

Сверхпроводимость в соединениях на основе железа

Научная сессия Отделения физических наук
Российской академии наук, 29 января 2014 г.

PACS numbers: 01.10.Fv, **74.25.-q**, 74.70.Xa

DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408f.0875

29 января 2014 г. в конференц-зале Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (РАН) состоялась Научная сессия Отделения физических наук РАН "Сверхпроводимость в соединениях на основе железа".

Объявленная на web-сайте ОФН РАН www.grad.ac.ru повестка заседания содержала следующие доклады:

1. **Ерёмин И.М.** (Институт теоретической физики Университета Бохума, Бохум, Германия; Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань). *Магнетизм в железосодержащих сверхпроводниках: взаимодействие магнитных, орбитальных и решёточных степеней свободы.*

2. **Коршунов М.М.** (Институт физики им. А.В. Киренского СО РАН, Красноярск). *Сверхпроводящее состояние в соединениях железа и спин-флуктуационная теория спаривания.*

3. **Кузьмичёва Т.Е.** (Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва; Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва). *Андреевская спектроскопия железосодержащих сверхпроводников: температурная зависимость параметров порядка и их скейлинг с T_c .*

4. **Ельцев Ю.Ф.** (Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва). *Синтез и исследование магнитных и транспортных свойств железосодержащих сверхпроводников семейства 122.*

Статьи, написанные на основе докладов 1–4, публикуются ниже.

PACS numbers: 74.20.Mn, **74.25.-q**, 74.70.Xa

DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408g.0875

Антиферромагнетизм в железосодержащих сверхпроводниках: магнитный порядок в модели с коллективизированными электронами

И.М. Ерёмин

Объяснение взаимодействия между магнетизмом и сверхпроводимостью в сверхпроводниках на основе

И.М. Ерёмин. Institut für Theoretische Physik III, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, Germany;
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, РФ
E-mail: Ilya.Eremin@rub.de

железа (называемых часто ферропниктидами), обнаруженной Хидео Хосоно с сотрудниками [1] в 2008 г., требует анализа основных магнитоупорядоченных состояний в родительских несверхпроводящих соединениях и их эволюции с изменением числа носителей заряда (уровня допирования). В частности, в данный момент горячо обсуждается происхождение магнетизма в исходных соединениях железосодержащих сверхпроводников, так как считается, что магнитные взаимодействия, ответственные за магнитное упорядочение, ответственны также и за куперовское спаривание [2].

Фазовая диаграмма ферропниктидов (ФП) похожа на фазовую диаграмму в высокотемпературных сверхпроводящих купратах, поскольку в фазовой диаграмме ФП антиферромагнитная (АФМ) фаза соседствует со сверхпроводящей фазой. При низких концентрациях носителей большинство ферропниктидов являются антиферромагнетиками и подавление АФМ-состояния с увеличением уровня допирования, давления или степени беспорядка приводит к появлению сверхпроводимости. Это сходно с фазовой диаграммой купратов, что часто используется как доказательство взаимосвязи между магнетизмом и сверхпроводимостью в материалах на основе железа.

Однако есть два важных различия между ферропниктидами и купратами. Во-первых, исходные соединения ФП являются АФМ-металлами, и, во-вторых, симметрия сверхпроводящего куперовского спаривания в большинстве ФП является, скорее всего, расширенной симметрией S-типа, с нулями или без нулей на ферми-поверхности [2]. Электронная структура ФП в парамагнитном состоянии была измерена в экспериментах с использованием фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy — ARPES) [3–9] и посредством измерения осцилляций де Гааза–ван Альфена [10–12]. Экспериментальные результаты во многом согласуются с результатами расчётов зонной структуры [13, 14]. В частности, ферми-поверхность ферропниктидов является квазидвумерной и в плоскости состоит из двух почти круглых дырочных пакетов неодинакового размера, центрированных около Г-точки (0,0) зоны Бриллюэна, и двух эллиптических электронных пакетов, центрированных вокруг точек (0, π) и (π , 0) зоны Бриллюэна в элементарной ячейке, включающей в себя один атом Fe. Вследствие тетрагональной симметрии два электронных кармана переходят друг в друга при повороте на 90°. В зоне Бриллюэна, которая используется в экспериментах,

