуационной компоненты) комбинация внутри- и межзонных отталкиваний на электронных карманах больше, чем межзонное электрон-дырочное взаимодействие, и притяжение $s_{\pm}$ -типа целиком обусловлено зависящей от угла частью электрон-дырочного взаимодействия (электрон-электронного в случае сильного допирования электронами), как и предполагалось в работах [394, 473]. А именно, система “подстраивает” величину зависящей от угла компоненты параметра порядка $\propto \pm \cos 2\theta$ на электронных карманах, чтобы минимизировать влияние внутризонного отталкивания на них.

При наличии полного взаимодействия со спин-флуктуационной компонентой электрон-дырочное взаимодействие является самым сильным и решение $s_{\pm}$ -типа существует, даже если положить все взаимодействия

не зависящими от угла. Члены, содержащие угловую зависимость, модифицируют структуру параметра порядка $s_{\pm}$ -типа, приводя к появлению $\pm \cos 2\theta$ -компонент. Достаточно ли велики эти компоненты, чтобы привести к нулям щели, зависит от различных деталей, но общая тенденция такова, что, если независимая от угла часть электрон-дырочного взаимодействия больше, вряд ли будут возникать нули щели.

- *Важна ли угловая зависимость всех взаимодействий, или можно некоторые приближённо считать не зависящими от угла?*

Зависящая от угла часть электрон-дырочного взаимодействия важна. Зависящая от угла часть электрон-электронного взаимодействия слабо влияет на структуру параметра порядка, по крайней мере для полного взаимодействия со спин-флуктуационной компонентой.

- *Почему решение $s_{\pm}$ -типа, получаемое в подходах RPA-SF и fRG имеет линии нулей в системе с двумя дырочными и двумя электронными карманами и не имеет нулей в системе с тремя дырочными карманами?*

Мы обнаружили, что независимая от угла часть электрон-дырочного взаимодействия, которая благоприятствует $s_{\pm}$ -щели без линий нулей, увеличивается, если присутствует третий дырочный карман. Для большинства параметров взаимодействия, которые мы проанализировали, $s_{\pm}$ -щель имела нули при электронном допировании (четыре Ферми-поверхности), но при дырочном допировании (пять Ферми-поверхностей) стабилизировалось решение без нулей. В работе [444] указано, что такое соотношение может быть связано с орбитальным d_{xy} -характером третьей дырочной Ферми-поверхности, которая сильно взаимодействует с d_{xy} -состояниями на концах электронных карманов. Однако, мы обнаружили, что для некоторых параметров взаимодействия реализуется решение с нулями на электронных Ферми-поверхностях при наличии пятой Ферми-поверхности. Это зна-

чит, что исчезновение нулей с появлением новой Ферми-поверхности не является универсальным результатом. Кроме того, структура параметра порядка может переходить от имеющих нули к не имеющих их при изменении величины зависящей от угла части взаимодействий.

- *Как влияет на структуру куперовского взаимодействия наличие или отсутствие спин-флуктуационной компоненты, добавленной к прямому фермион-фермионному взаимодействию?*

Мы обнаружили, что спин-флуктуационное взаимодействие в основном изменяет полную величину куперовского взаимодействия и практически не влияет на его угловую зависимость. Все компоненты куперовской вершины увеличиваются при добавлении спин-флуктуационного члена. Кроме этого, присутствует дополнительное увеличение электрон-дырочного межзонного взаимодействия в A_{1g} - и B_{1g} -каналах. Это дополнительное увеличение приводит к тому, что решения в A_{1g} - и B_{1g} -каналах соответствуют притяжению, т.е. сверхпроводящему спариванию.

Показано, что сверхпроводимость в KFe_2As_2 , в котором есть только дырочные карманы, может быть A_{1g} -типа с нулями щели. Такое состояние естественным образом возникает, если доминирующим является взаимодействие фермионов с малыми импульсами переноса. Это случай системы вдали от спиновой или зарядовой неустойчивости, когда взаимодействия можно приближённо считать определяемыми их голыми значениями. Такая ситуация возникает в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому железа на элементарную ячейку, при взаимодействиях между фермионами на дырочных карманах, расположенных вблизи точки Г. Когда меж- и внутризонные взаимодействия между фермионами на этих двух карманах близки по величине, существует решение A_{1g} -симметрии с параметром порядка, имеющем разные знаки на двух дырочных карманах и нули, по крайней мере на одном из них из-за вклада в щель от $\cos 4\theta$ - и $\cos 8\theta$ -компонент взаимодействия. Возникновение нулей и угол их рас-

положения θ не обусловлены симметрией щели. Такое $s_{\pm}$ -состояние с линиями нулей согласуется с термодинамическими, транспортными и лазерными ARPES измерениями на KFe_2As_2 .

Также представлено простое объяснение относительной фазы 4θ -компонент щелей на дырочной Ферми-поверхности, связывающее знаки членов $\cos 4\theta$ с формой дырочных карманов, и указано, что такое объяснение согласуется с данными по KFe_2As_2 и LiFeAs .

Суммируя вышеизложенное, можно сказать, что несмотря на многообразие материалов, многоорбитальная спин-флуктуационная теория спаривания объясняет многие наблюдаемые особенности сверхпроводников на основе железа. В частности, различные варианты экспериментально наблюдаемого поведения щели. Анизотропное $s_{\pm}$ -состояние и его структура нулей на Ферми-поверхностях очень чувствительна к таким деталям электронной структуры, как орбитальный характер зон, спин-орбитальное взаимодействие и изменение зонной структуры с допированием.

10.7. Заключение

Исследована сверхпроводящая фазовая диаграмма соединений железа на основе спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания в приближении главных угловых гармоник. Указано, какое именно взаимодействие на Ферми-поверхности доминирует при различных уровнях допирования. Показано, что при сильном допировании электронами, когда дырочные карманы пропадают (как в $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$), системе выгодно сформировать d -тип сверхпроводимости из-за сильного взаимодействия между электронными Ферми-карманами. Для соединения KFe_2As_2 , в котором есть только дырочные карманы, сверхпроводимость может быть A_{1g} -симметрии с нулями щели, не обусловленными симметрией параметра порядка. Такое $s_{\pm}$ -состояние согласуется с имеющимися экспериментальными данными по KFe_2As_2 .

Заключение

В результате теоретического исследования купратов, слоистых кобальтитов и сверхпроводящих соединений железа были получены следующие результаты:

1. Для недопированных ВТСП купратов р-типа (La_2CuO_4) и п-типа (Nd_2CuO_4 и Sm_2CuO_4) с помощью метода LDA+GTB определены параметры низкоэнергетических эффективных моделей, имеющих вид $t - t' - t'' - J$ модели с трёхцентровыми слагаемыми. Показано, что в купратах р-типа переход от слабодопированного моттовского диэлектрика к Ферми-жидкостному режиму с большой Ферми-поверхностью проходит через два перехода Лифшица. Обнаружено, что для $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ поверхность Ферми в области оптимального допирования характерна для допированного двумерного антиферромагнитного моттовского диэлектрика.

2. Получена эффективная многозонная модель кобальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$, в которой исследована эволюция магнитного отклика с допированием. В приближении Гутцвиллера рассмотрено влияние сильных электронных корреляций. Показано, что фазовую диаграмму исследуемых кобальтитов можно качественно объяснить в модели коллективизированных электронов с учётом изменения топологии Ферми-поверхности с допированием.

3. Исследовано влияние симметрии сверхпроводящей щели и электронной структуры на динамическую спиновую восприимчивость в слоистом кобальтите $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ в трёх различных моделях: однозонная a_{1g} -модель с перескоком между ближайшими соседями, реалистичная трёхзонная t_{2g} -модель как с e'_g карманами на поверхности Ферми, так и без них. Показано, что доминирующий вклад в магнитный отклик в нормальном состоянии создаётся антиферромагнитными спиновыми флуктуациями с большим волновым вектором, причём наличие или отсутствие e'_g -карманов не играет значительной роли. Ниже T_c наши результаты для $d_{x^2-y^2}$ - или d_{xy} -типов симметрий параметра порядка

согласуются с экспериментальными данными.

4. Предсказано возникновение спинового резонанса в неупругом нейтронном рассеянии при наличии $s_{\pm}$ -симметрии параметра порядка в сверхпроводниках на основе железа. Для этого была сформулирована четырёхзонная модель и вычислен спиновый отклик в состояниях с $s_{\pm}$ -, s_{++} - и d -симметриями сверхпроводящего параметра порядка. Показано, что резонансный пик ограничен антиферромагнитным вектором и быстро исчезает при удалении от него. Результаты неупругого рассеяния нейтронов в $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$ качественно согласуются с рассчитанным спиновым резонансом, возникающем на несоизмеримом волновом векторе.

5. В рамках теории магнетизма коллективизированных электронов магнитные свойства LaFeAsO моделируются состоянием волны спиновой плотности. Одноузельные кулоновские параметры многозонной модели Хаббарда подобраны так, чтобы получить экспериментально наблюдаемую температуру Нееля. Вычислена температурная зависимость параметра порядка состояния волны спиновой плотности Δ_{SDW} . Из величины спиновой щели при нулевой температуре, $\Delta_{SDW}(T = 0) = 31$ мэВ, вычислен магнитный момент $\mu = 0.33\mu_B$, приходящийся на атом Fe, что очень близко к наблюдаемому значению $0.25(5)\mu_B$. Показано, что температура Нееля быстро уменьшается при допировании в пниктидах $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, и уже при $x = 0.04$ исчезающе мала. Такое поведение, а также малая величина магнитного момента, являются следствием коллективизированной природы магнетизма в пниктидах. При этом мнимая часть спиновой восприимчивости на антиферромагнитном волновом векторе, обратно пропорциональная времени спин-решёточной релаксации T_1T в ЯМР, имеет Кюри-Вейсовский характер вплоть до $x \approx 0.11$, после которой показывает паулиевскую зависимость от температуры.

6. В двухзонной модели пниктидов, состоящей из зоны электронов и дырок, разнесённых на волновой вектор $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, объяснена экспериментально наблюдаемая температурная зависимость однородной спиновой восприимчиво-

сти. Причина линейного возрастания $\chi(T)$ с температурой в пниктидах та же, что и в двумерной Ферми-жидкости, а именно, наличие неаналитических поправок. Показано, что наклон линейной температурной зависимости определяется квадратом амплитуды рассеяния в канале волны спиновой плотности с вектором нестинга $\mathbf{Q}$. Эта амплитуда велика, что, вместе с малым значением энергии Ферми ε_F , усиливает температурную зависимость $\chi(T)$. Выбирая амплитуду рассеяния так, чтобы воспроизвести наблюдаемую температуру Нееля при нулевом допировании, мы получили наклон $\chi(T)$, который количественно согласуется с наблюдаемыми данными. Этот результат является подтверждением неаналитического поведения в двумерной Ферми-жидкости, а также аргументом в пользу модели коллективизированных электронов в пниктидах.

7. Рассмотрено неупругое динамическое рассеяние квазичастиц на спиновых и зарядовых флуктуациях в пятиорбитальной модели с локальным кулоновским взаимодействием для соединений железа. Массовый оператор получен с помощью диаграмм второго порядка, где поляризационный оператор вычислялся в приближении случайных фаз. Показано, что есть два фактора, дающие сильную анизотропию рассеяния. Самый важный состоит в том, что на одночастичное рассеяние сильно влияет орбитальный тип (d_{xz}, d_{yz}, d_{xy}) начального и конечного состояний, что и приводит к существенной импульсной зависимости эффективного взаимодействия. Второй фактор - это $\mathbf{k}$ -зависимость поляризационного оператора. Комбинация этих двух факторов приводит к сильной анизотропии рассеяния на электронных Ферми-поверхностях и возникновение долгоживущих состояний квазичастиц. Хотя в среднем время жизни электронов того же порядка, что и время жизни дырок, из-за анизотропии эффективных масс транспортные свойства определяются малыми участками электронных карманов с большими величинами Ферми-скоростей и времён жизни. Такая комбинация приводит к различию между транспортными свойствами электронов и дырок, что качественно объясняет наблюдаемые зависимости постоянной Холла и проводимости от допирования в пниктидах $\text{Ba}(\text{Fe}_{2-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ и $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$.

8. В двухзонной модели пниктидов исследовано влияние рассеяния на немагнитных и магнитных примесях на сверхпроводящее состояние. Показано, что при конечном значении параметра рассеяния на немагнитных примесях происходит переход из $s_{\pm}$ -состояния в s_{++} , то есть одна из двух щелей меняет знак, проходя через ноль. Переход возникает при положительном знаке усреднённой по зонам константы сверхпроводящего взаимодействия. При этом T_c остаётся конечной и практически не зависящей от параметра рассеяния на примесях, пропорционального концентрации примесей и величине рассеивающего потенциала. Для рассеяния на магнитных примесях при наличии только межзонного рассеяния T_c не подавляется полностью, а выходит на насыщение при больших значениях параметра рассеяния. Выяснено, что при этом параметр порядка $s_{\pm}$ -типа не изменяется, а s_{++} -состояние переходит в $s_{\pm}$ -состояние.

9. На основе спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания в приближении главных угловых гармоник описана сверхпроводящая фазовая диаграмма соединений железа и выяснено, какое именно взаимодействие на Ферми-поверхности доминирует при различных уровнях допирования. Показано, что при сильном допировании электронами, когда дырочные карманы пропадают, что соответствует соединению $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$, система формирует d -тип сверхпроводимости из-за сильного взаимодействия между электронными Ферми-карманами. С другой стороны, сверхпроводимость в KFe_2As_2 , в котором есть только дырочные карманы, может быть A_{1g} -симметрии с нулями щели, не обусловленными симметрией параметра порядка. Такое $s_{\pm}$ -состояние согласуется с термодинамическими, транспортными и лазерными ARPES измерениями на KFe_2As_2 .

Благодарности

Во-первых, я хочу поблагодарить свою жену за постоянную поддержку, без которой этот труд никогда не был бы закончен.

Во-вторых, хочу поблагодарить Сергея Геннадьевича Овчинникова за научное руководство в начале моей карьеры и за научное сотрудничество впоследствии. А также за созданную во многом благодаря ему дружескую атмосферу в лаборатории Физики магнитных явлений, без которой развитие научного потенциала невозможно.

Я также выражаю благодарность всем своим соавторам. Отдельно я хочу поблагодарить за особенно полезные обсуждения Олега Долгова, Илью Ерёмину, Игоря Мазина, Питера Хиршфелда и Андрея Чубукова, а также С.В. Борисенко, W. Brenig, В.В. Валькова, В.А. Гавричкова, А.А. Голубова, Д.М. Дзебисашвили, S.-L. Drechsler, Д. Евтушинского, Д.В. Ефремова, А.А. Кордуюка, Д.Л. Маслова, V. Mishra, D. Parker, Р. Прозорова, И.С. Сандалова, D. Singh, D.J. Scalapino, М. Танатара, Е.И. Шнейдер.

