

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

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Красноярск – 2014

Работа выполнена в *Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук.*

Научный консультант

*д. ф.-м. н., профессор,
Овчинников Сергей Геннадьевич*

Официальные оппоненты:

*Садовский Михаил Виссарионович
академик РАН, профессор, зав. лаб. теоретической
физики в Федеральном государственном бюджетном
учреждении науки Институт электрофизики
Уральского отделения Российской академии наук*

*Еремин Михаил Васильевич
д. ф.-м. н., профессор, профессор в Федеральном
государственном автономном образовательном
учреждении высшего образования «Казанский
(Приволжский) федеральный университет»*

*Захаров Юрий Владимирович
д. ф.-м. н., профессор, зав. кафедры физики в Фе-
деральном государственном бюджетном образова-
тельном учреждении высшего профессионального
образования «Сибирский государственный техно-
логический университет»*

Ведущая организация:

*Федеральное государственное бюджетное учре-
ждение науки Физический институт им. П.Н. Ле-
бедева Российской академии наук*

Защита состоится «_____» _____ 2015 г. в _____ часов на заседании диссер-
тационного совета Д 003.055.02 при Федеральном государственном бюджетном
учреждении науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского
отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН), расположенном по адре-
су: 66036, Красноярск, академгородок, 50, стр. 38.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФ СО РАН.

Автореферат разослан «_____» _____ 2015 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д. ф.-м. н.



Втюрин А.Н.

Общая характеристика работы

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 кроссовера 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 интеркалировании 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 А-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 купраты. 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 размерности 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 р- и п-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 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$, исследовать 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 резуль-

таты 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 спиновых 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_1T 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 взаимодействие 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 подходят 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 спин-решёточной 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 $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ 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 апробированных 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 Сысертъ (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].

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причём вклад диссертанта был определяющим для статей, включенных в диссертацию. Автор лично принимал участие в постановке всех задач, разработке моделей и методов их решения, анализе и интерпретации полученных результатов. Основная часть численных расчётов, а также разработка и тестирование программ, выполнены лично автором или при его непосредственном участии.

Так, автором лично выполнены все приводимые в диссертации вычисления спиновой и зарядовой восприимчивостей, куперовской вершины и параметра порядка. Параметры для недопированных ВТСП купратов с помощью метода LDA+GTV были получены совместно с В.А. Гавричковым. Аналитические выражения для спиновых и кинематических корреляционных функций в $t - t' - t'' - J$ модели были получены совместно с Д.М. Дзедзисашвили. Дальнейшие расчёты проводил лично автор. Параметры для эффективной модель ко-

бальтитов $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ были получены А. Шориковым и В.А. Анисимовым, а все расчёты в рамках этой модели (динамическая спиновая восприимчивость в нормальной и сверхпроводящей фазах, приближения Хаббард-1 и Гутцвиллера) были сделаны лично автором. Сформулирована четырёхзонная модель и получен спиновый резонанс в сверхпроводниках на основе железа лично автором. Для LaFeAsO температурная зависимость параметра порядка состояния волны спиновой плотности, температура Нееля и магнитный момент вычислены лично автором. Линейная зависимость однородной магнитной восприимчивости получена параллельно с А.В. Чубуковым и Д.В. Ефремовым. Расчёты неупругого динамического рассеяния квазичастиц на спиновых и зарядовых флуктуациях в пятиорбитальной модели проводились совместно с А.Ф. Кемпером, а зависимости постоянной Холла и проводимости от допирования получены лично автором. Уравнения, а также их численное решение, для влияния немагнитных и магнитных примесей на сверхпроводящее состояние соединений железа были получены параллельно с Д.В. Ефремовым. Все расчёты в спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания проводились лично автором, а вычисления параметра порядка в приближении главных угловых гармоник проводились совместно с А.В. Чубуковым и С. Маити.

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.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе содержится обзор литературы, где представлены основные экспериментальные факты и некоторые теории, имеющие непосредственное отношение к исследуемым веществам - купратам, кобальтитам $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ и соединениям железа.

Во второй главе построена теория среднего поля для спин-жидкостной парамагнитной несверхпроводящей фазы р- и п-типа купратов. Эта теория применяется для эффективной $t - t' - t'' - J^*$ модели с трёхцентровыми слагаемыми и параметрами, вычисленными из первых принципов многоэлектронным методом LDA+GTV. Функция Грина, записанная в терминах операторов Хаббарда $X_f^{n,n'} \equiv |n\rangle \langle n'|$, в таком приближении есть $\left\langle \left\langle X_{\mathbf{k}}^{0,\sigma} | X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} \right\rangle \right\rangle_E = \frac{(1+x)/2}{E - (\varepsilon_0 - \mu) - \frac{1+x}{2}t_{\mathbf{k}} - \frac{1-x}{4}\frac{t_{\mathbf{k}}^2}{E_{ct}} + \Sigma(\mathbf{k})}$, где $t_{\mathbf{k}}$ и $\tilde{t}_{\mathbf{k}}$ - это Фурье-образы перескока t_{fg} и межзонного (между верхней и нижней хаббардовскими зонами) перескока $\tilde{t}_{fg}$, а соб-

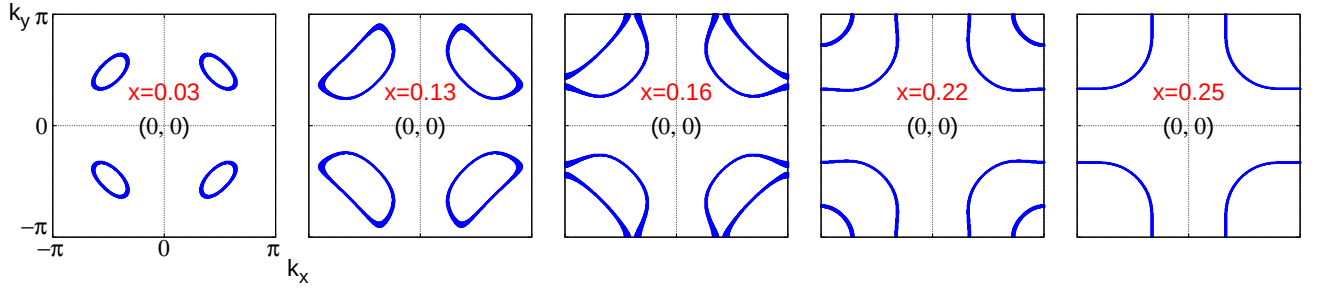


Рис. 1. Ферми-поверхность для различных уровней допирования x в $t - t' - t'' - J^*$ модели для р-типа купратов.

ственно-энергетическая часть $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$ является статической при использованной линеаризации уравнений движения и зависит от статических спин-спиновых $C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_0^z \rangle$ и кинематических $K_{\mathbf{q}} = \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma,0} X_0^{0,\sigma} \rangle$ корреляционных функций. Следуя методу из работы [1], спин-спиновые корреляционные функции вычислялись самосогласованно с химическим потенциалом и электронной структурой.