имеется два атома Fe на ячейку из-за неэквивалентных позиций атома As и, соответственно, оба электронных кармана центрированы около точки (π, π) . Поведение электронных дисперсий вблизи электронных карманов очень похоже на таковое вблизи дырочных карманов, за исключением общей смены знака, что называется свойством нестинга (т.е. электронную и дырочную зоны можно вложить друг в друга при сдвиге на волновой вектор (π, π)). Это свойство дисперсии характерно для большинства ферропниктидов, хотя и не для всех (мы отдельно остановимся на этом позднее).

В данном докладе мы проанализируем теоретически механизм возникновения магнитного порядка в родительских ФП [15, 16]. Измерения неупругого нейтронного рассеяния в родительских ФП показали, что АФМ-порядок здесь чаще всего возникает на волновых векторах $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$, т.е. магнитный порядок определяется ферромагнитными цепочками, направленными вдоль одной из кристаллографических осей, и антиферромагнитными цепочками, ориентированными в другом направлении. Такой магнитный порядок возникает в принципе в J_1 – J_2 -модели локализованных спинов с обменными взаимодействиями J_1 и J_2 соответственно между ближайшими и следующими за ближайшими соседями при $J_2 > 0,5J_1$ [17–21].

Однако здесь мы обсуждаем альтернативный сценарий, в котором учитывается, что ферропниктиды остаются металлами в магнитном состоянии, и используем модель, в которой АФМ-порядок описывается в терминах волны спиновой плотности (ВСП) (Spin Density Wave — SDW) для коллективизированных электронов проводимости.

Действительно, измерения оптической проводимости показывают передачу спектрального веса от пика Друде к середине инфракрасного пика в соответствии с моделью коллективизированных электронов, приводящих к АФМ-порядку [22]. Как известно, механизм нестинга приводит к несоразмерному АФМ-порядку в Cr [23, 24]. Учитывая электронную структуру ферропниктидов, естественно предположить, что АФМ-порядок устанавливается, по крайней мере частично, за счёт нестинга между энергетической дисперсией дырок и электронов. Это подтверждается результатами зонных расчётов и анализа полной энергии в АФМ-состоянии, из которых следует, что выигрыш в полной энергии по отношению к полной энергии парамагнитного состояния обусловлен областями зоны Бриллюэна, в которых находятся электронные и дырочные карманы [25]. Более того, в экспериментах с использованием ARPES наблюдается непосредственная связь между нестингом и возникновением АФМ-порядка [26]. Более того, несоразмерный волновой вектор упорядочения наблюдается нейтронографически при изменении числа носителей, что также согласуется с моделью коллективизированных электронов [27]. Данный механизм исследовался для ферропниктидов уже в течение нескольких лет, и мы коротко остановимся на его описании [15, 28–33].

Магнитное упорядочение и эффекты магнитной фрустрации. Как отмечено выше, магнитный порядок в ФП первоначально был обнаружен с помощью нейтронного рассеяния [34] и экспериментов по рассеянию мюонов (μ SR — muon spin relaxation) [35]. Температура Нееля магнитного перехода порядка $T_N = 150$ К. В реальном пространстве магнитное упорядочение выражается в