Литература

1. Korshunov M. M., Efremov D. V., Golubov A. A., Dolgov O. V. Unexpected impact of magnetic disorder on multiband superconductivity // [Phys. Rev. B](#). 2014. — Oct. Vol. 90. P. 134517.
2. Коршунов М. М. Сверхпроводящее состояние в соединениях железа и спин-флуктуационная теория спаривания // [Успехи физических наук](#). 2014. Т. 184, № 8. С. 882–888.
3. Dolgov O. V., Efremov D. V., Korshunov M. M. et al. Multiband Description of Optical Conductivity in Ferropnictide Superconductors // [Journal of Superconductivity and Novel Magnetism](#). 2013. Vol. 26, no. 8. Pp. 2637–2640.
4. Ovchinnikov S., Korshunov M., Nikolaev S. et al. Normal and Superconducting Properties of Cuprates in Multielectron Theory // [Journal of Superconductivity and Novel Magnetism](#). 2013. Vol. 26, no. 9. Pp. 2831–2835.
5. Ovchinnikov S. G., Korshunov M. M., Makarov I. A., Shneyder E. I. Quantum Phase Transitions and Superconductivity in Single- and Two-Layer Cuprates in the Multiband Theory of Hubbard Fermions // [Journal of Superconductivity and Novel Magnetism](#). 2013. Vol. 26, no. 8. Pp. 2607–2609.
6. Cao G., Korshunov M. M., Gao Y. et al. Anomalous In-Plane Electronic Scattering in Charge Ordered $\text{Na}_{0.41}\text{CoO}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2012. — Jun. Vol. 108. P. 236401.
7. Maiti S., Korshunov M. M., Chubukov A. V. Gap symmetry in KFe_2As_2 and the $\cos 4\theta$ gap component in LiFeAs // [Phys. Rev. B](#). 2012. — Jan. Vol. 85. P. 014511.
8. Шнейдер Е. И., Овчинников С. Г., Коршунов М. М., Николаев С. В. Электронная структура и свойства ВТСП-купратов в нормальной и сверхпро-

- водящей фазах в рамках LDA+GTV-подхода // [Письма в ЖЭТФ](#). 2012. Т. 96. С. 381–394.
9. Korshunov M. M., Ovchinnikov S. G., Shneyder E. I. et al. Cuprates, manganites and cobaltites: multielectron approach to the band structure // [Modern Physics Letters B](#). 2012. Vol. 26, no. 24. P. 1230016.
 10. Hirschfeld P. J., Korshunov M. M., Mazin I. I. Gap symmetry and structure of Fe-based superconductors // [Reports on Progress in Physics](#). 2011. Vol. 74, no. 12. P. 124508.
 11. Maiti S., Korshunov M. M., Maier T. A. et al. Evolution of symmetry and structure of the gap in iron-based superconductors with doping and interactions // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Dec. Vol. 84. P. 224505.
 12. Maiti S., Korshunov M. M., Maier T. A. et al. Evolution of the Superconducting State of Fe-Based Compounds with Doping // [Phys. Rev. Lett.](#) 2011. — Sep. Vol. 107. P. 147002.
 13. Efremov D. V., Korshunov M. M., Dolgov O. V. et al. Disorder-induced transition between $s_{\pm}$ and s_{++} states in two-band superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Nov. Vol. 84. P. 180512.
 14. Kemper A. F., Korshunov M. M., Devereaux T. P. et al. Anisotropic quasi-particle lifetimes in Fe-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — May. Vol. 83, no. 18. P. 184516.
 15. Shorikov A., Korshunov M. M., Anisimov V. I. Role of electronic correlations in the Fermi surface formation of Na_xCoO_2 // [Письма в ЖЭТФ](#). 2011. Т. 93. С. 83–87.
 16. Argyriou D. N., Hiess A., Akbari A. et al. Incommensurate itinerant antiferro-

- magnetic excitations and spin resonance in the $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$ superconductor // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jun. Vol. 81, no. 22. P. 220503.
17. Hammerath F., Drechsler S.-L., Grafe H.-J. et al. Unusual disorder effects in superconducting $\text{LaFeAs}_{1-\delta}\text{O}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ as revealed by As^{75} NMR spectroscopy // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Apr. Vol. 81, no. 14. P. 140504.
 18. Овчинников С. Г., Коршунов М. М., Козеева Л. П., Лавров А. Н. Особенности взаимосвязи электронных и магнитных свойств ВТСП-купратов, обусловленная ближним антиферромагнитным порядком // [ЖЭТФ](#). 2010. Т. 138, № 1. С. 115–125.
 19. Korshunov M. M., Zakharova E. V., Nekrasov I. A. et al. The Fermi surface and the role of electronic correlations in $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2010. Vol. 22, no. 1. P. 015701.
 20. Ovchinnikov S.G., Korshunov M. M., Shneyder E. I. Effect of Lifshitz quantum phase transitions on the normal and superconducting states in cuprates // [Ukr. J. Phys.](#) 2010. Vol. 55, no. 1. Pp. 55–64.
 21. Korshunov M. M., Eremin I., Efremov D. V. et al. Nonanalytic Spin Susceptibility of a Fermi Liquid: The Case of Fe-Based Pnictides // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jun. Vol. 102, no. 23. P. 236403.
 22. Иванова Н. Б., Овчинников С. Г., Коршунов М. М. и др. Особенности спинового, зарядового и орбитального упорядочений в кобальтитах // [Успехи физических наук](#). 2009. Т. 179, № 8. С. 837–860.
 23. Овчинников С. Г., Коршунов М. М., Шнейдер Е. И. Квантовые фазовые переходы Лифшица и перестройка Ферми-поверхности с изменением концентрации дырок в высокотемпературных сверхпроводниках // [ЖЭТФ](#). 2009. Т. 136, № 5. С. 898–909.

24. Korshunov M. M., Eremin I. Theory of magnetic excitations in iron-based layered superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Oct. Vol. 78, no. 14. P. 140509.
25. Korshunov M. M., Eremin I. Doping evolution of itinerant magnetic fluctuations in Fe-based pnictides // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2008. Vol. 83, no. 6. P. 67003.
26. Parker D., Dolgov O. V., Korshunov M. M. et al. Extended $s_{\pm}$ scenario for the nuclear spin-lattice relaxation rate in superconducting pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Oct. Vol. 78, no. 13. P. 134524.
27. Klauss H.-H., Luetkens H., Klingeler R. et al. Commensurate Spin Density Wave in LaFeAsO: A Local Probe Study // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Aug. Vol. 101, no. 7. P. 077005.
28. Korshunov M. M., Eremin I. Dynamical magnetic susceptibility in the lamellar cobaltate superconductor $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Feb. Vol. 77, no. 6. P. 064510.
29. Овчинников С. Г., Коршунов М. М., Захарова Е. В. Температурная зависимость спин-поляронных внутрицелевых состояний в недопированных антиферромагнитных купратах // [ФТТ](#). 2008. Т. 50, № 8. С. 1349–1354.
30. Korshunov M. M., Eremin I., Shorikov A. et al. Itinerant in-plane magnetic fluctuations and many-body correlations in Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. B](#). 2007. — Mar. Vol. 75, no. 9. P. 094511.
31. Korshunov M. M., Eremin I., Shorikov A., Anisimov V. I. Electronic theory for itinerant in-plane magnetic fluctuations in Na_xCoO_2 // [Письма в ЖЭТФ](#). 2007. Т. 84, № 12. С. 769–774.
32. Korshunov M. M., Ovchinnikov S. G. Doping-dependent evolution of low-energy excitations and quantum phase transitions within an effective model

- for high-Tc copper oxides // [The European Physical Journal B](#). 2007. Vol. 57, no. 3. Pp. 271–278.
33. Korshunov M. M., Gavrichkov V. A., Ovchinnikov S. G. et al. Dominance of many-body effects over the one-electron mechanism for band structure doping dependence in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: the LDA+GTB approach // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2007. Vol. 19, no. 48. P. 486203.
 34. Korshunov M. M., Gavrichkov V. A., Ovchinnikov S. G. et al. Hybrid LDA and generalized tight-binding method for electronic structure calculations of strongly correlated electron systems // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Oct. Vol. 72, no. 16. P. 165104.
 35. Ovchinnikov S. G., Gavrichkov V. A., Korshunov M. M. et al. Multielectron approach to the electronic structure and mechanisms of superconductivity in high-Tc cuprates // [Journal of Magnetism and Magnetic Materials](#). 2009. Vol. 321, no. 7. Pp. 917–919. Proceedings of the Forth Moscow International Symposium on Magnetism.
 36. Korshunov M. M., Ovchinnikov S. G. LDA+GTB (generalized tight-binding) method for the electronic structure calculations of strongly correlated electron systems: Application for the band structure calculations of p-type cuprates // [Physica C: Superconductivity](#). 2007. Vol. 460-462, Part 2, no. 0. Pp. 1018–1019. Proceedings of the 8th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors M2S-HTSC VI-II.
 37. Nakamae S., Behnia K., Mangkorntong N. et al. Electronic ground state of heavily overdoped nonsuperconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ // [Phys. Rev. B](#). 2003. — Sep. Vol. 68. P. 100502.
 38. Chang J., Blackburn E., Holmes A. T. et al. Direct observation of competition

- between superconductivity and charge density wave order in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ // [Nat. Phys.](#) 2012. Vol. 8, no. 12. Pp. 871–876.
39. Ghiringhelli G., Le Tacon M., Minola M. et al. Long-Range Incommensurate Charge Fluctuations in $(\text{Y,Nd})\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ // [Science](#). 2012. Vol. 337, no. 6096. Pp. 821–825.
 40. Blackburn E., Chang J., Hücker M. et al. X-Ray Diffraction Observations of a Charge-Density-Wave Order in Superconducting Ortho-II $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.54}$ Single Crystals in Zero Magnetic Field // [Phys. Rev. Lett.](#) 2013. — Mar. Vol. 110. P. 137004.
 41. Comin R., Frano A., Yee M. M. et al. Charge Order Driven by Fermi-Arc Instability in $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ // [Science](#). 2014. Vol. 343, no. 6169. Pp. 390–392.
 42. da Silva Neto E. H., Aynajian P., Frano A. et al. Ubiquitous Interplay Between Charge Ordering and High-Temperature Superconductivity in Cuprates // [Science](#). 2014. Vol. 343, no. 6169. Pp. 393–396.
 43. Shen K. M., Ronning F., Lu D. H. et al. Nodal Quasiparticles and Antinodal Charge Ordering in $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ // [Science](#). 2005. Vol. 307, no. 5711. Pp. 901–904.
 44. Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.-X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors // [Rev. Mod. Phys.](#) 2003. — Apr. Vol. 75. Pp. 473–541.
 45. Yoshida T., Zhou X. J., Sasagawa T. et al. Metallic Behavior of Lightly Doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ with a Fermi Surface Forming an Arc // [Phys. Rev. Lett.](#) 2003. — Jul. Vol. 91. P. 027001.
 46. Ando Y., Kurita Y., Komiya S. et al. Evolution of the Hall Coefficient and the

- Peculiar Electronic Structure of the Cuprate Superconductors // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — May. Vol. 92. P. 197001.
47. Ando Y., Komiya S., Segawa K. et al. Electronic Phase Diagram of High- T_c Cuprate Superconductors from a Mapping of the In-Plane Resistivity Curvature // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Dec. Vol. 93. P. 267001.
 48. Gedik N., Langner M., Orenstein J. et al. Abrupt Transition in Quasiparticle Dynamics at Optimal Doping in a Cuprate Superconductor System // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Sep. Vol. 95. P. 117005.
 49. Santander-Syro A. F., Lobo R. P. S. M., Bontemps N. et al. In-plane electrodynamics of the superconductivity in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$: Energy scales and spectral weight distribution // [Phys. Rev. B.](#) 2004. — Oct. Vol. 70. P. 134504.
 50. Carbone F., Kuzmenko A. B., Molegraaf H. J. A. et al. Doping dependence of the redistribution of optical spectral weight in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ // [Phys. Rev. B.](#) 2006. — Aug. Vol. 74. P. 064510.
 51. Harima N., Matsuno J., Fujimori A. et al. Chemical potential shift in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: Contrasting behavior between the electron- and hole-doped cuprates // [Phys. Rev. B.](#) 2001. — Nov. Vol. 64. P. 220507.
 52. Zhou X. J., Yoshida T., Lanzara A. et al. High-temperature superconductors: Universal nodal Fermi velocity // [Nature.](#) 2003. — May. Vol. 423, no. 6938. Pp. 398–398.
 53. Kordyuk A. A., Borisenko S. V., Koitzsch A. et al. Bare electron dispersion from experiment: Self-consistent self-energy analysis of photoemission data // [Phys. Rev. B.](#) 2005. — Jun. Vol. 71. P. 214513.
 54. Padilla W. J., Lee Y. S., Dumm M. et al. Constant effective mass across the

- phase diagram of high- T_c cuprates // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Aug. Vol. 72. P. 060511.
55. Brinkman W. F., Rice T. M. Application of Gutzwiller's Variational Method to the Metal-Insulator Transition // [Phys. Rev. B](#). 1970. — Nov. Vol. 2. Pp. 4302–4304.
 56. Gutzwiller M. C. Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals // [Phys. Rev. Lett.](#) 1963. — Mar. Vol. 10. Pp. 159–162.
 57. Gutzwiller M. C. Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals // [Phys. Rev.](#) 1964. — May. Vol. 134. Pp. A923–A941.
 58. Gutzwiller M. C. Correlation of Electrons in a Narrow s Band // [Phys. Rev.](#) 1965. — Mar. Vol. 137. Pp. A1726–A1735.
 59. Gebhard F. Gutzwiller correlated wave functions in finite dimensions d : A systematic expansion in $1/d$ // [Phys. Rev. B](#). 1990. — May. Vol. 41. Pp. 9452–9473.
 60. Gebhard F. Equivalence of variational and slave-boson mean-field treatments of the periodic Anderson model // [Phys. Rev. B](#). 1991. — Jul. Vol. 44. Pp. 992–1003.
 61. Kotliar G., Ruckenstein A. E. New Functional Integral Approach to Strongly Correlated Fermi Systems: The Gutzwiller Approximation as a Saddle Point // [Phys. Rev. Lett.](#) 1986. — Sep. Vol. 57. Pp. 1362–1365.
 62. Metzner W., Vollhardt D. Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions // [Phys. Rev. Lett.](#) 1989. — Jan. Vol. 62. Pp. 324–327.
 63. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // [Rev. Mod. Phys.](#) 1996. — Jan. Vol. 68. Pp. 13–125.

64. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // [Phys. Rev.](#) 1964. — Nov. Vol. 136, no. 3B. Pp. B864–B871.
65. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // [Phys. Rev.](#) 1965. — Nov. Vol. 140. Pp. 1133–1138.
66. Jones R. O., Gunnarsson O. The density functional formalism, its applications and prospects // [Rev. Mod. Phys.](#) 1989. — Jul. Vol. 61. Pp. 689–746.
67. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. IV. The Atomic Representation // [Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences.](#) 1965. Vol. 285, no. 1403. Pp. 542–560.
68. Anisimov V. I., Zaanen J., Andersen O. K. Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner I // [Phys. Rev. B.](#) 1991. — Jul. Vol. 44. Pp. 943–954.
69. Svane A., Gunnarsson O. Transition-metal oxides in the self-interaction-corrected density-functional formalism // [Phys. Rev. Lett.](#) 1990. — Aug. Vol. 65. Pp. 1148–1151.
70. Anisimov V. I., Poteryaev A. I., Korotin M. A. et al. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory // [Journal of Physics: Condensed Matter.](#) 1997. Vol. 9, no. 35. P. 7359.
71. Lichtenstein A. I., Katsnelson M. I. Ab initio // [Phys. Rev. B.](#) 1998. — Mar. Vol. 57. Pp. 6884–6895.
72. Held K., Nekrasov I. A., Blümer N. et al. Realistic Modeling of Strongly Correlated Electron Systems: an Introduction to the LDA+DMFT Approach // [International Journal of Modern Physics B.](#) 2001. Vol. 15, no. 19n20. Pp. 2611–2625.