Для широкой области концентраций допирования x была получена таким образом 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, показанной на Рисунке 1. Эти переходы являются квантовыми фазовыми переходами при $x = 0.15$ и $x = 0.23$.

В купратах п-типа, из-за отличающейся топологии Ферми-поверхности, мы обнаружили только одну квантовую критическую концентрацию, $x = 0.2$. 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 антиферромагнитная фаза заканчивается при $x \approx 0.15$, является то, что он антиферромагнетик до $x \sim 0.3$. Как показал наш расчёт, для него поверхность Ферми в области оптимального допирования характерна для допированного двумерного антиферромагнитного моттовского диэлектрика, что согласуется с данными ARPES.

В третьей главе получен эффективный гамильтониан сильной связи на треугольной решётки Co для описания t_{2g} зон для Na_xCoO_2 . Вырождение t_{2g} уровней частично снимается тригональным кристаллическим полем, которое расщепляет их на синглет a_{1g} и два нижележащие e'_g -уровня. Гамильтониан модели плоскости CoO_2 в отсутствие взаимодействия есть:

$$H_0 = - \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} (\varepsilon^\alpha - \mu) n_{\mathbf{k}\alpha\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\alpha, \beta} t_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\beta\sigma}. \quad (1)$$

где $d_{\mathbf{k}\alpha\sigma}$ - оператор уничтожения 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. Основную часть Ферми-поверхности формирует цилиндр, центрированный на точке $\Gamma = (0, 0)$ и имеющий в основном a_{1g} -характер, и шесть малень-

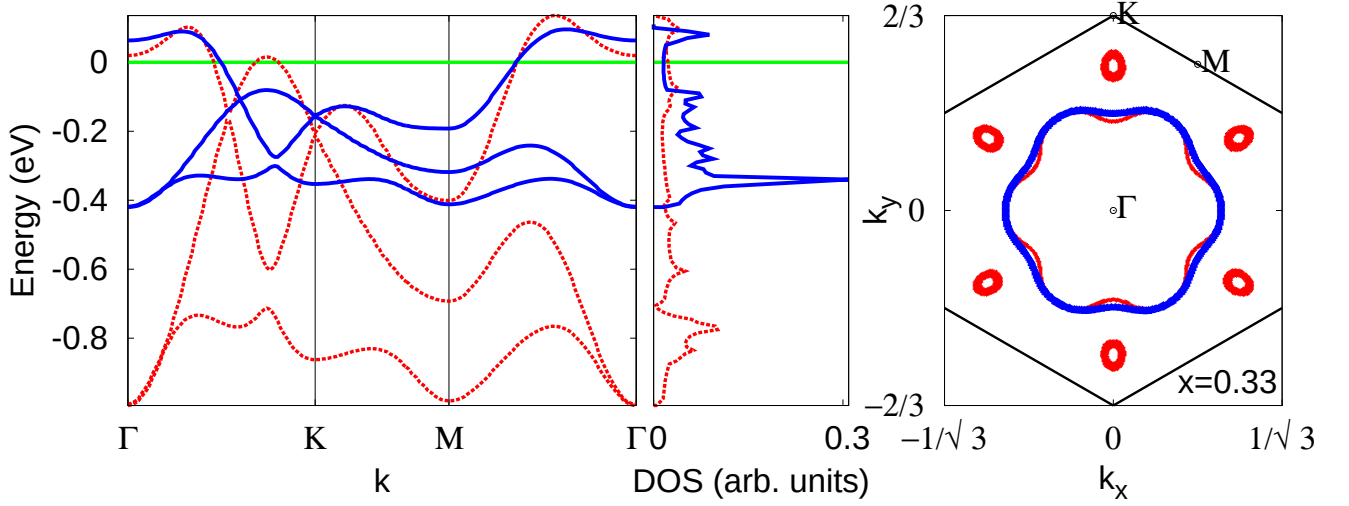


Рис. 2. Электронная структура, плотность состояний и Ферми-поверхность для $\text{Na}_{0.33}\text{CoO}_2$ в модели жёсткой зоны (пунктирные красные линии) и в приближении Гутцвиллера (сплошные синие линии). Горизонтальная зелёная линия отмечает положение химпотенциала.

ких e'_g -карманов вокруг него. Из-за наличия перескоков на следующие за ближайшими соседи формируется локальный минимум в электронной дисперсии вблизи точки Γ . Это приводит к тому, что 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 $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ имеет пики на малых импульсах вблизи $\mathbf{Q}_{FM} = (0, 0)$. Это говорит о доминирующих внутриплоскостных 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: при $x < 0.56$ восприимчивость имеет хорошо определённые пики на антиферромагнитном (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 показывает тенденцию к внутриплоскостному 120° АФМ порядку.

В приближении Гутцвиллера для модели $H = H_0 + \sum_{f,\alpha} U n_{f\alpha\uparrow} n_{f\alpha\downarrow}$ проанализировано влияние сильных корреляций на электронную структуру и корреляционное уменьшение бислойного расщепления. При этом за счёт корреляций возникают множители Лагранжа $\delta\varepsilon^{\alpha\sigma}$, приводящие к сдвигу одноэлектронных энергий, а также перенормировка интеграла перескока $\tilde{t}_{fg}^{\alpha\beta} = t_{fg}^{\alpha\beta} \sqrt{q_{\alpha\sigma}} \sqrt{q_{\beta\sigma}}$ множителями $q_{\alpha\sigma} = \frac{x}{1-n_{\alpha\sigma}}$, где $n_{\alpha\sigma}$ - факторы заполнения орбиталей, $x = 1 - \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma}$ - уравнение на химпотенциал. Именно сдвиги энергий $\delta\varepsilon^{\alpha\sigma}$ приводят к тому, что дырочные e'_g Ферми-поверхности уходят под уровень Ферми [2], см. Рисунок 2. Это приводит к согласию вычисленной Ферми-поверхности и результатов ARPES [3].

В четвёртой главе систематически исследовано 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. Чтобы получить динамическую спиновую восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, i\omega_m)$, мы используем приближение хаотических фаз (Random Phase Approximation, RPA): $\chi(\mathbf{q}, i\omega_m) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}{1 - U\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}$, где $\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)$ восприимчивость БКШ - “голая” восприимчивость в сверхпроводящем состоянии, ω_m - мацубаровская частота. 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. На основе вычисленной спиновой восприимчивости получены температурные зависимости сдвига Найта $K(T)$ и спин-решёточной релаксации $1/T_1T$: $K(T) \propto \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \text{Re}\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$, $1/T_1T \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega)}{\omega}$. В сверхпроводящем состоянии температурные зависимости $K(T)$ и $1/T_1T$ для $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy} симметрий параметра порядка согласуются с экспериментальными ЯМР и ЯКР данными, а $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ симметрия без линий нулей на Ферми-поверхности исключается. Также мы указываем, что спин-резонансный пик в $\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega)$, 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 при отклонении от него.

В пятой главе сформулирована эффективная четырёхзонная модель пниктидов с гамильтонианом

$$H_0 = - \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \epsilon^i n_{\mathbf{k}i\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, i, \sigma} t_{\mathbf{k}}^i d_{\mathbf{k}i\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}i\sigma}, \quad (2)$$

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 $\Gamma = (0, 0)$, 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, приводящая к электронным карманам вокруг точки $M = (\pi, \pi)$. Для упрощения анализа мы используем эффективные параметры: внутризонное U и межзонное J отталкивания. Тогда в RPA спиновый отклик многозонной системы будет иметь матричный вид $\hat{\chi}_{RPA}(\mathbf{q}, i\omega_m) = [\mathbf{I} - \mathbf{\Gamma} \hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m)]^{-1} \hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m)$, где $\mathbf{I}$ - единичная матрица, $\hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m)$ матрица 4×4 , сформированная из межзонных и внутризонных компонент голой восприимчивости. Вершина взаимодействия есть

$$(\mathbf{\Gamma})_{\alpha, \beta} = \delta_{\alpha, \beta} (U - J/2) + J/2. \quad (3)$$

На основе этой модели проанализирован спиновый отклик в нормальной и

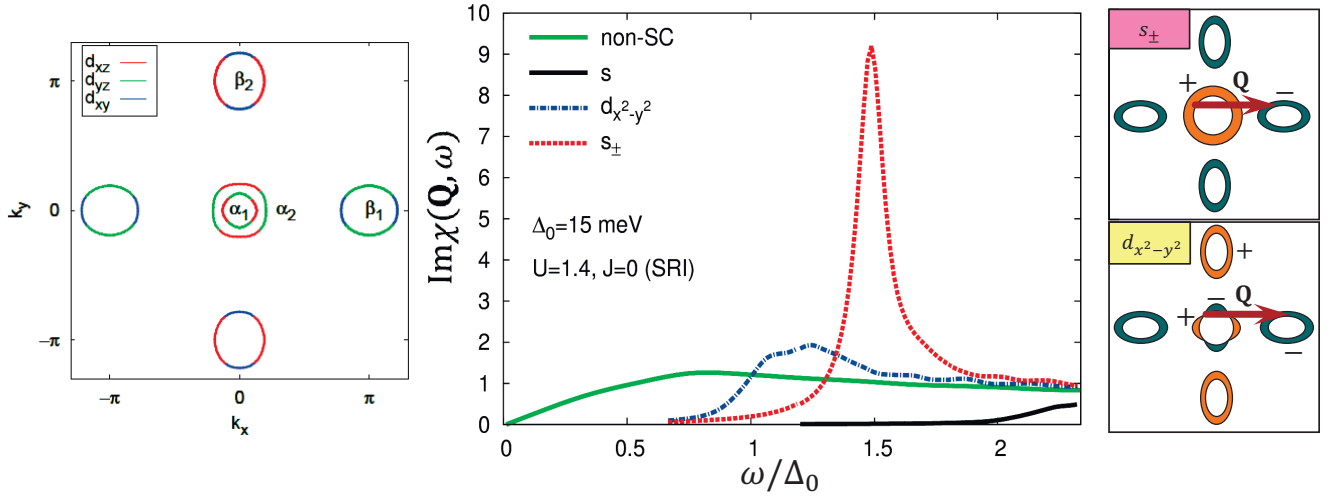


Рис. 3. Ферми-поверхность (слева) в модели [6] при допировании электронами $x = 0.05$. Орбитали, дающие максимальные вклады, выделены цветом. Посередине - вычисленная в этой модели $\text{Im}\chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}, \omega)$ в нормальном состоянии (non-SC) и в сверхпроводящем с s (s_{++}), $d_{x^2-y^2}$ и $s_{\pm}$ симметриями щели (схематично показаны справа). В последнем случае возникает резонансный пик при $\omega < 2\Delta_0$.

сверхпроводящей фазах соединений железа. В то время, как в нормальной фазе спиновые возбуждения происходят от межзонных антиферромагнитных флуктуаций, необычная сверхпроводимость приводит к возникновению резонансного пика на антиферромагнитном волновом векторе $\mathbf{Q}$ только для сверхпроводника с $s_{\pm}$ типом симметрии. 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 нами теоретически, а затем обнаружен экспериментально во всех семействах пниктидов и халькогенидов, см., например, [4, 5]. В четырёхзонной модели мы также рассмотрели возникновение спинового резонанса в халькогенидах, что позволило качественно объяснить все главные особенности нейтронных данных по магнитным возбуждениям в $\text{FeTe}_{0.6}\text{Se}_{0.4}$.

Исследование динамической спиновой восприимчивости в реалистичной пятиорбитальной модели соединений железа показали, что все качественные выводы, сделанные на основе четырёхзонной модели, верны. Так, в пятиорбитальной модели для системы 1111 [6], Ферми-поверхность состоит из четырёх Ферми-карманов, см. Рисунок 3. Такая геометрия в $\mathbf{k}$ -пространстве в зоне Бриллюэна приводит к возможности возникновения волны спиновой плотности из-за нестинга между дырочной и электронной Ферми-поверхностями на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ или $(0, \pi)$. Модель имеет гамильтониан:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{ll'} (t_{ll'}(\mathbf{k}) + \epsilon_l \delta_{ll'}) d_{l\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{l'\mathbf{k}\sigma}, \quad (4)$$

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. Индекс l нумерует все пять

d -орбиталей железа (d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} , $d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$). Для исследования магнитной восприимчивости мы используем гамильтониан взаимодействия, включающий одноузельные внутри- и межорбитальное хаббардовское отталкивание U и U' , хундовский обмен J и парный перескок $J' = J$ [6–9]:

$$H = H_0 + U \sum_{f,m} n_{fm\uparrow} n_{fm\downarrow} + U' \sum_{f,m<l} n_{fl} n_{fm} + \\ + J \sum_{f,m<l} \sum_{\sigma,\sigma'} d_{fl\sigma}^\dagger d_{fm\sigma}^\dagger d_{fl\sigma'} d_{fm\sigma'} + J' \sum_{f,m \neq l} d_{fl\uparrow}^\dagger d_{fl\downarrow}^\dagger d_{fm\downarrow} d_{fm\uparrow}. \quad (5)$$

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 . На основании взаимодействия в гамильтониане (5) можно построить приближение RPA для физической спиновой восприимчивости $\chi_{+-}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{1}{2} \sum_{l,m} \chi_{+-}^{ll,mm}(\mathbf{q}, i\omega_n)$, см. работу [6]. Результат аналитического продолжения показан на Рисунке 3, где 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 $\text{Im}\chi_0$ очень мала, что приводит всего лишь к небольшому увеличению восприимчивости в RPA по сравнению с нормальным состоянием.

В шестой главе в рамках четырёхзонной модели пниктидов (2) с вершиной взаимодействия $\mathbf{\Gamma}$ из уравнения (3) 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. Для данной топологии Ферми-поверхности основная магнитная неустойчивость возникает на АФМ векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам Fe на ячейку. Причина её состоит в межзонном нестинге - между дырочной α - и электронной β -зонами [10, 11].