73. Kotliar G., Savrasov S. Y., Haule K. et al. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory // [Rev. Mod. Phys.](#) 2006. — Aug. Vol. 78. Pp. 865–951.
74. Hettler M. H., Tahvildar-Zadeh A. N., Jarrell M. et al. Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems // [Phys. Rev. B.](#) 1998. — Sep. Vol. 58. Pp. R7475–R7479.
75. Kotliar G., Savrasov S. Y., Pálsson G., Biroli G. Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems // [Phys. Rev. Lett.](#) 2001. — Oct. Vol. 87. P. 186401.
76. Potthoff M. Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons // [The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems.](#) 2003. Vol. 32, no. 4. Pp. 429–436.
77. Maier T., Jarrell M., Pruschke T., Hettler M. H. Quantum cluster theories // [Rev. Mod. Phys.](#) 2005. — Oct. Vol. 77. Pp. 1027–1080.
78. Savrasov S. Y., Kotliar G. Spectral density functionals for electronic structure calculations // [Phys. Rev. B.](#) 2004. — Jun. Vol. 69. P. 245101.
79. Ovchinnikov S. G., Sandalov I. S. The band structure of strong-correlated electrons in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ // [Physica C.](#) 1989. Vol. 161. P. 607.
80. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Борисов А.А., Горячев Е.Г. Эволюция зонной структуры квазичастиц с допированием в оксидах меди в рамках обобщенного метода сильной связи // [ЖЭТФ.](#) 2000. Т. 118, № 2. С. 422–437.
81. Gaididei Yu. B., Loktev V. M. On a Theory of the Electronic Spectrum and Magnetic Properties of High- T_c Superconductors // [physica status solidi \(b\).](#) 1988. Vol. 147, no. 1. Pp. 307–319.

82. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Якимов Л.Е. Роль орбитального упорядочения в формировании электронной структуры недопированных манганитов LaMnO_3 в режиме сильных электронных корреляций // [ЖЭТФ](#). 2006. Т. 129, № 6. С. 1103–1117.
83. Овчинников С.Г., Орлов Ю.С., Некрасов И.А., Пчелкина З.В. Электронная структура, магнитные свойства и механизм перехода диэлектрик-металл в LaCoO_3 с учетом сильных электронных корреляций // [ЖЭТФ](#). 2011. Т. 139, № 1. С. 162–174.
84. Ovchinnikov S.G., Val'kov V.V. [Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons](#). London-Singapore: Imperial College Press, 2004. P. 241. ISBN: [9781860945977](#).
85. Andersen O. K., Pawłowska Z., Jepsen O. Illustration of the linear-muffin-tin-orbital tight-binding representation: Compact orbitals and charge density in Si // [Phys. Rev. B](#). 1986. — Oct. Vol. 34. Pp. 5253–5269.
86. Anisimov V. I., Kondakov D. E., Kozhevnikov A. V. et al. Full orbital calculation scheme for materials with strongly correlated electrons // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Mar. Vol. 71. P. 125119.
87. Andersen O. K., Saha-Dasgupta T. Muffin-tin orbitals of arbitrary order // [Phys. Rev. B](#). 2000. — Dec. Vol. 62. Pp. R16219–R16222.
88. Gunnarsson O., Andersen O. K., Jepsen O., Zaanen J. Density-functional calculation of the parameters in the Anderson model: Application to Mn in CdTe // [Phys. Rev. B](#). 1989. — Jan. Vol. 39. Pp. 1708–1722.
89. Anisimov V. I., Korotin M. A., Nekrasov I. A. et al. First principles electronic model for high-temperature superconductivity // [Phys. Rev. B](#). 2002. — Sep. Vol. 66. P. 100502.

90. Emery V. J. Theory of high- T_c superconductivity in oxides // [Phys. Rev. Lett.](#) 1987. — Jun. Vol. 58. Pp. 2794–2797.
91. Varma C.M., Schmitt-Rink S., Abrahams Elihu. Charge transfer excitations and superconductivity in “ionic” metals // [Solid State Communications](#). 1987. Vol. 62, no. 10. Pp. 681 – 685.
92. Raimondi R., Jefferson J. H., Feiner L. F. Effective single-band models for the high- T_c cuprates. II. Role of apical oxygen // [Phys. Rev. B](#). 1996. — Apr. Vol. 53. Pp. 8774–8788.
93. Zaanen J., Sawatzky G.A. Systematics in band gaps and optical spectra of 3D transition metal compounds // [Journal of Solid State Chemistry](#). 1990. Vol. 88, no. 1. Pp. 8 – 27.
94. Зайцев Р.О. Диаграммная техника и газовое приближение в модели Хаббарда // [ЖЭТФ](#). 1976. Т. 70, № 3. С. 1100–1111.
95. Zaanen J., Sawatzky G. A., Allen J. W. Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds // [Phys. Rev. Lett.](#) 1985. — Jul. Vol. 55. Pp. 418–421.
96. Westwanski B., Pawlikowski A. On a general statistical Wick theorem // [Physics Letters A](#). 1973. Vol. 43, no. 2. Pp. 201 – 202.
97. Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. Функции Грина в теории магнетизма. Киев: Наукова Думка, 1984. С. 336.
98. Зубарев Д. Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике // [Успехи физических наук](#). 1960. Т. 71, № 5. С. 71–116.
99. Ovchinnikov S. G. Density of hole-doped states in strongly correlated electron systems of copper oxides // [Phys. Rev. B](#). 1994. — Apr. Vol. 49. Pp. 9891–9897.

100. Ovchinnikov S. G., Gavrichkov V. A., Korshunov M. M., Shneyder E. I. LDA+GTB method for band structure calculations in the strongly correlated materials. In the “Theoretical Methods for strongly Correlated systems” // Springer Series in Solid-State Sciences / edited by A. Avella, F. Mancini. Hamburg: Springer Berlin Heidelberg, Volume 171, 2012. Pp. 143–171.
101. Ovchinnikov S.G., Makarov I.A., Shneyder E.I. et al. [Magnetic mechanisms of pairing in strongly correlated electron system of copper oxides](#) // Recent Advances in Superconductivity Research / edited by C. Taylor. New York: Nova Science Publishers Inc. New York, 2013. Pp. 93–144.
102. Terasaki I., Sasago Y., Uchinokura K. Large thermoelectric power in NaCo_2O_4 single crystals // [Phys. Rev. B](#). 1997. — Nov. Vol. 56. Pp. R12685–R12687.
103. Takada K., Sakurai H., Takayama-Muromachi E. et al. Superconductivity in two-dimensional CoO_2 layers // [Nature](#). 2003. — mar. Vol. 422, no. 6927. Pp. 53–55.
104. Schaak R. E., Klimczuk T., Foo M. L., Cava R. J. Superconductivity phase diagram of $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$ // [Nature](#). 2003. — jul. Vol. 424, no. 6948. Pp. 527–529.
105. Jorgensen J. D., Avdeev M., Hinks D. G. et al. Crystal structure of the sodium cobaltate deuterate superconductor $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot 4xD_2\text{O}$ ($x \approx \frac{1}{3}$) // [Phys. Rev. B](#). 2003. — Dec. Vol. 68. P. 214517.
106. Foo M. L., Wang Y., Watauchi S. et al. Charge Ordering, Commensurability, and Metallicity in the Phase Diagram of the Layered Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Jun. Vol. 92. P. 247001.
107. Jin R., Sales B. C., Khalifah P., Mandrus D. Observation of Bulk Superconductivity in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ and $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{D}_2\text{O}$ Powder and Single Crystals // [Phys. Rev. Lett.](#) 2003. — Nov. Vol. 91. P. 217001.

108. Motohashi T., Ueda R., Naujalis E. et al. Unconventional magnetic transition and transport behavior in $\text{Na}_{0.75}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2003. — Feb. Vol. 67. P. 064406.
109. Boothroyd A. T., Coldea R., Tennant D. A. et al. Ferromagnetic In-Plane Spin Fluctuations in Na_xCoO_2 Observed by Neutron Inelastic Scattering // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — May. Vol. 92. P. 197201.
110. Bayrakci S. P., Mirebeau I., Bourges P. et al. Magnetic Ordering and Spin Waves in $\text{Na}_{0.82}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Apr. Vol. 94. P. 157205.
111. Helme L. M., Boothroyd A. T., Coldea R. et al. Three-Dimensional Spin Fluctuations in $\text{Na}_{0.75}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Apr. Vol. 94. P. 157206.
112. Bayrakci S. P., Bernhard C., Chen D. P. et al. Bulk antiferromagnetism in $\text{Na}_{0.82}\text{CoO}_2$ single crystals // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Mar. Vol. 69. P. 100410.
113. Kawata T., Iguchi Y., Itoh T. et al. Na-site substitution effects on the thermoelectric properties of NaCo_2O_4 // [Phys. Rev. B](#). 1999. — Oct. Vol. 60. Pp. 10584–10587.
114. Banobre-Lopez M., Rivadulla F., Caudillo R. et al. Role of Doping and Dimensionality in the Superconductivity of Na_xCoO_2 // [Chemistry of Materials](#). 2005. Vol. 17, no. 8. Pp. 1965–1968.
115. Lee M., Viciu L., Li L. et al. Large enhancement of the thermopower in Na_xCoO_2 at high Na doping // [Nat. Mater.](#) 2006. — jul. Vol. 5, no. 7. Pp. 537–540.
116. Wang Y., Rogado N. S., Cava R. J., Ong N. P. Spin entropy as the likely source of enhanced thermopower in $\text{Na}_x\text{Co}_2\text{O}_4$ // [Nature](#). 2003. — may. Vol. 423, no. 6938. Pp. 425–428.

117. Singh D. J. Electronic structure of NaCo_2O_4 // [Phys. Rev. B](#). 2000. — May. Vol. 61. Pp. 13397–13402.
118. Singh D. J. Quantum critical behavior and possible triplet superconductivity in electron-doped CoO_2 sheets // [Phys. Rev. B](#). 2003. — Jul. Vol. 68. P. 020503.
119. Lee K.-W., Kuneš J., Pickett W. E. Charge disproportionation and spin ordering tendencies in Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Jul. Vol. 70. P. 045104.
120. Johannes M. D., Mazin I. I., Singh D. J., Papaconstantopoulos D. A. Nesting, Spin Fluctuations, and Odd-Gap Superconductivity in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Aug. Vol. 93. P. 097005.
121. Johannes M. D., Singh D. J. Comparison of the electronic structures of hydrated and unhydrated Na_xCoO_2 : The effect of H_2O // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Jul. Vol. 70. P. 014507.
122. Hasan M. Z., Chuang Y.-D., Qian D. et al. Fermi Surface and Quasiparticle Dynamics of $\text{Na}_{0.7}\text{CoO}_2$ Investigated by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Jun. Vol. 92. P. 246402.
123. Yang H.-B., Wang S.-C., Sekharan A. K. P. et al. ARPES on $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2$: Fermi Surface and Unusual Band Dispersion // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Jun. Vol. 92. P. 246403.
124. Yang H.-B., Pan Z.-H., Sekharan A. K. P. et al. Fermi Surface Evolution and Luttinger Theorem in Na_xCoO_2 : A Systematic Photoemission Study // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Sep. Vol. 95. P. 146401.
125. Qian D., Hsieh D., Wray L. et al. Low-Lying Quasiparticle States and Hidden Collective Charge Instabilities in Parent Cobaltate Superconductors // [Phys. Rev. Lett.](#) 2006. — Jun. Vol. 96. P. 216405.

126. Qian D., Wray L., Hsieh D. et al. Complete d -Band Dispersion Relation in Sodium Cobaltates // [Phys. Rev. Lett.](#) 2006. — Nov. Vol. 97. P. 186405.
127. Shimojima T., Ishizaka K., Tsuda S. et al. Angle-Resolved Photoemission Study of the Cobalt Oxide Superconductor $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$: Observation of the Fermi Surface // [Phys. Rev. Lett.](#) 2006. — Dec. Vol. 97. P. 267003.
128. Geck J., Borisenko S. V., Berger H. et al. Anomalous Quasiparticle Renormalization in $\text{Na}_{0.73}\text{CoO}_2$: Role of Interorbital Interactions and Magnetic Correlations // [Phys. Rev. Lett.](#) 2007. — Jul. Vol. 99. P. 046403.
129. Kuroki K., Tanaka Y., Arita R. Possible Spin-Triplet f -Wave Pairing Due to Disconnected Fermi Surfaces In $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Aug. Vol. 93. P. 077001.
130. Mochizuki M., Yanase Y., Ogata M. Ferromagnetic Fluctuation and Possible Triplet Superconductivity in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$: Fluctuation-Exchange Study of the Multiorbital Hubbard Model // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Apr. Vol. 94. P. 147005.
131. Zhang P., Luo W., Cohen M. L., Louie S. G. Fermi Surface of Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Nov. Vol. 93. P. 236402.
132. Zhou S., Gao M., Ding H. et al. Electron Correlation and Fermi Surface Topology of Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — May. Vol. 94. P. 206401.
133. Bunemann J., Gebhard F., Weber W. Gutzwiller-correlated wave functions for degenerate bands: exact results in infinite dimensions // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 1997. Vol. 9, no. 35. P. 7343.
134. Balicas L., Analytis J. G., Jo Y. J. et al. Shubnikov–de Haas Effect in the Metallic State of $\text{Na}_{0.3}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2006. — Sep. Vol. 97. P. 126401.