Положив диагональные матричные элементы $\mathbf{\Gamma}$ равными 320 мэВ, а все остальные равным 70 мэВ, из уравнения на магнитную неустойчивость $\det[\mathbf{I} - \mathbf{\Gamma}\hat{\chi}_0(\mathbf{q}, i\omega_m)] = 0$ мы получили температуру упорядочения $T_N = 138$ К. Ниже T_N это условие на неустойчивость по отношению к формированию волны спиновой плотности можно рассматривать как уравнение среднего поля на параметр порядка Δ_{SDW} . Полученная таким образом температурная зависимость $\Delta_{SDW}(T)$ из-за многоорбитального характера уравнения немного отличается от $\sqrt{1 - (T/T_N)^2}$. Из полученного при нуле температур значения $\Delta_{SDW}(T = 0\text{K}) = 31$ мэВ мы оценили магнитный момент на железе как $\mu \approx 0.33\mu_B$, что близко к измеренному с помощью мёссбауэровской спектроскопии ^{57}Fe и релаксацией спина мюона в LaFeAsO значению $0.25(5)\mu_B$ на железе.

При увеличении допирования антиферромагнитные флуктуации сначала приводят к Кюри-Вейсовской зависимости $1/T_1T$, а затем они подавляются и,

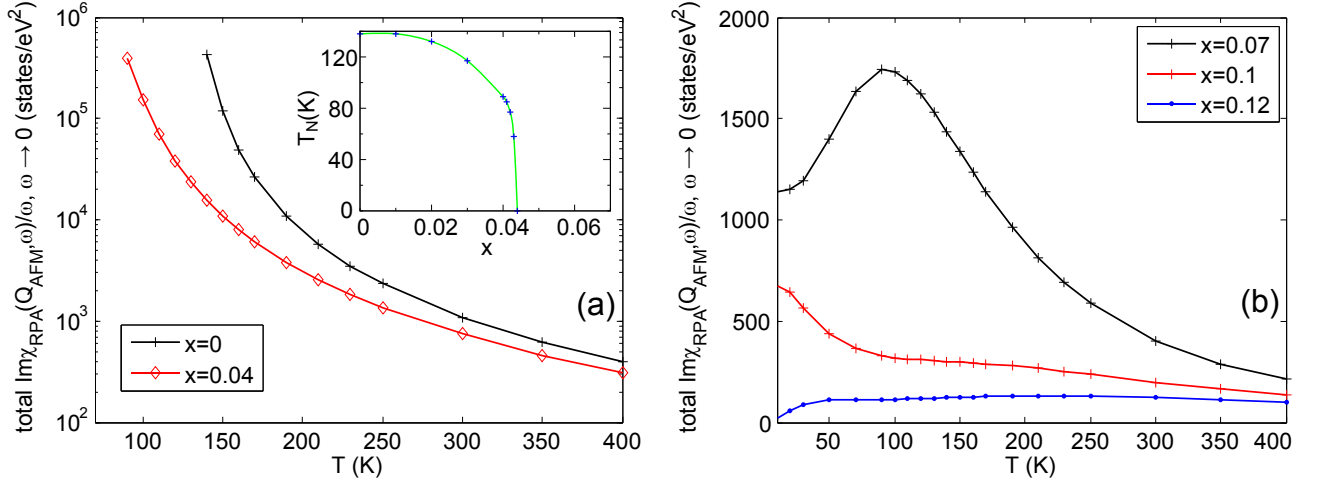


Рис. 4. Зависимость скорости спин-решётчной релаксации $\frac{1}{T_1 T} \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im}\chi_{RPA}(\mathbf{Q}, \omega)}{\omega}$ от допирования. На панели (а) использован логарифмический масштаб. Вставка на этой панели показывает рассчитанную зависимость температуры Нееля от допирования.

при $x > 0.1$, $\text{Im}\chi(\mathbf{Q}, \omega)$ становится практически независимой от температуры величиной, см. Рисунок 4. Такое поведение качественно согласуется с наблюдаемой в экспериментах ЯМР картиной.

В седьмой главе изложено объяснение наблюдаемой [12–15] необычной для Ферми-жидкости линейной температурной зависимости однородной спиновой восприимчивости $\chi(T)$ в пниктидах. Для этой цели мы рассматриваем двухзонную модель взаимодействующих фермионов [16], формирующих электронные и дырочные Ферми-поверхности:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[\varepsilon_{\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \right] + \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma, \sigma'} H_{\text{int}}, \\
 H_{\text{int}} &= u_1 c_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger f_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + u_2 f_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + \frac{u_4}{2} f_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger f_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}_2\sigma'} f_{\mathbf{p}_1\sigma} + \\
 &+ \frac{u_3}{2} \left[f_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger f_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + H.c \right] + \frac{u_5}{2} c_{\mathbf{p}_3\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}_4\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma},
 \end{aligned} \tag{6}$$

где $c_{\mathbf{k}\sigma}$ ($f_{\mathbf{k}\sigma}$) - 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, μ является мерой отклонения от идеального нестинга, а u_i - это взаимодействия между фермионами на Ферми-поверхности.

В модели из работы [16] из диаграмм второго порядка для термодинамического потенциала $\delta\Phi$ мы получаем намагниченность $\delta M = -\partial(\delta\Phi)/\partial H$, а из неё, дифференцируя по H в пределе $H \rightarrow 0$, получаем вклад в восприимчивость $\delta\chi(T)$. Каждая диаграмма для $\delta\Phi(T, H)$ содержит объект $\varphi(T, H) = T^3 \sum_{\Omega} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\omega, \omega'} \int \frac{d^2\mathbf{k} d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^4} G_{\mathbf{k}, \omega}^{\sigma} G_{\mathbf{p}, \omega'}^{\sigma} G_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \omega'+\Omega}^{\sigma'} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \omega+\Omega}^{\sigma'}$, где $G_{\mathbf{k}, \omega}^{\sigma}$ - это мацубаровская функция Грина фермионов с импульсом $\mathbf{k}$ и спином σ в магнитном по-

ле H . $\varphi(T, H)$ можно выразить как произведение двух динамических петель $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega}^{\sigma\sigma'} = T \sum_{\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_{\mathbf{k}, \omega}^{\sigma} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \omega+\Omega}^{\sigma'}$ с малым импульсом $q \ll k_F$, каждая из которых равна $\Pi_{\mathbf{q}, \Omega} = \frac{m}{2\pi} \frac{|\Omega|}{\sqrt{(\Omega - 2i\mu_B H - 2i\mu^*)^2 + (v_F q)^2}}$, где $\mu^* = 0$ для внутризонного рассеяния и $\mu^* = \mu$ для межзонного рассеяния. Дальнейшие вычисления идут как и в случае обычной Ферми-жидкости [17, 18] и приводят к результату $\delta\chi(T) = \lambda T [u_4^2 + u_5^2 + 2(u_1^2 + u_2^2 - u_1 u_2) \eta(\mu/T)]$, где функция $\eta(x) = 2x \coth x - x^2 / \sinh^2 x - 2x$ возникает из-за отклонения от идеального нестинга при допировании. Из рассмотрения диаграмм высшего порядка следует, что вблизи неустойчивости SDW сингулярные перенормировки u_1 формируют лестничную последовательность, которая суммируется в $u_1^{\text{eff}} = \frac{u_1}{1 - u_1 N_F \ln \frac{\varepsilon_F}{\max(T, \mu)}}$. Вместе с перенормировкой всех взаимодействий на масштабе энергий порядка ширины зоны с помощью паркетной ренормгруппы [16], это приводит к следующей зависимости: $\delta\chi(T) \approx \frac{8(u N_F)^2 \chi_0}{v_F k_F} T \left[1 + \frac{\eta(\mu/T)}{(1 - u N_F \ln \frac{\varepsilon_F}{\max(T, \mu)})^2} \right]$. Этот результат отличается от результата для $\delta\chi(T)$ в обычной двумерной Ферми-жидкости, где полное $\delta\chi(T)$ не выражается через амплитуду обратного рассеяния [18–21]. Разница происходит из симметрии между каналом частица-частица (куперовский канал) в обычной Ферми-жидкости и каналом частица-дырка в Ферми-жидкости с нестингом.

Выбирая $v_F = 0.45$ эВ·Å и $k_F \approx 0.16$ Å⁻¹ в соответствии с данными ARPES [22], мы получаем $\varepsilon_F \sim 0.04$ эВ. Мы фиксируем безразмерную константу связи $u N_F$ требованием, чтобы вершина SDW u_1^{eff} увеличивалась при достижении T_N . Найденный угол наклона $(\chi(T = 700\text{K})/\chi(0))_{\text{theor}} \approx 1.7$, очень близок к экспериментальному значению $(\chi(700\text{K})/\chi(0))_{\text{exp}} \approx 2$. Подробное сравнение между экспериментальными данными и результатами расчёта показывает очень хорошее согласие с экспериментальными данными.

В восьмой главе исследовано динамическое рассеяния квазичастиц спиновыми и зарядовыми флуктуациями в пятиорбитальной модели соединений железа [6]. Задача возникла из измерений эффекта Холла, где даже в недопированных системах в транспортных свойствах наблюдалось доминирование электронов [23–28], что, в случае примерно равных электронных и дырочных Ферми-карманов, можно объяснить только существенным отличием мобильности дырок и электронов, что подразумевает разницу на порядок во временах релаксации $\tau_e \gg \tau_h$. Полная проводимость есть сумма зонных проводимостей $\sigma(\omega) = \sum_{\lambda} \sigma_{x\lambda}(\omega)$, где $\sigma_{x\lambda}(\omega) = \frac{e^2}{\pi\hbar} \int_{\mathbf{k} \in \mathbf{k}_{F\lambda}} d\mathbf{k} N_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}_x}^2 \tau_{\mathbf{k}}(\omega)$. 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.

Главный вклад в величину рассеяния $\Sigma_{\lambda}''(\mathbf{k}, \omega)$ мы получаем из диаграмм второго порядка с поляризационным оператором в приближении RPA. Суще-

ствуют важные следствия многоорбитальной природы исследуемой системы. Во-первых, одночастичная функция Грина в отсутствие взаимодействия диагональна в зонном базисе, но не в орбитальном. Орбитальные матричные элементы $\varphi_{\mathbf{k}n}^\lambda$, которые описывают переход от одного базиса к другому, определяются следующим соотношением: $d_{\mathbf{k}n\sigma} = \sum_{\lambda} \varphi_{\mathbf{k}n}^\lambda c_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$, где $c_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$ - это оператор уничтожения частицы с зонным индексом λ , импульсом $\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}^\lambda$, n - индекс орбитали. Во-вторых, взаимодействия в гамильтониане (5) имеют сложную орбитальную структуру; чтобы компактифицировать выражения, мы определим локальные матричные взаимодействия в орбитальном пространстве как $U_{nr}^{wz} d_{iw\sigma_1}^\dagger d_{ir\sigma_2}^\dagger d_{iz\sigma_3} d_{in\sigma_4}$, что соответствует всем биквадратным членам. Импульсная зависимость орбитальных матричных элементов приводит к эффективному зависящему от импульса взаимодействию, возникающему из голых локальных кулоновских взаимодействий: $V_{\bar{n},\lambda}^{\bar{w}\bar{z}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = \sum_{\bar{r}} U_{\bar{n}\bar{r}}^{\bar{w}\bar{z}} \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\bar{r}}^\lambda$, через которое выражение для мнимой части массового оператора может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\bar{n}\bar{n}'}(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \sum_{\bar{w}, \bar{z}, \bar{u}, \bar{v}} V_{\bar{n},\lambda}^{\bar{w}\bar{z}}(\mathbf{q}) V_{\bar{n}',\lambda}^{\bar{v}\bar{u}}(\mathbf{q}) \times \\ &\times \text{Im}\chi_{\bar{w}\bar{z}}^{\bar{v}\bar{u}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \varepsilon_{\mathbf{q}}^\lambda) [\Theta(\varepsilon_{\mathbf{q}}^\lambda) - \Theta(\varepsilon_{\mathbf{q}}^\lambda - \omega)], \end{aligned} \quad (7)$$

где $\chi_{\bar{w}\bar{z}}^{\bar{v}\bar{u}}(\mathbf{q}, \omega)$ - это поляризационный оператор в приближении RPA. 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. Затем мы переходим к зонному представлению, $\text{Im}\Sigma_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{n,n'} \varphi_{\mathbf{k}n}^\lambda \text{Im}\Sigma_{nn'}(\mathbf{k}, \omega) \varphi_{\mathbf{k}n'}^{\lambda'}$.

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 приходит от диагональных ($\lambda = \lambda'$) матричных элементов $\text{Im}\hat{\Sigma}$. Обозначим их $\Sigma_{\lambda}''(\mathbf{k}, \omega) \equiv \text{Im}\Sigma_{\lambda\lambda}(\mathbf{k}, \omega)$. Отметим, что мы делаем приближение, заменяя 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.