135. Balicas L., Abdel-Jawad M., Hussey N. E. et al. Shubnikov–de Haas Oscillations and the Magnetic-Field-Induced Suppression of the Charge Ordered State in $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Jun. Vol. 94. P. 236402.
136. Jin R., Sales B. C., Li S., Mandrus D. Dependence of the specific heat of $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ on sodium and water concentrations // [Phys. Rev. B.](#) 2005. — Aug. Vol. 72. P. 060512.
137. Yokoi M., Moyoshi T., Kobayashi Y. et al. Magnetic Correlation of Na_xCoO_2 and Successive Phase Transitions of $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ -NMR and Neutron Diffraction Studies- // [Journal of the Physical Society of Japan.](#) 2005. Vol. 74, no. 11. Pp. 3046–3056.
138. Oeschler N., Fisher R. A., Phillips N. E. et al. Specific heat of $\text{Na}_{0.3}\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$: Two energy gaps, nonmagnetic pair breaking, strong fluctuations in the superconducting state, and effects of sample age // [Phys. Rev. B.](#) 2008. — Aug. Vol. 78. P. 054528.
139. Laverock J., Dugdale S. B., Duffy J. A. et al. Elliptical hole pockets in the Fermi surfaces of unhydrated and hydrated sodium cobalt oxides // [Phys. Rev. B.](#) 2007. — Aug. Vol. 76. P. 052509.
140. Ishida H., Johannes M. D., Liebsch A. Effect of Dynamical Coulomb Correlations on the Fermi Surface of $\text{Na}_{0.3}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — May. Vol. 94. P. 196401.
141. Singh D. J., Kasinathan Deepa. Destruction of the Small Fermi Surfaces in Na_xCoO_2 by Disorder // [Phys. Rev. Lett.](#) 2006. — Jul. Vol. 97. P. 016404.
142. Huang Q., Foo M. L., Lynn J. W. et al. Low temperature phase transitions and crystal structure of $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ // [Journal of Physics: Condensed Matter.](#) 2004. Vol. 16, no. 32. P. 5803.

143. Zandbergen H. W., Foo M., Xu Q. et al. Sodium ion ordering in Na_xCoO_2 : Electron diffraction study // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Jul. Vol. 70. P. 024101.
144. Bobroff J., Lang G., Alloul H. et al. NMR Study of the Magnetic and Metal-Insulator Transitions in $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$: A Nesting Scenario // [Phys. Rev. Lett.](#) 2006. — Mar. Vol. 96. P. 107201.
145. Argyriou D. N., Prokhnenko O., Kiefer K., Milne C. J. Emergent charge ordering in near-half-doped $\text{Na}_{0.46}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2007. — Oct. Vol. 76. P. 134506.
146. Ning F. L., Golin S. M., Ahilan K. et al. ^{59}Co NMR Evidence for Charge Ordering below $T_{CO} \sim 51$ K in $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Feb. Vol. 100. P. 086405.
147. Yokoi M., Kobayashi Y., Moyoshi T., Sato M. NMR Studies of Successive Phase Transitions in $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ and $\text{K}_{0.5}\text{CoO}_2$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2008. Vol. 77, no. 7. P. 074704.
148. Alloul H., Mukhamedshin I. R., Collin G., Blanchard N. Na atomic order, Co charge disproportionation and magnetism in Na_xCoO_2 for large Na contents // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2008. Vol. 82, no. 1. P. 17002.
149. Fujimoto T., Zheng G.-q., Kitaoka Y. et al. Unconventional Superconductivity and Electron Correlations in the Cobalt Oxyhydrate $\text{Na}_{0.35}\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ from Nuclear Quadrupole Resonance // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Jan. Vol. 92. P. 047004.
150. Zheng G.-q., Matano K., Meng R. L. et al. Na content dependence of superconductivity and the spin correlations in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$ // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2006. Vol. 18, no. 5. P. L63.
151. Daghofer M., Horsch P., Khaliullin G. Magnetic Properties of Spin-Orbital

- Polarons in Lightly Doped Cobaltates // [Phys. Rev. Lett.](#) 2006. — Jun. Vol. 96. P. 216404.
152. Chaloupka J., Khaliullin G. Unusual Electron Correlations in Na_xCoO_2 Due to the Spin-State Quasidegeneracy of Cobalt Ions // [Progress of Theoretical Physics Supplement](#). 2008. Vol. 176. Pp. 50–76.
 153. Johannes M. D., Mazin I. I., Singh D. J. Three-dimensional magnetic interactions in Na_xCoO_2 : First-principles calculations and analysis of exchange mechanisms // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Jun. Vol. 71. P. 214410.
 154. Cao G., Feng C., Xu Y. et al. Superconductivity in a layered cobalt oxyhydrate $\text{Na}_{0.31}\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$ // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2003. Vol. 15, no. 33. P. L519.
 155. Lorenz B., Cmaidalka J., Meng R.L., Chu C.W. Thermodynamic properties in the normal and superconducting states of $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ powder measured by heat capacity experiments // [Physica C: Superconductivity](#). 2004. Vol. 402, no. 1–2. Pp. 106 – 113.
 156. Yang H. D., Lin J.-Y., Sun C. P. et al. Evidence of nodal superconductivity in $\text{Na}_{0.35}\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$: A specific-heat study // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Jan. Vol. 71. P. 020504.
 157. Kanigel A., Keren A., Patlagan L. et al. Muon Spin Relaxation Measurements of $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Jun. Vol. 92. P. 257007.
 158. Ishida K., Ihara Y., Maeno Y. et al. Unconventional Superconductivity and Nearly Ferromagnetic Spin Fluctuations in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2003. Vol. 72, no. 12. Pp. 3041–3044.
 159. Michioka C., Ohta H., Itoh Y., Yoshimura K. ^{59}Co Nuclear Quadrupole Resonance Studies of Superconducting and Nonsuperconducting Bilayer Water In-

- tercalated Sodium Cobalt Oxides $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2006. Vol. 75, no. 6. P. 063701.
160. Kato M., Michioka C., Waki T. et al. ^{59}Co NMR and NQR studies in the unconventional superconductor // [Physica B: Condensed Matter](#). 2005. Vol. 359–361, no. 0. Pp. 482 – 484. Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems.
 161. Ihara Y., Ishida K., Takeya H. et al. Anisotropic Behavior of Knight Shift in Superconducting State of $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2006. Vol. 75, no. 1. P. 013708.
 162. Tanaka Akihiro, Hu Xiao. Possible Spin Triplet Superconductivity in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2003. — Dec. Vol. 91. P. 257006.
 163. Motrunich O. I., Lee Patrick A. Study of the triangular lattice tV model near $x = \frac{1}{3}$ // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Jul. Vol. 70. P. 024514.
 164. Kuroki K., Tanaka Y., Arita R. Competition between singlet and triplet pairings in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Jan. Vol. 71. P. 024506.
 165. Zheng Guo-qing, Matano Kazuaki, Chen D. P., Lin C. T. Spin singlet pairing in the superconducting state of $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$: Evidence from a ^{59}Co Knight shift in a single crystal // [Phys. Rev. B](#). 2006. — May. Vol. 73. P. 180503.
 166. Kobayashi Y., Moyoshi T., Watanabe H. et al. Magnetic Properties of Superconducting Cobalt Oxides $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2006. Vol. 75, no. 7. P. 074717.
 167. Mazin I. I., Johannes M. D. A critical assessment of the superconducting pairing symmetry in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Nat. Phys.](#) 2005. — nov. Vol. 1, no. 2. Pp. 91–93.

168. Higemoto Wataru, Ohishi Kazuki, Koda Akihiro et al. Possible unconventional superconductivity in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ probed by muon spin rotation and relaxation // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Oct. Vol. 70. P. 134508.
169. Higemoto W., Ohishi K., Koda A. et al. Possible unconventional superconductivity and weak magnetism in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ probed by μSR // [Physica B: Condensed Matter](#). 2006. Vol. 374–375, no. 0. Pp. 274 – 277. Proceedings of the Tenth International Conference on Muon Spin Rotation, Relaxation and Resonance Proceedings of the Tenth International Conference on Muon Spin Rotation, Relaxation and Resonance.
170. Florens S., Vojta M. Impact of disorder on unconventional superconductors with competing ground states // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Mar. Vol. 71. P. 094516.
171. Максимов Е. Г., Долгов О. В. О возможных механизмах высокотемпературной сверхпроводимости // [Успехи физических наук](#). 2007. Т. 177, № 9. С. 983–988.
172. Шнейдер Е. И., Овчинников С. Г. Фононный и магнитный механизмы спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках в режиме сильных корреляций // [Письма в ЖЭТФ](#). 2006. Т. 83, № 9. С. 462–466.
173. Шнейдер Е.И., Овчинников С.Г. Изотопический эффект в модели сильно коррелированных электронов, учитывающей магнитный и фононный механизмы сверхпроводящего спаривания // [ЖЭТФ](#). 2009. Т. 136, № 6. С. 1177–1182.
174. Donkov A., Korshunov M. M., Eremin I. et al. Electron-phonon interaction in the lamellar cobaltate Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Mar. Vol. 77, no. 10. P. 100504.
175. Kamihara Y., Watanabe T., Hirano M., Hosono H. Iron-Based Layered Superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05\text{--}0.12$) with $T_c = 26$ K // [Journal of the](#)

- [American Chemical Society](#). 2008. Vol. 130, no. 11. Pp. 3296–3297. PMID: 18293989.
176. Fujioka M., Denholme S. J., Tanaka M. et al. The effect of exceptionally high fluorine doping on the anisotropy of single crystalline $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ // [Applied Physics Letters](#). 2014. Vol. 105, no. 10. Pp. –.
 177. Qing-Yan Wang, Zhi Li, Wen-Hao Zhang et al. Interface-Induced High-Temperature Superconductivity in Single Unit-Cell FeSe Films on SrTiO_3 // [Chinese Physics Letters](#). 2012. Vol. 29, no. 3. P. 037402.
 178. Liu D., Zhang W., Mou D. et al. Electronic origin of high-temperature superconductivity in single-layer FeSe superconductor // [Nat. Commun.](#) 2012. — Jul. Vol. 3. P. 931.
 179. Садовский М. В. Высокотемпературная сверхпроводимость в слоистых соединениях на основе железа // [Успехи физических наук](#). 2008. Т. 178, № 12. С. 1243–1271.
 180. Ивановский А. Л. Новые высокотемпературные сверхпроводники на основе оксиарсенидов редкоземельных и переходных металлов и родственных фаз: синтез, свойства и моделирование // [Успехи физических наук](#). 2008. Т. 178, № 12. С. 1273–1306.
 181. Изюмов Ю. А., Курмаев Э. З. Новый класс высокотемпературных сверхпроводников в FeAs-системах // [Успехи физических наук](#). 2008. Т. 178, № 12. С. 1307–1334.
 182. Ishida K., Nakai Y., Hosono H. To What Extent Iron-Pnictide New Superconductors Have Been Clarified: A Progress Report // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2009. Vol. 78, no. 6. P. 062001.
 183. Johnston D. C. The puzzle of high temperature superconductivity in layered

- iron pnictides and chalcogenides // [Advances in Physics](#). 2010. Vol. 59, no. 6. Pp. 803–1061.
184. Paglione J., Greene R. L. High-temperature superconductivity in iron-based materials // [Nat. Phys.](#) 2010. — Sep. Vol. 6, no. 9. Pp. 645–658.
 185. Mazin I. I. Superconductivity gets an iron boost // [Nature](#). 2010. — Mar. Vol. 464, no. 7286. Pp. 183–186.
 186. Lumsden M. D., Christianson A. D. Magnetism in Fe-based superconductors // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2010. Vol. 22, no. 20. P. 203203.
 187. Wen H.-H., Li S. Materials and Novel Superconductivity in Iron Pnictide Superconductors // [Annual Review of Condensed Matter Physics](#). 2011. Vol. 2, no. 1. Pp. 121–140.
 188. Basov D. N., Chubukov Andrey V. Manifesto for a higher T_c // [Nat. Phys.](#) 2011. — Apr. Vol. 7, no. 4. Pp. 272–276.
 189. Stewart G. R. Superconductivity in iron compounds // [Rev. Mod. Phys.](#) 2011. — Dec. Vol. 83. Pp. 1589–1652.
 190. Singh D. J., Du M.-H. Density Functional Study of $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$: A Low Carrier Density Superconductor Near Itinerant Magnetism // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Jun. Vol. 100. P. 237003.
 191. Mazin I. I., Singh D. J., Johannes M. D., Du M. H. Unconventional Superconductivity with a Sign Reversal in the Order Parameter of $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. Vol. 101, no. 5. P. 057003.
 192. Nekrasov I. A., Pchelkina Z. V., Sadovskii M. V. Electronic structure of prototype AFe_2As_2 and ReOFeAs high-temperature superconductors: a comparison // [Письма в ЖЭТФ](#). 2008. Т. 88. С. 155–160.

193. Chubukov A.V. Renormalization group analysis of competing orders and the pairing symmetry in Fe-based superconductors // [Physica C: Superconductivity](#). 2009. Vol. 469, no. 9–12. Pp. 640 – 650. Superconductivity in Iron-Pnictides.
194. Eremin I., Chubukov A. V. Magnetic degeneracy and hidden metallicity of the spin-density-wave state in ferropnictides // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jan. Vol. 81. P. 024511.
195. Knolle J., Eremin I., Chubukov A. V., Moessner R. Theory of itinerant magnetic excitations in the spin-density-wave phase of iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Apr. Vol. 81. P. 140506.
196. Lebègue S. Electronic structure and properties of the Fermi surface of the superconductor LaOFeP // [Phys. Rev. B](#). 2007. — Jan. Vol. 75, no. 3. P. 035110.
197. Raghu S., Qi X.-L., Liu C.-X. et al. Minimal two-band model of the superconducting iron oxypnictides // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jun. Vol. 77. P. 220503.
198. Kemper A. F., Maier T. A., Graser S. et al. Sensitivity of the superconducting state and magnetic susceptibility to key aspects of electronic structure in ferropnictides // [New Journal of Physics](#). 2010. — jul. Vol. 12, no. 7. P. 073030.
199. Kuroki K., Onari S., Arita R. et al. Unconventional Pairing Originating from the Disconnected Fermi Surfaces of Superconducting $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Aug. Vol. 101, no. 8. P. 087004.
200. Graser S., Maier T.A., Hirschfeld P.J., Scalapino D.J. Near-degeneracy of several pairing channels in multiorbital models for the Fe pnictides // [New Journal of Physics](#). 2009. Vol. 11, no. 2. P. 025016.
201. Cao C., Hirschfeld P. J., Cheng H.-P. Proximity of antiferromagnetism and superconductivity in $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$: Effective Hamiltonian from ab initio studies // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jun. Vol. 77, no. 22. P. 220506(R).