В левой части Рисунка 5 показана полная 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. В правой части Рисунка 5 показаны проводимости на дырочных и электронных Ферми-поверхностях как функции допирования с вычисленным нами временем жизни $\tau_{\mathbf{k}}$. Сразу видно, что проводимость электронов растёт достаточно быстро при электронном допировании. В отличие от чисто кинетического случая

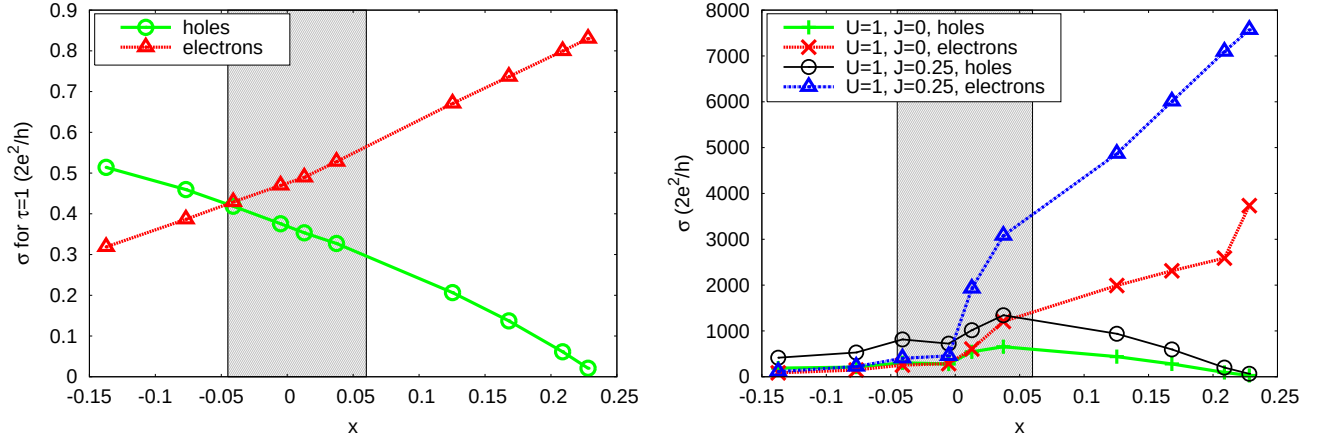


Рис. 5. Слева: проводимость дырок и электронов как функция допирования $x = n_e - 6$ при постоянной скорости релаксации $1/\tau = 1$ эВ. Справа: проводимость дырок и электронов как функция допирования x при эффективной температуре $T = 74$ К для двух наборов параметров (в эВ): $U = 1.0, J = 0$ и $U = 1.0, J = 0.25$. Закрашенная часть отмечает область, где экспериментально наблюдается антиферромагнитный порядок в системах типа 122.

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 экспериментов на допированном кобальтом Ва-122 в однозонной модели электронов [23, 24].

Любое отличие интенсивности рассеяния между электронами и дырками должно проявиться в коэффициенте Холла $R_H = -\sigma_H(\omega)/\sigma^2(\omega)$, где $\sigma_H(\omega)$ - это проводимость Холла. Найденная одночастичная интенсивность рассеяния очень анизотропна на каждой Ферми-поверхности из-за импульсной зависимости спиновой восприимчивости и многоорбитального состава каждого Ферми-кармана. Так, в частном случае 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 состояний d_{xy} на дырочных карманах. Эта анизотропия на электронных Ферми-карманах имеет важные следствия для транспортных свойств. Хотя в среднем τ_e того же порядка, что и τ_h , транспортные свойства могут определяться малыми участками электронных карманов, где время жизни квазичастиц и скорость Ферми велики. Эта комбинация приводит к разнице между электронами и дырками в транспортных свойствах - проводимости и коэффициенте Холла. Полученные результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

В девятой главе рассмотрена проблема немагнитного и магнитного беспорядка в двухзонных сверхпроводниках с $s_{\pm}$ - и s_{++} -типами симметрии параметра порядка в теории сильной связи. T_c и сверхпроводящая щель определяются из перенормированных за счёт собственно-энергетической части частоты $\tilde{\omega}_{\alpha n}$ и параметра порядка $\tilde{\phi}_{\alpha n}$ для зоны $\alpha = a, b$ и мацубаровской частоты

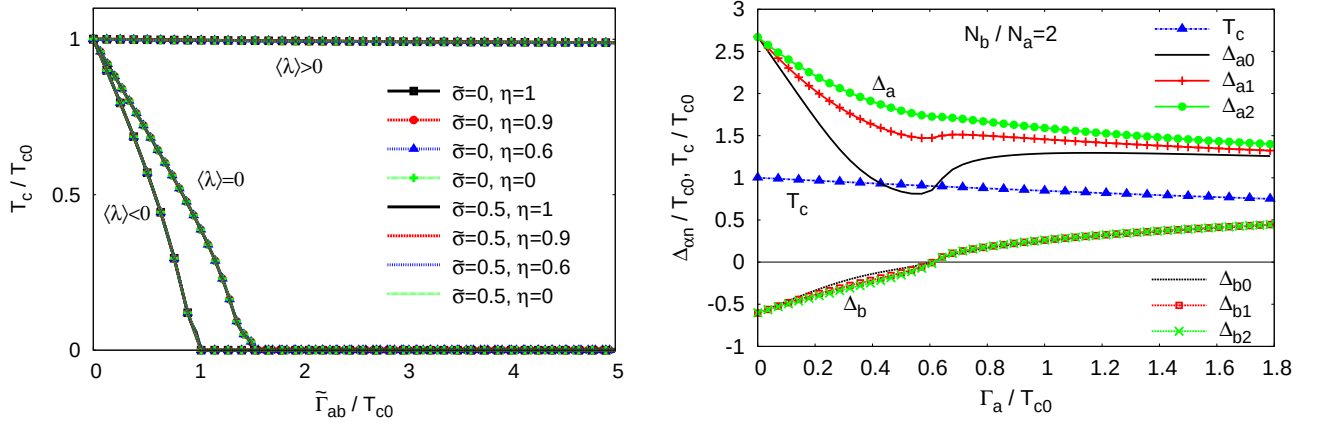


Рис. 6. Слева показана критическая температура как функция эффективного параметра интенсивности межзонного рассеяния $\tilde{\Gamma}_{ab}$ для различных значений $\tilde{\sigma}$ ($\tilde{\sigma} \rightarrow 0$ в борновском пределе и $\tilde{\sigma} \rightarrow 1$ в унитарном пределе), и параметра η , определяющего отношение внутризонного к межзонному рассеянию как $v^2 = u^2\eta$. Кривые для различных наборов $\tilde{\sigma}$ и η накладываются друг на друга и формируют одну из трёх универсальных кривых, зависящих от знака $\langle\lambda\rangle$. Справа показаны T_c и $\Delta_{\alpha n}$ (в единицах T_{c0}) для мацубаровских частот $\omega_{n=1,2,3}$ при $T = 0.04T_{c0}$. Параметры выбраны следующими: $\tilde{\sigma} = 0.5$, $\eta = 1$, $N_b/N_a = 2$, $(\lambda_{aa}, \lambda_{ab}, \lambda_{ba}, \lambda_{bb}) = (3, -0.2, -0.1, 0.5)$ так, что $\langle\lambda\rangle > 0$.