202. Kordyuk A. A. Iron-based superconductors: Magnetism, superconductivity, and electronic structure (Review Article) // [Low Temperature Physics](#). 2012. Vol. 38, no. 9. Pp. 888–899.
203. Brouet V., Jensen M. Fuglsang, Lin Ping-Hui et al. Impact of the two Fe unit cell on the electronic structure measured by ARPES in iron pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2012. — Aug. Vol. 86. P. 075123.
204. Kordyuk A.A., Zabolotnyy V.B., Evtushinsky D.V. et al. Electronic Band Structure of Ferro-Pnictide Superconductors from ARPES Experiment // [Journal of Superconductivity and Novel Magnetism](#). 2013. Vol. 26, no. 9. Pp. 2837–2841.
205. Sigrist M., Ueda K. Phenomenological theory of unconventional superconductivity // [Rev. Mod. Phys.](#) 1991. — Apr. Vol. 63. Pp. 239–311.
206. Ning F., Ahilan K., Imai T. et al. Spin Susceptibility, Phase Diagram, and Quantum Criticality in the Electron-Doped High T_c Superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2009. Vol. 78, no. 1. P. 013711.
207. Grafe H.-J., Paar D., Lang G. et al. ^{75}As NMR Studies of Superconducting $\text{LaFeAsO}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Jul. Vol. 101. P. 047003.
208. Matano K., Ren Z. A., Dong X. L. et al. Spin-singlet superconductivity with multiple gaps in $\text{PrFeAsO}_{0.89}\text{F}_{0.11}$ // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2008. Vol. 83, no. 5. P. 57001.
209. Matano K., Li Z., Sun G. L. et al. Anisotropic spin fluctuations and multiple superconducting gaps in hole-doped $\text{Ba}_{0.72}\text{K}_{0.28}\text{Fe}_2\text{As}_2$: NMR in a single crystal // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2009. Vol. 87, no. 2. P. 27012.
210. Yashima M., Nishimura H., Mukuda H. et al. Strong-Coupling Spin-Singlet

- Superconductivity with Multiple Full Gaps in Hole-Doped $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ Probed by ^{57}Fe -NMR // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2009. Vol. 78, no. 10. P. 103702.
211. Jeglič P., Potočnik A., Klanjšek M. et al. ^{75}As nuclear magnetic resonance study of antiferromagnetic fluctuations in the normal state of LiFeAs // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Apr. Vol. 81. P. 140511.
212. Li Z., Ooe Y., Wang X.-C. et al. ^{75}As NQR and NMR Studies of Superconductivity and Electron Correlations in Iron Arsenide LiFeAs // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2010. Vol. 79, no. 8. P. 083702.
213. Nakai Y., Iye T., Kitagawa S. et al. ^{31}P and ^{75}As NMR evidence for a residual density of states at zero energy in superconducting $\text{BaFe}_2(\text{As}_{0.67}\text{P}_{0.33})_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jan. Vol. 81. P. 020503.
214. Mackenzie A. P., Maeno Y. The superconductivity of Sr_2RuO_4 and the physics of spin-triplet pairing // [Rev. Mod. Phys.](#) 2003. — May. Vol. 75. Pp. 657–712.
215. Amato A., Khasanov R., Luetkens H., Klauss H.-H. Probing the ground state properties of iron-based superconducting pnictides and related systems by muon-spin spectroscopy // [Physica C: Superconductivity](#). 2009. Vol. 469, no. 9–12. Pp. 606 – 613. Superconductivity in Iron-Pnictides.
216. Zhang X., Oh Y. S., Liu Y. et al. Observation of the Josephson Effect in $\text{Pb}/\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ Single Crystal Junctions // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Apr. Vol. 102. P. 147002.
217. Гешкенбейн В.Б., Ларкин А.И. Эффект Джозефсона в сверхпроводниках с тяжелыми фермионами // [Письма в ЖЭТФ](#). 1986. Т. 43. С. 306–309.
218. Hicks C. W., Lippman T. M., Huber M. E. et al. Limits on the Superconduct-

- ing Order Parameter in $\text{NdFeAsO}_{1-x}\text{F}_y$ from Scanning SQUID Microscopy // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2009. Vol. 78, no. 1. P. 013708.
219. Boeri L., Dolgov O. V., Golubov A. A. Is $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ an Electron-Phonon Superconductor? // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Jul. Vol. 101, no. 2. P. 026403.
220. Kuchinskii E. Z., Nekrasov I. A., Sadovskii M. V. Anion height dependence of T_c and density of states in iron based superconductors // [Письма в ЖЭТФ](#). 2010. T. 91. C. 567–571.
221. Chubukov A. V., Efremov D. V., Eremin I. Magnetism, superconductivity, and pairing symmetry in iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Oct. Vol. 78. P. 134512.
222. Chubukov A. V., Eremin I., Korshunov M. M. Theory of Raman response of a superconductor with extended s -wave symmetry: Application to the iron pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Jun. Vol. 79, no. 22. P. 220501.
223. Yanagi Y., Yamakawa Y., Ōno Y. Magnetism and Superconductivity in the Two-Dimensional 16-Band d-p Model for Iron-Based Superconductors // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2008. Vol. 77, no. 12. P. 123701.
224. Ikeda H. Pseudogap and Superconductivity in Iron-Based Layered Superconductor Studied by Fluctuation–Exchange Approximation // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2008. Vol. 77, no. 12. P. 123707.
225. Yao Z.-J., Li J.-X., Wang Z. D. Spin fluctuations, interband coupling and unconventional pairing in iron-based superconductors // [New Journal of Physics](#). 2009. Vol. 11, no. 2. P. 025009.
226. Parish M. M., Hu J., Bernevig B. A. Experimental consequences of the s -wave $\cos(k_x)\cos(k_y)$ superconductivity in the iron pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Oct. Vol. 78. P. 144514.

227. Kontani H., Onari S. Orbital-Fluctuation-Mediated Superconductivity in Iron Pnictides: Analysis of the Five-Orbital Hubbard-Holstein Model // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Apr. Vol. 104. P. 157001.
228. Onari S., Kontani H. Non-Fermi-liquid transport phenomena and superconductivity driven by orbital fluctuations in iron pnictides: Analysis by fluctuation-exchange approximation // [Phys. Rev. B.](#) 2012. — Apr. Vol. 85. P. 134507.
229. Hashimoto K., Shibauchi T., Kato T. et al. Microwave Penetration Depth and Quasiparticle Conductivity of PrFeAsO_{1-y} Single Crystals: Evidence for a Full-Gap Superconductor // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jan. Vol. 102. P. 017002.
230. Martin C., Tillman M. E., Kim H. et al. Nonexponential London Penetration Depth of FeAs-Based Superconducting $R\text{FeAsO}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ ($R = \text{La}, \text{Nd}$) Single Crystals // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jun. Vol. 102. P. 247002.
231. Fletcher J. D., Serafin A., Malone L. et al. Evidence for a Nodal-Line Superconducting State in LaFePO // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Apr. Vol. 102, no. 14. P. 147001.
232. Hicks C. W., Lippman T. M., Huber M. E. et al. Evidence for a Nodal Energy Gap in the Iron-Pnictide Superconductor LaFePO from Penetration Depth Measurements by Scanning SQUID Susceptometry // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Sep. Vol. 103. P. 127003.
233. Yamashita M., Nakata N., Senshu Y. et al. Thermal conductivity measurements of the energy-gap anisotropy of superconducting LaFePO at low temperatures // [Phys. Rev. B.](#) 2009. — Dec. Vol. 80. P. 220509.
234. Malone L., Fletcher J. D., Serafin A. et al. Magnetic penetration depth of single-crystalline $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_y$ // [Phys. Rev. B.](#) 2009. — Apr. Vol. 79. P. 140501.

235. Luo X. G., Tanatar M. A., Reid J.-Ph. et al. Quasiparticle heat transport in single-crystalline $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$: Evidence for a k -dependent superconducting gap without nodes // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Oct. Vol. 80. P. 140503.
236. Bobowski J. S., Baglo J. C., Day James et al. Precision microwave electrodynamic measurements of K- and Co-doped BaFe_2As_2 // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Sep. Vol. 82. P. 094520.
237. Kim H., Tanatar M. A., Straszheim W. E. et al. Competition between superconductivity and magnetic/nematic order as a source of anisotropic superconducting gap in underdoped $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2014. — Jul. Vol. 90. P. 014517.
238. Martin C., Gordon R. T., Tanatar M. A. et al. Nonexponential London penetration depth of external magnetic fields in superconducting $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ single crystals // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Jul. Vol. 80. P. 020501.
239. Dong J. K., Zhou S. Y., Guan T. Y. et al. Quantum Criticality and Nodal Superconductivity in the FeAs-Based Superconductor KFe_2As_2 // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Feb. Vol. 104. P. 087005.
240. Reid J.-Ph., Tanatar M. A., Juneau-Fecteau A. et al. Universal Heat Conduction in the Iron Arsenide Superconductor KFe_2As_2 : Evidence of a d -Wave State // [Phys. Rev. Lett.](#) 2012. — Aug. Vol. 109. P. 087001.
241. Tanatar M. A., Reid J.-Ph., Shakeripour H. et al. Doping Dependence of Heat Transport in the Iron-Arsenide Superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$: From Isotropic to a Strongly k -Dependent Gap Structure // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Feb. Vol. 104. P. 067002.
242. Luan L., Lippman T. M., Hicks C. W. et al. Local Measurement of the Superfluid Density in the Pnictide Superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ across the Superconducting Dome // [Phys. Rev. Lett.](#) 2011. — Feb. Vol. 106. P. 067001.

243. Martin C., Kim H., Gordon R. T. et al. Evidence from anisotropic penetration depth for a three-dimensional nodal superconducting gap in single-crystalline $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Feb. Vol. 81. P. 060505.
244. Hashimoto K., Yamashita M., Kasahara S. et al. Line nodes in the energy gap of superconducting $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ single crystals as seen via penetration depth and thermal conductivity // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jun. Vol. 81. P. 220501.
245. Reid J.-Ph., Tanatar M. A., Luo X. G. et al. Nodes in the gap structure of the iron arsenide superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ from c -axis heat transport measurements // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Aug. Vol. 82. P. 064501.
246. Kim H., Tanatar M. A., Song Yoo Jang et al. Nodeless two-gap superconducting state in single crystals of the stoichiometric iron pnictide LiFeAs // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Mar. Vol. 83. P. 100502.
247. Tanatar M. A., Reid J.-Ph., René de Cotret S. et al. Isotropic three-dimensional gap in the iron arsenide superconductor LiFeAs from directional heat transport measurements // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Aug. Vol. 84. P. 054507.
248. Hashimoto K., Kasahara S., Katsumata R. et al. Nodal versus Nodeless Behaviors of the Order Parameters of LiFeP and LiFeAs Superconductors from Magnetic Penetration-Depth Measurements // [Phys. Rev. Lett.](#) 2012. — Jan. Vol. 108. P. 047003.
249. Zeng B., Mu G., Luo H.Q. et al. Anisotropic structure of the order parameter in $\text{FeSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ revealed by angle-resolved specific heat // [Nat. Commun.](#) 2010. — Nov. Vol. 1. P. 112.
250. Dong J. K., Guan T. Y., Zhou S. Y. et al. Multigap nodeless superconductivity in FeSe_x : Evidence from quasiparticle heat transport // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Jul. Vol. 80. P. 024518.

251. Kasahara S., Shibauchi T., Hashimoto K. et al. Evolution from non-Fermi- to Fermi-liquid transport via isovalent doping in $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2010. — May. Vol. 81. P. 184519.
252. Kuroki K., Usui H., Onari S. et al. Pnictogen height as a possible switch between high- T_c nodeless and low- T_c nodal pairings in the iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Jun. Vol. 79, no. 22. P. 224511.
253. Borisenko S. V., Zabolotnyy V. B., Evtushinsky D. V. et al. Superconductivity without Nesting in LiFeAs // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Aug. Vol. 105. P. 067002.
254. Putzke C., Coldea A. I., Guillaumón I. et al. de Haas-van Alphen Study of the Fermi Surfaces of Superconducting LiFeP and LiFeAs // [Phys. Rev. Lett.](#) 2012. — Jan. Vol. 108. P. 047002.
255. Nekrasov I. A., Pchelkina Z. V., Sadovskii M. V. Electronic Structure of New LiFeAs High- T_c Superconductor // [Письма в ЖЭТФ](#). 2008. Т. 88. С. 621–623.
256. Kim H., Tanatar M. A., Song Yoo Jang et al. Nodeless two-gap superconducting state in single crystals of the stoichiometric iron pnictide LiFeAs // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Mar. Vol. 83. P. 100502.
257. Hashimoto K., Serafin A., Tonegawa S. et al. Evidence for superconducting gap nodes in the zone-centered hole bands of KFe_2As_2 from magnetic penetration-depth measurements // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jul. Vol. 82. P. 014526.
258. Gavrichkov V., Borisov A., Ovchinnikov S. G. Angle-resolved photoemission data and quasiparticle spectra in antiferromagnetic insulators $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ and $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2001. — Nov. Vol. 64. P. 235124.
259. Wells B. O., Shen Z. X., Matsuura A. et al. E versus k Relations and Many

- Body Effects in the Model Insulating Copper Oxide $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 1995. — Feb. Vol. 74. Pp. 964–967.
260. Armitage N. P., Lu D. H., Kim C. et al. Anomalous Electronic Structure and Pseudogap Effects in $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2001. — Sep. Vol. 87. P. 147003.
261. Булаевский Л. Н., Нагаев Е. Л., Хомский Д. И. Новый тип автолокализированного состояния электронов проводимости в антиферромагнитном сверхпроводнике // [ЖЭТФ](#). 1968. Т. 54, № 5. С. 1562–1567.
262. Chao K.A., Spalek J., Oles A.M. Kinetic exchange interaction in a narrow S-band // [Journal of Physics C: Solid State Physics](#). 1977. Vol. 10, no. 10. P. L271.
263. Korshunov M.M., Ovchinnikov S.G., Sherman A.V. Spin-fluctuation and spin-exciton mechanisms of superconductivity in cuprates // [The Physics of Metals and Metallography](#). 2006. Vol. 101, no. 1. Pp. S6–S9.
264. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике // [ЖЭТФ](#). 1975. Т. 68, № 1. С. 207–215.
265. Izyumov Yu.A., Letfulov B.M. Spin fluctuations and superconducting states in the Hubbard model with a strong Coulomb repulsion // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 1991. Vol. 3, no. 28. P. 5373.
266. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands // [Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences](#). 1963. Vol. 276, no. 1365. Pp. 238–257.
267. Plakida N.M., Yushankhai V.Yu., Stasyuk I.V. On d-wave pairing in one band Hubbard model // [Physica C: Superconductivity](#). 1989. Vol. 162–164, Part 1, no. 0. Pp. 787 – 788.

268. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. Электронный спектр и температура сверхпроводящего перехода сильнокоррелированных фермионов с трехцентровыми взаимодействиями // [ЖЭТФ](#). 2005. Т. 127, № 3. С. 686–695.
269. Ovchinnikov S. G., Shneyder E. I. Electron spectral density of the half-filled Hubbard model in the atomic limit at finite temperature // [Central European Journal of Physics](#). 2003. Vol. 1, no. 3. Pp. 421–431.
270. Gröber C., Eder R., Hanke W. Anomalous low-doping phase of the Hubbard model // [Phys. Rev. B](#). 2000. — Aug. Vol. 62. Pp. 4336–4352.
271. Shimahara H., Takada S. Green's Function Theory of the Two-Dimensional-Heisenberg Model—Spin Wave in Short Range Order // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 1991. Vol. 60, no. 7. Pp. 2394–2405.
272. Barabanov A.F., Starykh O.A. Spherical Symmetric Spin Wave Theory of Heisenberg Model // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 1992. Vol. 61, no. 2. Pp. 704–708.
273. Sherman A., Schreiber M. Rotationally invariant approximation for the two-dimensional $t - J$ model // [Phys. Rev. B](#). 2002. — Mar. Vol. 65. P. 134520.
274. Владимиров А. А., Иле Д., Плакида Н. М. Динамическая спиновая восприимчивость в t - J -модели: метод функции памяти // [ТМФ](#). 2005. Т. 145. С. 240–255.
275. Вальков В.В., Валькова Т.А., Дзедзисашвили Д.М., Овчинников С.Г. Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в $t - J^*$ -модели // [Письма ЖЭТФ](#). 2002. Т. 75, № 8. С. 450–454.
276. Коршунов М.М., Овчинников С.Г., Шерман А.В. Эффективный гамильто-

- ниан и свойства нормальной и сверхпроводящей фаз купратов п-типа // [Письма в ЖЭТФ](#). 2004. Т. 80, № 1. С. 45–49.
277. von Szczepanski K. J., Horsch P., Stephan W., Ziegler M. Single-particle excitations in a quantum antiferromagnet // [Phys. Rev. B](#). 1990. — Feb. Vol. 41. Pp. 2017–2029.
278. Лифшиц И.М. Об аномалиях электронных характеристик металла в области больших давлений // [ЖЭТФ](#). 1960. Т. 38, № 5. С. 1569–1576.
279. Volovik G. E. [Quantum Phase Transitions from Topology in Momentum Space](#) // [Quantum Analogues: From Phase Transitions to Black Holes and Cosmology](#) / edited by W. G. Unruh, R. Schützhold. Springer Berlin Heidelberg, 2007. Vol. 718 of Lecture Notes in Physics. Pp. 31–73.
280. Helm T., Kartsovnik M. V., Bartkowiak M. et al. Evolution of the Fermi Surface of the Electron-Doped High-Temperature Superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ Revealed by Shubnikov–de Haas Oscillations // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Oct. Vol. 103. P. 157002.
281. Park S. R., Roh Y. S., Yoon Y. K. et al. Electronic structure of electron-doped $\text{Sm}_{1.86}\text{Ce}_{0.14}\text{CuO}_4$: Strong pseudogap effects, nodeless gap, and signatures of short-range order // [Phys. Rev. B](#). 2007. — Feb. Vol. 75. P. 060501.
282. Ovchinnikov S.G., Borisov A.A., Gavrichkov V.A., Korshunov M.M. Prediction of the in-gap states above the top of the valence band in undoped insulating cuprates due to the spin-polaron effect // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2004. Vol. 16, no. 8. P. L93.
283. Овчинников С.Г., Коршунов М.М., Захарова Е.В. Температурная зависимость спин-поляронных внутрищелевых состояний в недопированных антиферромагнитных купратах // [ФТТ](#). 2008. Т. 50, № 8. С. 1349–1354.

284. Aichhorn M., Arrigoni E., Potthoff M., Hanke W. Antiferromagnetic to superconducting phase transition in the hole- and electron-doped Hubbard model at zero temperature // [Phys. Rev. B](#). 2006. — Jul. Vol. 74. P. 024508.
285. Kokorina E.E., Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A. и др. Origin of “hot spots” in the pseudogap regime of $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$: an LDA+DMFT+ Σ_k study // [ЖЭТФ](#). 2008. Т. 134, № 5. С. 968–979.
286. Ovchinnikov S. G., Shneyder E. I., Korshunov M. M. From underdoped to overdoped cuprates: two quantum phase transitions // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2011. Vol. 23, no. 4. P. 045701.
287. Plakida N.M., Oudovenko V.S. Electronic spectrum in cuprates within p-d Hubbard model // [Physica C: Superconductivity](#). 2007. Vol. 460–462, Part 2, no. 0. Pp. 993 – 994. Proceedings of the 8th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors M2S-HTSC {VIII}.
288. Plakida N.M., Oudovenko V.S. Electron spectrum in high-temperature cuprate superconductors // [ЖЭТФ](#). 2007. Т. 131, № 2. С. 259–274.
289. Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V. “Destruction” of the Fermi surface due to pseudogap fluctuations in strongly correlated systems // [Письма в ЖЭТФ](#). 2005. Т. 82, № 4. С. 217–222.
290. Kuchinskii E. Z., Sadovskii M. V. Non-Fermi-liquid behavior in the fluctuating gap model: from the pole to a zero of the Green’s function // [ЖЭТФ](#). 2006. Т. 130, № 3. С. 477–490.
291. Kuchinskii E.Z., Sadovskii M.V. Reconstruction of the Fermi surface in the pseudogap state of cuprates // [Письма в ЖЭТФ](#). 2008. Т. 88, № 3. С. 224–228.

292. Вальков В.В., Головня А.А. Влияние спиновых флуктуаций на сверхпроводящую фазу фермионов Хаббарда $t - t' - t'' - J^*$ -модели // [ЖЭТФ](#). 2008. Т. 134, № 6. С. 1167–1180.
293. Tohyama T. Asymmetry of the electronic states in hole- and electron-doped cuprates: Exact diagonalization study of the $t - t' - t'' - J$ model // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Nov. Vol. 70. P. 174517.
294. Барабанов А.Ф., Хайн Р., Ковалев А.А. и др. Эволюция Ферми-поверхности купратов на основе спин-поляронного подхода // [ЖЭТФ](#). 2001. Т. 119, № 4. С. 777–798.
295. Hozoi L., Laad M. S., Fulde P. Fermiology of cuprates from first principles: From small pockets to the Luttinger Fermi surface // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Oct. Vol. 78. P. 165107.
296. Sakai S., Motome Y., Imada M. Evolution of Electronic Structure of Doped Mott Insulators: Reconstruction of Poles and Zeros of Green's Function // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Feb. Vol. 102. P. 056404.
297. Sakai S., Motome Y., Imada M. Doped high- T_c cuprate superconductors elucidated in the light of zeros and poles of the electronic Green's function // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Oct. Vol. 82. P. 134505.
298. Николаев С.В., Овчинников С.Г. Влияние дырочного допирования на электронную структуру и поверхность Ферми в модели Хаббарда в рамках кластерной теории возмущений с контролируемым спектральным весом // [ЖЭТФ](#). 2012. Т. 141, № 1. С. 135–150.
299. Marzari N., Vanderbilt D. Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands // [Phys. Rev. B](#). 1997. — Nov. Vol. 56. Pp. 12847–12865.

300. Kuroki K., Onari S., Tanaka Y. et al. Extended s -wave pairing originating from the a_{1g} band in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$: Single-band U-V model with fluctuation exchange method // [Phys. Rev. B](#). 2006. — May. Vol. 73. P. 184503.
301. Indergand M., Yamashita Y., Kusunose H., Sigrist M. Effective interaction between the interpenetrating Kagomé lattices in Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Jun. Vol. 71. P. 214414.
302. Perroni C. A., Ishida H., Liebsch A. Exact diagonalization dynamical mean-field theory for multiband materials: Effect of Coulomb correlations on the Fermi surface of $\text{Na}_{0.3}\text{CoO}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2007. — Jan. Vol. 75. P. 045125.
303. Marianetti C. A., Haule K., Parcollet O. Quasiparticle Dispersion and Heat Capacity of $\text{Na}_{0.3}\text{CoO}_2$: A Dynamical Mean-Field Theory Study // [Phys. Rev. Lett.](#) 2007. — Dec. Vol. 99. P. 246404.
304. Castellani C., Natoli C. R., Ranninger J. Magnetic structure of V_2O_3 in the insulating phase // [Phys. Rev. B](#). 1978. — Nov. Vol. 18. Pp. 4945–4966.
305. Gao M., Zhou S., Wang Z. Itinerant and localized magnetism on the triangular lattice: Sodium-rich phases of Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. B](#). 2007. — Nov. Vol. 76. P. 180402.
306. Liebsch A., Ishida H. Coulomb correlations do not fill the e'_g hole pockets in $\text{Na}_{0.3}\text{CoO}_2$ // [The European Physical Journal B](#). 2008. Vol. 61, no. 4. Pp. 405–411.
307. Landron S., Lepetit M.-B. Abinitio evaluation of the local effective interactions in the superconducting compound $\text{Na}_{0.35}\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$ // [Phys. Rev. B](#). 2006. — Nov. Vol. 74. P. 184507.
308. Pillay D., Johannes M. D., Mazin I. I., Andersen O. K. Origin of a_{1g} and e'_g orderings in Na_xCoO_2 // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jul. Vol. 78. P. 012501.

309. Vollhardt D., Woelfle P. [The Superfluid Phases Of Helium 3](#). London: Taylor & Francis, 1990. P. 640. ISBN: [9780850664126](#).
310. Fong H. F., Bourges P., Sidis Y. et al. Spin susceptibility in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ // [Phys. Rev. B](#). 2000. — Jun. Vol. 61. Pp. 14773–14786.
311. Eremin I., Morr D. K., Chubukov A. V. et al. Novel neutron resonance mode in $d_{x^2-y^2}$ -wave superconductors // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Apr. Vol. 94. P. 147001.
312. Li J.-X., Wang Z. D. Spin-resonance peak in $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ superconductors: A probe of the pairing symmetry // [Phys. Rev. B](#). 2004. — Dec. Vol. 70. P. 212512.
313. Ihara Y., Ishida K., Yoshimura K. et al. ^{17}O NMR Measurements on Superconducting $\text{Na}_{0.35}\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2005. Vol. 74, no. 8. Pp. 2177–2180.
314. Rossat-Mignod J., Regnault L.P., Vettier C. et al. Neutron scattering study of the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ system // [Physica C: Superconductivity](#). 1991. Vol. 185–189, Part 1, no. 0. Pp. 86 – 92.
315. Stock C., Broholm C., Hudis J. et al. Spin Resonance in the d -Wave Superconductor CeCoIn_5 // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Feb. Vol. 100. P. 087001.
316. Eschrig M., Norman M. R. Neutron Resonance: Modeling Photoemission and Tunneling Data in the Superconducting State of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2000. — Oct. Vol. 85. Pp. 3261–3264.
317. Abanov Ar., Chubukov A. V., Schmalian J. Quantum-critical theory of the spin-fermion model and its application to cuprates: Normal state analysis // [Advances in Physics](#). 2003. Vol. 52, no. 3. Pp. 119–218.

318. Maier T. A., Scalapino D. J. Theory of neutron scattering as a probe of the superconducting gap in the iron pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jul. Vol. 78, no. 2. P. 020514.
319. Inosov D. S., Park J. T., Bourges P. et al. Normal-state spin dynamics and temperature-dependent spin-resonance energy in optimally doped $\text{BaFe}_{1.85}\text{Co}_{0.15}\text{As}_2$ // [Nat. Phys.](#) 2010. — Mar. Vol. 6, no. 3. Pp. 178–181.
320. Christianson A. D., Goremychkin E. A., Osborn R. et al. Unconventional superconductivity in $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ from inelastic neutron scattering // [Nature](#). 2008. — Dec. Vol. 456, no. 7224. Pp. 930–932.
321. Lumsden M. D., Christianson A. D., Parshall D. et al. Two-dimensional resonant magnetic excitation in $\text{BaFe}_{1.84}\text{Co}_{0.16}\text{As}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Mar. Vol. 102, no. 10. P. 107005.
322. Christianson A. D., Lumsden M. D., Nagler S. E. et al. Static and Dynamic Magnetism in Underdoped Superconductor $\text{BaFe}_{1.92}\text{Co}_{0.08}\text{As}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Aug. Vol. 103. P. 087002.
323. Park J. T., Inosov D. S., Yaresko A. et al. Symmetry of spin excitation spectra in the tetragonal paramagnetic and superconducting phases of 122-ferropnictides // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Oct. Vol. 82. P. 134503.
324. Castellán J.-P., Rosenkranz S., Goremychkin E. A. et al. Effect of Fermi Surface Nesting on Resonant Spin Excitations in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2011. — Oct. Vol. 107. P. 177003.
325. Qiu Y., Bao W., Zhao Y. et al. Spin Gap and Resonance at the Nesting Wave Vector in Superconducting $\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Aug. Vol. 103. P. 067008.
326. Babkevich P., Bendele M., Boothroyd A.T. et al. Magnetic excitations of

- $\text{Fe}_{1+y}\text{Se}_x\text{Te}_{1-x}$ in magnetic and superconductive phases // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2010. Vol. 22, no. 14. P. 142202.
327. Ma F., Lu Z.-Y. Iron-based layered compound LaFeAsO is an antiferromagnetic semimetal // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jul. Vol. 78. P. 033111.
328. Mazin I. I., Yakovenko V. M. Neutron Scattering and Superconducting Order Parameter in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 1995. — Nov. Vol. 75. Pp. 4134–4137.
329. Anisimov V.I., Korotin Dm.M., Streltsov S.V. и др. Density-functional calculation of the Coulomb repulsion and correlation strength in superconducting LaFeAsO // [Письма в ЖЭТФ](#). 2008. Т. 88. С. 844–848.
330. Ding H., Nakayama K., Richard P. et al. Electronic structure of optimally doped pnictide $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$: a comprehensive angle-resolved photoemission spectroscopy investigation // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2011. Vol. 23, no. 13. P. 135701.
331. Nakayama K., Sato T., Richard P. et al. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of the Iron-Chalcogenide Superconductor $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$: Strong Coupling Behavior and the Universality of Interband Scattering // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Nov. Vol. 105. P. 197001.
332. Bao W., Qiu Y., Huang Q. et al. Tunable $(\delta\pi, \delta\pi)$ -Type Antiferromagnetic Order in $\alpha\text{-Fe}(\text{Te},\text{Se})$ Superconductors // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jun. Vol. 102. P. 247001.
333. Oleś A. M. Antiferromagnetism and correlation of electrons in transition metals // [Phys. Rev. B](#). 1983. — Jul. Vol. 28. Pp. 327–339.
334. Maier T. A., Graser S., Scalapino D. J., Hirschfeld P. J. Neutron scattering

- resonance and the iron-pnictide superconducting gap // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Apr. Vol. 79, no. 13. P. 134520.
335. Qiu Y., Kofu M., Bao Wei et al. Neutron-scattering study of the oxypnictide superconductor $\text{LaFeAsO}_{0.87}\text{F}_{0.13}$ // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Aug. Vol. 78. P. 052508.
336. Inosov D. S., Park J. T., Charnukha A. et al. Crossover from weak to strong pairing in unconventional superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Jun. Vol. 83. P. 214520.
337. Yu G., Li Y., Motoyama E. M., Greven M. A universal relationship between magnetic resonance and superconducting gap in unconventional superconductors // [Nat. Phys.](#) 2009. — Dec. Vol. 5, no. 12. Pp. 873–875.
338. Lipscombe O. J., Harriger L. W., Freeman P. G. et al. Anisotropic neutron spin resonance in superconducting $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Aug. Vol. 82. P. 064515.
339. Li Z., Sun D. L., Lin C. T. et al. Nodeless energy gaps of single-crystalline $\text{Ba}_{0.68}\text{K}_{0.32}\text{Fe}_2\text{As}_2$ as seen via ^{75}As NMR // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Apr. Vol. 83. P. 140506.
340. Korshunov M.M., Togushova Y.N., Eremin I., Hirschfeld P.J. Spin-Orbit Coupling in Fe-Based Superconductors // [Journal of Superconductivity and Novel Magnetism](#). 2013. Vol. 26, no. 9. Pp. 2873–2874.
341. Onari S., Kontani H., Sato M. Structure of neutron-scattering peaks in both s_{++} -wave and $s_{\pm}$ -wave states of an iron pnictide superconductor // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Feb. Vol. 81. P. 060504.
342. Onari S., Kontani H. Neutron inelastic scattering peak by dissipationless mech-

- anism in the s_{++} -wave state in iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Oct. Vol. 84. P. 144518.
343. Dong J., Zhang H. J., Xu G. et al. Competing orders and spin-density-wave instability in $\text{La}(\text{O}_{1-x}\text{F}_x)\text{FeAs}$ // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2008. Vol. 83, no. 2. P. 27006.
344. de la Cruz C., Huang Q., Lynn J. W. et al. Magnetic order close to superconductivity in the iron-based layered $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ systems // [Nature](#). 2008. — Jun. Vol. 453, no. 7197. Pp. 899–902.
345. Nomura T., Kim S.W., Kamihara Y. et al. Crystallographic phase transition and high- T_c superconductivity in LaFeAsOF // [Superconductor Science and Technology](#). 2008. Vol. 21, no. 12. P. 125028.
346. Yin Z. P., Lebègue S., Han M. J. et al. Electron-Hole Symmetry and Magnetic Coupling in Antiferromagnetic LaFeAsO // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Jul. Vol. 101. P. 047001.
347. Yildirim T. Origin of the 150-K Anomaly in LaFeAsO : Competing Antiferromagnetic Interactions, Frustration, and a Structural Phase Transition // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Aug. Vol. 101. P. 057010.
348. Ma F., Lu Z.-Y., Xiang T. Arsenic-bridged antiferromagnetic superexchange interactions in LaFeAsO // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Dec. Vol. 78. P. 224517.
349. Si Q., Abrahams E. Strong Correlations and Magnetic Frustration in the High T_c Iron Pnictides // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Aug. Vol. 101. P. 076401.
350. Fang C., Yao H., Tsai W.-F. et al. Theory of electron nematic order in LaFeAsO // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jun. Vol. 77. P. 224509.
351. Xu C., Müller M., Sachdev S. Ising and spin orders in the iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jul. Vol. 78. P. 020501.

352. Han Q., Chen Y., Wang Z. D. A generic two-band model for unconventional superconductivity and spin-density-wave order in electron- and hole-doped iron-based superconductors // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2008. Vol. 82, no. 3. P. 37007.
353. Nakai Y., Ishida K., Kamihara Y. et al. Evolution from Itinerant Antiferromagnet to Unconventional Superconductor with Fluorine Doping in $\text{LaFeAs}(\text{O}_{1-x}\text{F}_x)$ Revealed by ^{75}As and ^{139}La Nuclear Magnetic Resonance // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2008. Vol. 77, no. 7. P. 073701.
354. Ning F., Ahilan K., Imai T. et al. ^{59}Co and ^{75}As NMR Investigation of Electron-Doped High T_c Superconductor $\text{BaFe}_{1.8}\text{Co}_{0.2}\text{As}_2$ ($T_c = 22$ K) // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2008. Vol. 77, no. 10. P. 103705.
355. Ning F., Ahilan K., Imai T. et al. Spin Susceptibility, Phase Diagram, and Quantum Criticality in the Electron-Doped High T_c Superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2009. Vol. 78, no. 1. P. 013711.
356. Ning F. L., Ahilan K., Imai T. et al. Contrasting Spin Dynamics between Underdoped and Overdoped $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Jan. Vol. 104. P. 037001.
357. Klingeler R., Leps N., Hellmann I. et al. Local antiferromagnetic correlations in the iron pnictide superconductors $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ and $\text{Ca}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ as seen via normal-state susceptibility // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jan. Vol. 81. P. 024506.
358. Belitz D., Kirkpatrick T. R., Vojta Thomas. How generic scale invariance influences quantum and classical phase transitions // [Rev. Mod. Phys.](#) 2005. — Jul. Vol. 77. Pp. 579–632.

359. v. Löhneysen H., Rosch A., Vojta M., Wölfle P. Fermi-liquid instabilities at magnetic quantum phase transitions // [Rev. Mod. Phys.](#) 2007. — Aug. Vol. 79. Pp. 1015–1075.
360. Chubukov A. V., Maslov D. L. Nonanalytic corrections to the Fermi-liquid behavior // [Phys. Rev. B.](#) 2003. — Oct. Vol. 68. P. 155113.
361. Chubukov A. V., Maslov D. L. Singular corrections to the Fermi-liquid theory // [Phys. Rev. B.](#) 2004. — Mar. Vol. 69. P. 121102.
362. Betouras J., Efremov D., Chubukov A. Thermodynamics of a Fermi liquid in a magnetic field // [Phys. Rev. B.](#) 2005. — Sep. Vol. 72. P. 115112.
363. Maslov D. L., Chubukov A. V., Saha R. Nonanalytic magnetic response of Fermi and non-Fermi liquids // [Phys. Rev. B.](#) 2006. — Dec. Vol. 74. P. 220402.
364. Maslov D. L., Chubukov A. V. Nonanalytic paramagnetic response of itinerant fermions away and near a ferromagnetic quantum phase transition // [Phys. Rev. B.](#) 2009. — Feb. Vol. 79. P. 075112.
365. Chubukov A. V., Maslov D. L., Gangadharaiah S., Glazman L. I. Thermodynamics of a Fermi Liquid beyond the Low-Energy Limit // [Phys. Rev. Lett.](#) 2005. — Jul. Vol. 95. P. 026402.
366. Casey A., Patel H., Nyéki J. et al. Evidence for a Mott-Hubbard Transition in a Two-Dimensional ^3He Fluid Monolayer // [Phys. Rev. Lett.](#) 2003. — Mar. Vol. 90. P. 115301.
367. Aleiner I. L., Efetov K. B. Supersymmetric low-energy theory and renormalization group for a clean Fermi gas with a repulsion in arbitrary dimensions // [Phys. Rev. B.](#) 2006. — Aug. Vol. 74. P. 075102.
368. Schwiete G., Efetov K. B. Temperature dependence of the spin susceptibility

- of a clean Fermi gas with repulsion // [Phys. Rev. B](#). 2006. — Oct. Vol. 74. P. 165108.
369. Shekhter A., Finkel'stein A. M. Branch-cut singularities in thermodynamics of Fermi liquid systems // [Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America](#). 2006. — Jun. Vol. 103, no. 43. Pp. 15765–15769.
370. Prus O., Yaish Y., Reznikov M. et al. Thermodynamic spin magnetization of strongly correlated two-dimensional electrons in a silicon inversion layer // [Phys. Rev. B](#). 2003. — May. Vol. 67. P. 205407.
371. Zhu J., Stormer H. L., Pfeiffer L. N. et al. Spin Susceptibility of an Ultra-Low-Density Two-Dimensional Electron System // [Phys. Rev. Lett.](#) 2003. — Feb. Vol. 90. P. 056805.
372. Gokmen T., Padmanabhan M., Tutuc E. et al. Spin susceptibility of interacting two-dimensional electrons with anisotropic effective mass // [Phys. Rev. B](#). 2007. — Dec. Vol. 76. P. 233301.
373. Wu G., Chen H., Wu T. et al. Different resistivity response to spin-density wave and superconductivity at 20 K in $\text{Ca}_{1-x}\text{Na}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2008. Vol. 20, no. 42. P. 422201.
374. Yan J.-Q., Kreyssig A., Nandi S. et al. Structural transition and anisotropic properties of single-crystalline SrFe_2As_2 // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Jul. Vol. 78. P. 024516.
375. Klingeler R., Leps N., Hellmann I. et al. Local antiferromagnetic correlations in the iron pnictide superconductors $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ and $\text{Ca}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ as seen via normal-state susceptibility // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jan. Vol. 81. P. 024506.
376. Wang X. F., Wu T., Wu G. et al. The peculiar physical properties and phase

- diagram of $\text{BaFe}_{2-x}\text{Co}_x\text{As}_2$ single crystals // [New Journal of Physics](#). 2009. Vol. 11, no. 4. P. 045003.
377. Zhang G. M., Su Y. H., Lu Z. Y. et al. Universal linear-temperature dependence of static magnetic susceptibility in iron pnictides // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2009. Vol. 86, no. 3. P. 37006.
378. Cvetkovic V., Tesanovic Z. Multiband magnetism and superconductivity in Fe-based compounds // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2009. Vol. 85, no. 3. P. 37002.
379. Wang Fa, Zhai Hui, Ran Ying et al. Functional Renormalization-Group Study of the Pairing Symmetry and Pairing Mechanism of the FeAs-Based High-Temperature Superconductor // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jan. Vol. 102. P. 047005.
380. Chubukov A., Eremin I. Strong-coupling theory of the universal linear temperature dependence of the nodal Fermi velocity in layered cuprates // [Phys. Rev. B](#). 2008. — Aug. Vol. 78. P. 060509.
381. Hashimoto K., Cho K., Shibauchi T. et al. A Sharp Peak of the Zero-Temperature Penetration Depth at Optimal Composition in $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ // [Science](#). 2012. Vol. 336, no. 6088. Pp. 1554–1557.
382. Rullier-Albenque F., Colson D., Forget A., Alloul H. Hall Effect and Resistivity Study of the Magnetic Transition, Carrier Content, and Fermi-Liquid Behavior in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jul. Vol. 103, no. 5. P. 057001.
383. Fang L., Luo H., Cheng P. et al. Roles of multiband effects and electron-hole asymmetry in the superconductivity and normal-state properties of $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Oct. Vol. 80, no. 14. P. 140508.
384. Kasahara S., Shibauchi T., Hashimoto K. et al. Evolution from non-Fermi- to

- Fermi-liquid transport via isovalent doping in $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2010. — May. Vol. 81, no. 18. P. 184519.
385. Liu R. H., Wu G., Wu T. et al. Anomalous Transport Properties and Phase Diagram of the FeAs-Based $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ Superconductors // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Aug. Vol. 101, no. 8. P. 087001.
386. Riggs S. C., McDonald R. D., Kemper J. B. et al. Doping dependent nonlinear Hall effect in $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2009. Vol. 21, no. 41. P. 412201.
387. Hess C., Kondrat A., Narduzzo A. et al. The intrinsic electronic phase diagram of iron-oxypnictide superconductors // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2009. Vol. 87, no. 1. P. 17005.
388. Muschler B., Prestel W., Hackl R. et al. Band- and momentum-dependent electron dynamics in superconducting $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ as seen via electronic Raman scattering // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Nov. Vol. 80. P. 180510.
389. Maksimov E. G., Karakozov A. E., Gorshunov B. P. et al. Two-band Bardeen-Cooper-Schrieffer superconducting state of the iron pnictide compound $\text{Ba}(\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Apr. Vol. 83. P. 140502.
390. Golubov A. A., Dolgov O. V., Boris A. V. и др. Normal state resistivity of $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$: evidence for multiband strong-coupling behavior // [Письма в ЖЭТФ](#). 2011. Т. 94. С. 357–361.
391. Analytis J., Chu J.-H., McDonald R. et al. Enhanced Fermi-Surface Nesting in Superconducting $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ Revealed by the de Haas-van Alphen Effect // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Nov. Vol. 105. P. 207004.
392. Coldea A. I., Fletcher J. D., Carrington A. et al. Fermi Surface of Supercon-

- ducting LaFePO Determined from Quantum Oscillations // [Phys. Rev. Lett.](#) 2008. — Nov. Vol. 101, no. 21. P. 216402.
393. Analytis J. G., Andrew C. M. J., Coldea A. I. et al. Fermi Surface of SrFe_2P_2 Determined by the de Haas-van Alphen Effect // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Aug. Vol. 103, no. 7. P. 076401.
394. Maier T. A., Graser S., Scalapino D. J., Hirschfeld P. J. Origin of gap anisotropy in spin fluctuation models of the iron pnictides // [Phys. Rev. B.](#) 2009. — Jun. Vol. 79, no. 22. P. 224510.
395. Graser S., Kemper A. F., Maier T. A. et al. Spin fluctuations and superconductivity in a three-dimensional tight-binding model for BaFe_2As_2 // [Phys. Rev. B.](#) 2010. — Jun. Vol. 81, no. 21. P. 214503.
396. Ortenzi L., Cappelluti E., Benfatto L., Pietronero L. Fermi-Surface Shrinking and Interband Coupling in Iron-Based Pnictides // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jul. Vol. 103, no. 4. P. 046404.
397. Ikeda H., Arita R., Kuneš J. Phase diagram and gap anisotropy in iron-pnictide superconductors // [Phys. Rev. B.](#) 2010. — Feb. Vol. 81, no. 5. P. 054502.
398. Maier T. A., Macridin A., Jarrell M., Scalapino D. J. Systematic analysis of a spin-susceptibility representation of the pairing interaction in the two-dimensional Hubbard model // [Phys. Rev. B.](#) 2007. — Oct. Vol. 76. P. 144516.
399. Schulz Werner W., Allen Philip B., Trivedi Nandini. Hall coefficient of cubic metals // [Phys. Rev. B.](#) 1992. — May. Vol. 45, no. 19. Pp. 10886–10890.
400. Kim Seong-Gon, Mazin I. I., Singh D. J. First-principles study of Zn-Sb thermoelectrics // [Phys. Rev. B.](#) 1998. — Mar. Vol. 57, no. 11. Pp. 6199–6203.
401. Golubov A. A., Mazin I. I. Effect of magnetic and nonmagnetic impurities on

- highly anisotropic superconductivity // [Phys. Rev. B](#). 1997. — Jun. Vol. 55. Pp. 15146–15152.
402. Senga Y., Kontani H. Impurity Effects in Sign-Reversing Fully Gapped Superconductors: Analysis of FeAs Superconductors // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2008. Vol. 77, no. 11. P. 113710.
403. Yuko S., Hiroshi K. Impurity-induced in-gap state and T_c in sign-reversing s -wave superconductors: analysis of iron oxypnictide superconductors // [New Journal of Physics](#). 2009. Vol. 11, no. 3. P. 035005.
404. Onari S., Kontani H. Violation of Anderson's Theorem for the Sign-Reversing s -Wave State of Iron-Pnictide Superconductors // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Oct. Vol. 103. P. 177001.
405. Prelovšek P., Sega I. Phenomenological theory of the anomalous normal-state transport properties of iron pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Mar. Vol. 81, no. 11. P. 115121.
406. Rullier-Albenque F., Colson D., Forget A. et al. Hole and electron contributions to the transport properties of $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ru}_x)_2\text{As}_2$ single crystals // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jun. Vol. 81, no. 22. P. 224503.
407. Kawabata A., Lee S. C., Moyoshi T. et al. Superconductivity of $\text{LaFe}_{1-y}\text{Co}_y\text{AsO}_{1-x}\text{F}_x$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2008. Vol. 77, no. 10. P. 103704.
408. Sato M., Kobayashi Y., Lee S.C. et al. Studies on Effects of Impurity Doping and NMR Measurements of La 1111 and/or Nd 1111 Fe-Pnictide Superconductors // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2010. Vol. 79, no. 1. P. 014710.
409. Lee S. C., Satomi E., Kobayashi Y., Sato M. Effects of Ru Doping on