$\omega_n = \pi T(2n+1)$: $\tilde{\omega}_{\alpha n} = \omega_n + i\Sigma_{0\alpha}(i\omega_n) + i\Sigma_{0\alpha}^{\text{imp}}(i\omega_n)$, $\tilde{\phi}_{\alpha n} = \Sigma_{1\alpha}(i\omega_n) + \Sigma_{1\alpha}^{\text{imp}}(i\omega_n)$, где $\Sigma_{\alpha}(i\omega_n)$ и $\Sigma_{\alpha}^{\text{imp}}(i\omega_n)$ - это собственно-энергетические части, обусловленные спин-флуктуационным взаимодействием с константами связи $\lambda_{\alpha\beta}$ и рассеянием на примесях, соответственно. В самосогласованном приближении T -матрицы [29] имеем матричное уравнение $\hat{\Sigma}^{\text{imp}}(i\omega_n) = n_{\text{imp}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}\hat{\mathbf{g}}(\omega_n)\hat{\Sigma}^{\text{imp}}(i\omega_n)$, где $\hat{\mathbf{g}}(\omega_n) = \int d\xi \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}, \omega_n)$ - это ξ -интегрированная функция Грина, $\hat{\mathbf{U}}$ - примесный потенциал, а n_{imp} - это концентрация примесей. Удобно ввести фактор перенормировки $Z_{\alpha n} = \tilde{\omega}_{\alpha n}/\omega_n$, который входит в функцию щели $\Delta_{\alpha n} = \tilde{\phi}_{\alpha n}/Z_{\alpha n}$. Для простоты мы выбираем внутризонные и межзонные части потенциала немагнитных (магнитных) примесей равными v и u ($\mathcal{I}$ и $\mathcal{J}$), соответственно. Для магнитных некоррелированных примесей потенциал рассеяния немного сложнее: $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{V} \otimes \hat{\mathbf{S}}$, где $\hat{\mathbf{S}} = \text{diag}[\hat{\sigma} \cdot \mathbf{S}, -(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{S})^T]$, $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ - вектор спина. Мы предполагаем, что спины не поляризованы и $s^2 = \langle S^2 \rangle = S(S+1)$.

Результат для рассеяния на немагнитных примесях состоит в том, что, в зависимости от знака $\langle\lambda\rangle$, получается два типа поведения сверхпроводника $s_{\pm}$ -типа: (1) при $\langle\lambda\rangle < 0$, T_c исчезает при конечной величине интенсивности рассеяния на примесях $\tilde{\Gamma}_{ab}^{\text{crit}}$; (2) при $\langle\lambda\rangle > 0$, T_c остаётся конечной при $\tilde{\Gamma}_{ab} \rightarrow \infty$, см. Рисунок 6. В случае $\langle\lambda\rangle = 0$, $\tilde{\Gamma}_{ab}^{\text{crit}} \rightarrow \infty$ с экспоненциально малым T_c . Здесь $\langle\lambda\rangle \equiv [(\lambda_{aa} + \lambda_{ab})N_a/N + (\lambda_{ba} + \lambda_{bb})N_b/N]$, где $N = N_a + N_b$ - плотность состояний в нормальной фазе. 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 [30], неожиданным является поведения типа (2). Объяснение состоит в том, что в таких системах T_c остаётся конечной из-за перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$, пока-

занного на Рисунке 6. 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.

При наличии магнитных примесей система может демонстрировать конечное значение критической температуры T_c с $s_{\pm}$ -типом параметра порядка при наличии исключительно межзонного потенциала 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 [30, 31] и согласуется с теоретическими расчётами в борновском пределе [32]. При конечном $\mathcal{I}$ внутризонное рассеяние на магнитных примесях приводит к усреднению щелей вплоть до нуля, следовательно, подавляется T_c . 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. Выход T_c на насыщение имеет место только для исключительно межзонного рассеяния, а присутствие внутризонного магнитного рассеяния в конце концов подавляет T_c до нуля. Но, в зависимости от “силы” рассеяния $\sigma = \frac{\pi^2 \mathcal{J}^2 s^2 N_a N_b}{1 + \pi^2 \mathcal{J}^2 s^2 N_a N_b}$ (равно нулю в борновском пределе и единице в унитарном), 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 . Для s_{++} -состояния, после определённого значения интенсивности рассеяния, меньший параметр порядка Δ_b становится отрицательным. Это ни что иное, как 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.

Одним из важных свойств переходов $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ и $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$ является бесщелевая сверхпроводимость, возникающая, когда одна из щелей становится равной нулю. Такое бесщелевое состояние должно проявляться в термодинамике системы, например, в оптических и туннельных экспериментах, и в температурной зависимости лондоновской глубины проникновения. Так, глубина проникновения в чистом пределе демонстрирует активационное поведение, определяемое меньшей щелью. В случае магнитных примесей, поведение сверхпроводника s_{++} -типа становится пропорционально T^2 в бесщелевом режиме, что приводит к существенному провалу в зависимости глубины проникновения вблизи критической Γ_a , при которой одна из щелей обращается в нуль, а затем переходит к новому активационному типу поведения в $s_{\pm}$ -состоянии после перехода.

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 $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$.

В десятой главе сформулирована и использована для изучения зависимости от допирования симметрии и структуры сверхпроводящей щели эффективная низкоэнергетическая модель спаривания для сверхпроводников на основе железа с s - и d -типами параметра порядка. Исходно точкой является куперовская вершина в многоорбитальной системе, которая в подходе спин-флуктуационной теории на основе RPA (RPA-type Spin-Fluctuation approach, RPA-SF) [6, 9] с одноузельными кулоновскими взаимодействиями (5) равна: $\Gamma_{\uparrow\downarrow}^{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \left[\frac{3}{2} \hat{U}_s \hat{\chi}_s(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \hat{U}_s - \frac{1}{2} \hat{U}_c \hat{\chi}_c(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \hat{U}_c + \frac{1}{2} \hat{U}_s + \frac{1}{2} \hat{U}_c \right]_{l_1 l_2 l_3 l_4}$, 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.

Необходимость строить теорию в орбитальном представлении вызвана тем, что именно в нём взаимодействие Хаббардовского типа, содержащееся в (5), остаётся локальным. Переход от орбитального базиса (l) к зонному (μ) осуществляется с помощью матричных элементов $\varphi_{\mathbf{k}l}^{\mu}: |\sigma l \mathbf{k}\rangle = \sum_{\mu} \varphi_{\mathbf{k}l}^{\mu} |\sigma \mu \mathbf{k}\rangle$. Тогда $\tilde{\Gamma}_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4} \varphi_{\mathbf{k}l_2}^{\mu*} \varphi_{-\mathbf{k}l_3}^{\mu*} \Gamma_{\uparrow\downarrow}^{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) \varphi_{\mathbf{k}'l_1}^{\nu} \varphi_{-\mathbf{k}'l_4}^{\nu}$. Аналогично тому, как для электрон-фононного взаимодействия константа связи определяется интегралом по частотам от функции Элиашберга $\alpha^2 F(\omega)$, здесь, используя соотношения Крамерса-Кронига получаем

$$\int_0^{\infty} d\omega \frac{\text{Im} \tilde{\Gamma}_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)}{\omega} = \text{Re} \tilde{\Gamma}_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega = 0) \equiv \Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (8)$$

Таким образом, задача вычисления эффективного спаривающего взаимодействия сводится к нахождению реальной части $\tilde{\Gamma}_{\mu\nu}$ на нулевой частоте, что существенно облегчает вычисления. 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 ($g_{\mathbf{k}}$) [6]:

$$\lambda g_{\mathbf{k}} = - \sum_{\nu} \oint_{\nu} \frac{d\mathbf{k}'_{\parallel}}{2\pi} \frac{1}{2\pi v_{F\mathbf{k}'}} \Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') g_{\mathbf{k}'}, \quad (9)$$

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.