- the Transport Behavior and Superconducting Transition Temperature of $\text{NdFeAsO}_{0.89}\text{F}_{0.11}$ // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2010. Vol. 79, no. 2. P. 023702.
410. Tarantini C., Putti M., Gurevich A. et al. Suppression of the Critical Temperature of Superconducting $\text{NdFeAs}(\text{OF})$ Single Crystals by Kondo-Like Defect Sites Induced by α -Particle Irradiation // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Feb. Vol. 104. P. 087002.
411. Абрикосов А. А., Горьков Л. П. К теории сверхпроводящих сплавов с парамагнитными примесями // [ЖЭТФ](#). 1960. Т. 39, № 6. С. 1781–1796.
412. Preosti G., Muzikar P. Superconducting order parameters with sign changes: The density of states and impurity scattering // [Phys. Rev. B](#). 1996. — Aug. Vol. 54. Pp. 3489–3494.
413. Kulić M. L., Dolgov O. V. Anisotropic impurities in anisotropic superconductors // [Phys. Rev. B](#). 1999. — Nov. Vol. 60. Pp. 13062–13069.
414. Ohashi Y. Effects of interband impurity scattering on superconducting density of states in a two-band superconductor // [Physica C: Superconductivity](#). 2004. Vol. 412–414, Part 1, no. 0. Pp. 41 – 45. Proceedings of the 16th International Symposium on Superconductivity (ISS 2003). Advances in Superconductivity XVI. Part I.
415. Bang Y., Choi H.-Y., Won H. Impurity effects on the $\pm s$ -wave state of the iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Feb. Vol. 79. P. 054529.
416. Golubov A.A., Mazin I.I. Sign reversal of the order parameter in s wave superconductors // [Physica C: Superconductivity](#). 1995. Vol. 243, no. 1–2. Pp. 153 – 159.
417. Cheng P., Shen B., Hu J., Wen H.-H. Contrasting impurity scattering and

- pair-breaking effects by doping Mn and Zn in $\text{Ba}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{Fe}_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2010. — May. Vol. 81. P. 174529.
418. Li Yuke, Tong Jun, Tao Qian et al. Effect of a Zn impurity on T_c and its implications for pairing symmetry in $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ // [New Journal of Physics](#). 2010. Vol. 12, no. 8. P. 083008.
419. Nakajima Y., Taen T., Tsuchiya Y. et al. Suppression of the critical temperature of superconducting $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ by point defects from proton irradiation // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Dec. Vol. 82. P. 220504.
420. Tropeano M., Cimberle M. R., Ferdeghini C. et al. Isoelectronic Ru substitution at the iron site in $\text{SmFe}_{1-x}\text{Ru}_x\text{AsO}_{0.85}\text{F}_{0.15}$ and its effects on structural, superconducting, and normal-state properties // [Phys. Rev. B](#). 2010. — May. Vol. 81. P. 184504.
421. Kemper A. F., Cao C., Hirschfeld P. J., Cheng H.-P. Effects of cobalt doping and three-dimensionality in BaFe_2As_2 // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Sep. Vol. 80. P. 104511.
422. Nakamura K., Arita R., Ikeda H. First-principles calculation of transition-metal impurities in LaFeAsO // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Apr. Vol. 83. P. 144512.
423. Allen P. B., Mitrovic B. Theory of superconducting T_c // *Solid State Physics: Advances in Research and Applications* / edited by H. Erenreich, F. Zeitz, D. Turnbull. New York: Academic, 1982. Vol. 37. Pp. 1–92.
424. Berk N. F., Schrieffer J. R. Effect of Ferromagnetic Spin Correlations on Superconductivity // [Phys. Rev. Lett.](#) 1966. — Aug. Vol. 17. Pp. 433–435.
425. Popovich P., Boris A. V., Dolgov O. V. et al. Specific Heat Measurements of $\text{Ba}_{0.68}\text{K}_{0.32}\text{Fe}_2\text{As}_2$ Single Crystals: Evidence for a Multiband Strong-Coupling Superconducting State // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Jul. Vol. 105. P. 027003.

426. Charnukha A., Dolgov O. V., Golubov A. A. et al. Eliashberg approach to infrared anomalies induced by the superconducting state of $\text{Ba}_{0.68}\text{K}_{0.32}\text{Fe}_2\text{As}_2$ single crystals // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Nov. Vol. 84. P. 174511.
427. Mishra V., Boyd G., Graser S. et al. Lifting of nodes by disorder in extended- s -state superconductors: Application to ferropnictides // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Mar. Vol. 79, no. 9. P. 094512.
428. Schopohl N., Scharnberg K. Tunneling density of states for the two-band model of superconductivity // [Solid State Communications](#). 1977. Vol. 22, no. 6. Pp. 371 – 374.
429. Hirschfeld P. J., Wölfle P., Einzel D. Consequences of resonant impurity scattering in anisotropic superconductors: Thermal and spin relaxation properties // [Phys. Rev. B](#). 1988. — Jan. Vol. 37. Pp. 83–97.
430. Nakai Y., Iye T., Kitagawa S. et al. Unconventional Superconductivity and Antiferromagnetic Quantum Critical Behavior in the Isovalent-Doped $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ // [Phys. Rev. Lett](#). 2010. — Sep. Vol. 105. P. 107003.
431. Kim H., Tanatar M. A., Liu Yong et al. Evolution of London penetration depth with scattering in single crystals of $\text{K}_{1-x}\text{Na}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2014. — May. Vol. 89. P. 174519.
432. Tan D., Zhang C., Xi C. et al. Different response of superconductivity to the transition-metal impurities in $\text{K}_{0.8}\text{Fe}_{2-y-x}\text{M}_x\text{Se}_2$ ($M = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Co}, \text{Zn}$) // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Jul. Vol. 84. P. 014502.
433. Grinenko V., Kikoin K., Drechsler S.-L. et al. As vacancies, local moments, and Pauli limiting in $\text{LaFeAs}_{1-\delta}\text{O}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Oct. Vol. 84. P. 134516.
434. Li J., Guo Y. F., Zhang S. B. et al. Superconductivity suppression of

- Ba_{0.5}K_{0.5}Fe_{2-2x}M_{2x}As₂ single crystals by substitution of transition metal ($M =$ Mn, Ru, Co, Ni, Cu, and Zn) // [Phys. Rev. B](#). 2012. — Jun. Vol. 85. P. 214509.
435. Umrinario G.A. Effects of Magnetic Impurities on Two-Band Superconductor // [Journal of Superconductivity and Novel Magnetism](#). 2007. Vol. 20, no. 7-8. Pp. 639–642.
436. Yao Z.-J., Chen W.-Q., Li Y.-k. et al. Zn-impurity effect and interplay of $s_{\pm}$ and s_{++} pairings in iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2012. — Nov. Vol. 86. P. 184515.
437. Chen H., Tai Y.-Y., Ting C. S. et al. Disorder effects in multiorbital $s_{\pm}$ -wave superconductors: Implications for Zn-doped BaFe₂As₂ compounds // [Phys. Rev. B](#). 2013. — Nov. Vol. 88. P. 184509.
438. Ambegaokar V., Griffin A. Theory of the Thermal Conductivity of Superconducting Alloys with Paramagnetic Impurities // [Phys. Rev.](#) 1965. — Feb. Vol. 137. Pp. A1151–A1167.
439. Li J., Wang Y. Magnetic impurities in the two-band $s_{\pm}$ -wave superconductors // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2009. Vol. 88, no. 1. P. 17009.
440. Stanev V. G., Koshelev A. E. Anomalous proximity effects at the interface of s - and $s_{\pm}$ - superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2012. — Nov. Vol. 86. P. 174515.
441. Weber C., Haule K., Kotliar G. Strength of correlations in electron- and hole-doped cuprates // [Nat. Phys.](#) 2010. — Aug. Vol. 6, no. 8. Pp. 574–578.
442. Abrahams E., Si Q. Quantum criticality in the iron pnictides and chalcogenides // [Journal of Physics: Condensed Matter](#). 2011. Vol. 23, no. 22. P. 223201.
443. Maier T. A., Graser S., Hirschfeld P. J., Scalapino D. J. d -wave pairing from

- spin fluctuations in the $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Mar. Vol. 83. P. 100515.
444. Suzuki K., Usui H., Kuroki K. Spin fluctuations and unconventional pairing in KFe_2As_2 // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Oct. Vol. 84. P. 144514.
445. Thomale R., Platt C., Hu J. et al. Functional renormalization-group study of the doping dependence of pairing symmetry in the iron pnictide superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Nov. Vol. 80, no. 18. P. 180505.
446. Thomale R., Platt C., Hanke W., Bernevig B. A. Mechanism for Explaining Differences in the Order Parameters of FeAs-Based and FeP-Based Pnictide Superconductors // [Phys. Rev. Lett.](#) 2011. — May. Vol. 106. P. 187003.
447. Thomale R., Platt C., Hanke W. et al. Exotic d -Wave Superconducting State of Strongly Hole-Doped $K_x\text{Ba}_{1-x}\text{Fe}_2\text{As}_2$ // [Phys. Rev. Lett.](#) 2011. — Sep. Vol. 107. P. 117001.
448. Wang F., Zhai H., Lee D.-H. Nodes in the gap function of LaFePO , the gap function of the $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})$ systems, and the STM signature of the $s_{\pm}$ pairing // [Phys. Rev. B](#). 2010. — May. Vol. 81. P. 184512.
449. Wang F., Yang F., Gao M. et al. The electron pairing of $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2011. Vol. 93, no. 5. P. 57003.
450. Cvetkovic V., Tesanovic Z. Valley density-wave and multiband superconductivity in iron-based pnictide superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Jul. Vol. 80. P. 024512.
451. Maiti S., Chubukov A.V. Renormalization group flow, competing phases, and the structure of superconducting gap in multiband models of iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Dec. Vol. 82. P. 214515.

452. Sato T., Nakayama K., Sekiba Y. et al. Band Structure and Fermi Surface of an Extremely Overdoped Iron-Based Superconductor KFe_2As_2 // [Phys. Rev. Lett.](#) 2009. — Jul. Vol. 103. P. 047002.
453. Terashima T., Kimata M., Kurita N. et al. Fermi Surface and Mass Enhancement in KFe_2As_2 from de Haas–van Alphen Effect Measurements // [Journal of the Physical Society of Japan](#). 2010. Vol. 79, no. 5. P. 053702.
454. Dong J. K., Zhou S. Y., Guan T. Y. et al. Quantum Criticality and Nodal Superconductivity in the FeAs-Based Superconductor KFe_2As_2 // [Phys. Rev. Lett.](#) 2010. — Feb. Vol. 104. P. 087005.
455. Hashimoto K., Serafin A., Tonegawa S. et al. Evidence for superconducting gap nodes in the zone-centered hole bands of KFe_2As_2 from magnetic penetration-depth measurements // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Jul. Vol. 82. P. 014526.
456. Guo J., Jin S., Wang G. et al. Superconductivity in the iron selenide $\text{K}_x\text{Fe}_2\text{Se}_2$ ($0 \leq x \leq 1.0$) // [Phys. Rev. B](#). 2010. — Nov. Vol. 82. P. 180520.
457. Qian T., Wang X.-P., Jin W.-C. et al. Absence of a Holelike Fermi Surface for the Iron-Based $\text{K}_{0.8}\text{Fe}_{1.7}\text{Se}_2$ Superconductor Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy // [Phys. Rev. Lett.](#) 2011. — May. Vol. 106. P. 187001.
458. Das T., Balatsky A. V. Stripes, spin resonance, and nodeless d -wave pairing symmetry in Fe_2Se_2 -based layered superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Jul. Vol. 84. P. 014521.
459. Fang C., Wu Y.-L., Thomale R. et al. Robustness of s -Wave Pairing in Electron-Overdoped $\text{A}_{1-y}\text{Fe}_{2-x}\text{Se}_2$ ($\text{A} = \text{K}, \text{Cs}$) // [Phys. Rev. X](#). 2011. — Sep. Vol. 1. P. 011009.
460. Saito T., Onari S., Kontani H. Emergence of fully gapped s_{++} -wave and nodal

- d*-wave states mediated by orbital and spin fluctuations in a ten-orbital model of KFe_2Se_2 // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Apr. Vol. 83. P. 140512.
461. Mazin I. I. Symmetry analysis of possible superconducting states in $\text{K}_x\text{Fe}_y\text{Se}_2$ superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2011. — Jul. Vol. 84. P. 024529.
462. Kreisel A., Wang Y., Maier T. A. et al. Spin fluctuations and superconductivity in $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ // [Phys. Rev. B](#). 2013. — Sep. Vol. 88. P. 094522.
463. Scalapino D.J. Superconductivity and Spin Fluctuations // [Journal of Low Temperature Physics](#). 1999. Vol. 117, no. 3-4. Pp. 179–188.
464. Scalapino D. J., Loh E., Hirsch J. E. *d*-wave pairing near a spin-density-wave instability // [Phys. Rev. B](#). 1986. — Dec. Vol. 34. Pp. 8190–8192.
465. Zhang J., Sknepnek R., Fernandes R. M., Schmalian J. Orbital coupling and superconductivity in the iron pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Jun. Vol. 79. P. 220502.
466. Yoshida T., Nishi I., Fujimori A. et al. Fermi surfaces and quasi-particle band dispersions of the iron pnictides superconductor KFe_2As_2 observed by angle-resolved photoemission spectroscopy // [Journal of Physics and Chemistry of Solids](#). 2011. Vol. 72, no. 5. Pp. 465 – 468. Spectroscopies in Novel Superconductors 2010 {SNS} 2010.
467. Okazaki K., Ota Y., Kotani Y. et al. Octet-Line Node Structure of Superconducting Order Parameter in KFe_2As_2 // [Science](#). 2012. Vol. 337, no. 6100. Pp. 1314–1317.
468. Platt C., Thomale R., Honerkamp C. et al. Mechanism for a pairing state with time-reversal symmetry breaking in iron-based superconductors // [Phys. Rev. B](#). 2012. — May. Vol. 85. P. 180502.

469. Shimojima T., Sakaguchi F., Ishizaka K. et al. Orbital-Independent Superconducting Gaps in Iron Pnictides // [Science](#). 2011. Vol. 332, no. 6029. Pp. 564–567.
470. Borisenko S. V., Zabolotnyy V. B., Kordyuk A. A. et al. One-Sign Order Parameter in Iron Based Superconductor // [Symmetry](#). 2012. Vol. 4, no. 1. Pp. 251–264.
471. Umezawa K., Li Y., Miao H. et al. Unconventional Anisotropic *s*-Wave Superconducting Gaps of the LiFeAs Iron-Pnictide Superconductor // [Phys. Rev. Lett.](#) 2012. — Jan. Vol. 108. P. 037002.
472. Allan M. P., Rost A. W., Mackenzie A. P. et al. Anisotropic Energy Gaps of Iron-Based Superconductivity from Intraband Quasiparticle Interference in LiFeAs // [Science](#). 2012. Vol. 336, no. 6081. Pp. 563–567.
473. Chubukov A. V., Vavilov M. G., Vorontsov A. B. Momentum dependence and nodes of the superconducting gap in the iron pnictides // [Phys. Rev. B](#). 2009. — Oct. Vol. 80, no. 14. P. 140515.
474. Khodas M., Chubukov A. V. Interpocket Pairing and Gap Symmetry in Fe-Based Superconductors with Only Electron Pockets // [Phys. Rev. Lett.](#) 2012. — Jun. Vol. 108. P. 247003.