Основное предположение приближения низших угловых гармоник (Lowest Angular Harmonics Approximation, ЛАНА) состоит в том, что куперовская вершина $\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ факторизуется по импульсам $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ и может быть представлена как $\Gamma^{\eta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{m,n} C_{mn}^{\eta} \Psi_m^{\eta}(\mathbf{k}) \Psi_n^{\eta}(\mathbf{k}')$, 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 3, 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 $\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ в подходе RPA-SF [6, 9]. Сравнение результатов для параметра порядка показало, что подход ЛАНА очень хорошо воспроизводит результаты RPA-SF.

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 7 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, связы-

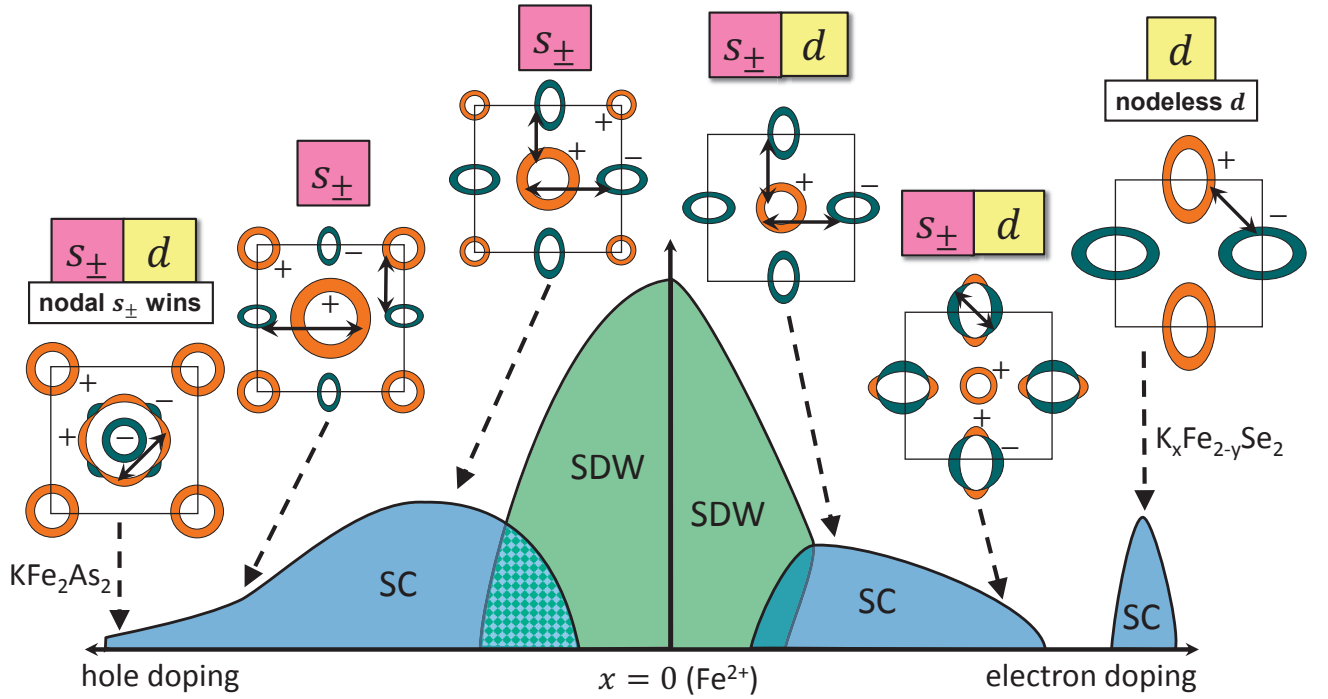


Рис. 7. Схематическая фазовая диаграмма соединений железа и качественная картина симметрий параметра порядка, следующая из спин-флуктуационной теории спаривания и приближения ЛАНА. Подписи ($s_{\pm}$, d) обозначают доминирующую и сабдоминирующую симметрию спаривания. Стрелками ($\leftrightarrow$) показано доминирующее взаимодействие.

вающими частицы на Ферми-поверхностях. Так, главное взаимодействие при слабом допировании — это взаимодействие между электронными и дырочными карманами, $U_{\alpha_i\beta}$, 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 $K_xFe_{2-y}Se_2$, когда дырочные карманы пропадают, система формирует d -тип сверхпроводимости из-за сильного взаимодействия между электронными Ферми-карманами. 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 3), то новый канал рассеяния на него с электронных карманов приводит к изотропизации щели на электронных карманах. При дальнейшем допировании дырками, когда электронные карманы 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.

В Заключение суммируется вышеизложенный материал и приводятся основные выводы.

Основные результаты и выводы.

1. Для недопированных ВТСП купратов р-типа (La_2CuO_4) и n-типа (Nd_2CuO_4 и Sm_2CuO_4) с помощью метода LDA+GTV 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 темпера-

туре, $\Delta_{SDW}(T = 0) = 31$ мЭВ, вычислен магнитный момент $\mu = 0.33\mu_B$, подходящий 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 восприимчивости. 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 примесей 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 $K_xFe_{2-y}Se_2$, 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 .

Список публикаций

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 сверхпроводящей фазах в рамках LDA+ГТВ-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 quasiparticle 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 antiferromagnetic 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 VIII.

Цитированная литература

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. 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.
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. Oleś A. M. Antiferromagnetism and correlation of electrons in transition metals // [Phys. Rev. B](#). 1983. — Jul. Vol. 28. Pp. 327–339.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. 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.

13. 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.
14. 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.
15. 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.
16. 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.
17. Betouras J., Efremov D., Chubukov A. Thermodynamics of a Fermi liquid in a magnetic field // [Phys. Rev. B](#). 2005. — Sep. Vol. 72. P. 115112.
18. 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.
19. 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.
20. 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.
21. 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.
22. 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.
23. 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.

24. 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.
25. 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.
26. 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.
27. 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.
28. 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.
29. 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.
30. 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.
31. 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.
32. Li J., Wang Y. Magnetic impurities in the two-band $s_{\pm}$ -wave superconductors // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 2009. Vol. 88, no. 1. P. 17009.

Научное издание

М.М. Коршунов

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук на тему:

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

Подписано в печать 29.12.2014.

Формат 60 × 85/16, усл. печ. л. 2.

Тираж 100 экз. Заказ №66.

Отпечатано в типографии ФГБУН Институт физики им. Л.В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук. 660036, Красноярск,
Академгородок, 50/38, ИФ СО РАН