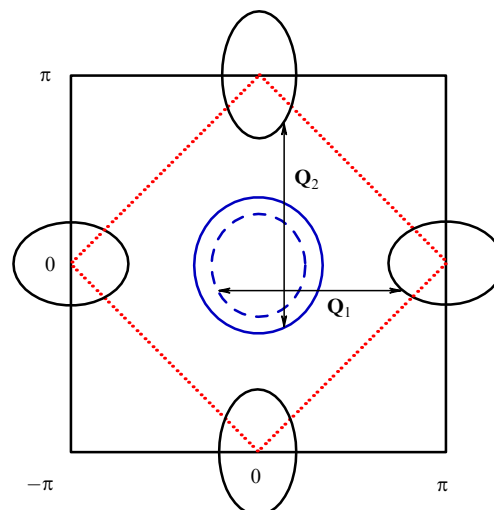


Рис. 1. Схематическая поверхность Ферми ферропниктидов на основе элементарной ячейки с одним атомом Fe и дырочными ферми-пакетами, расположенными около Γ -точки зоны Бриллюэна, а также с двумя эллиптическими электронными пакетами, расположенными около точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$ зоны Бриллюэна. Волновые векторы \mathbf{Q}_1 и \mathbf{Q}_2 обозначают два возможных вектора упорядочения волн спиновой плотности.

наличии ферромагнитных цепочек вдоль одного кристаллографического направления в квадратной решётке на основе атомов Fe, которые соединены антиферромагнитно. Такое упорядочение в импульсном пространстве характеризуется волновым вектором $\mathbf{Q}_1 = (\pi, 0)$ или $\mathbf{Q}_2 = (0, \pi)$. В локализованном сценарии этот порядок возникает в контексте модели J_1 – J_2 локализованных электронов [17] при $J_2 > 0,5J_1$ с учётом квантовых флуктуаций.

Рассмотрим, как этот порядок появляется в зонной картине. Поверхность Ферми для ферропниктидов в нормальном состоянии показана на рис. 1. Для ферми-поверхности с такой топологией наблюдается два эквивалентных волновых вектора неустойчивости: $\mathbf{Q}_1 = (\pi, 0)$ и $\mathbf{Q}_2 = (0, \pi)$ — по отношению к образованию волн спиновой плотности, которые возникают из-за нестинга электронных и дырочных ферми-поверхностей. Для идеализированной ситуации нулевой эллиптичности электронных карманов и одинаковой эффективной массы электронов и дырок ситуация похожа на таковую в однозонной модели Хаббарда на квадратной решётке с наполовину заполненной зоной проводимости. В частности, в данном случае электрон-дырочная восприимчивость расходится логарифмически, как это происходит в частично-частичном канале куперовского спаривания. Ренормгрупповой анализ показывает, что в данном случае основная неустойчивость будет в магнитном канале [28, 29]. Однако из-за наличия двух волновых векторов, \mathbf{Q}_1 и \mathbf{Q}_2 , остаётся открытым вопрос о том, каким образом выбирается только один из двух векторов упорядочения, наблюдаемых экспериментально.

Для формулировки проблемы начнём описание с общей спиновой конфигурации, определяемой двумя магнитными параметрами порядка Δ_i в приближении среднего поля для каждого волнового вектора \mathbf{Q}_i ,

$$S(\mathbf{R}) = \Delta_1 \exp(i\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}) + \Delta_2 \exp(i\mathbf{Q}_2 \mathbf{R}). \quad (1)$$

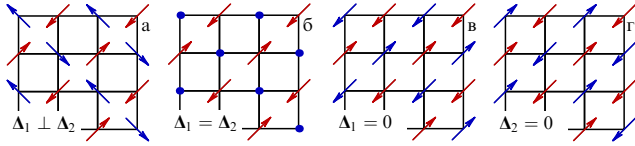


Рис. 2. Возможные конфигурации магнитного упорядочения в ферропниктидах [16].

Для такой конфигурации решётка железа разделяется на две взаимопроникающие антиферромагнитно упорядоченные подрешётки с намагниченностями $\Delta_1 + \Delta_2$ и $\Delta_1 - \Delta_2$. Однако в данном случае ни угол между двумя векторами Нееля, ни их относительная величина не фиксированы. На рисунке 2 показаны четыре магнитных конфигурации из множества возможных, причём конфигурации, представленные на рис. 2в,г, соответствуют экспериментальной ситуации, в которой один из параметров порядка Δ_i исчезает.

Рассмотрим модель взаимодействующих фермионов с круговыми ферми-контурами, центрированными в Γ -точке зоны Бриллюэна (зона α) и двумя эллиптическими пакетами вокруг точек $(\pm\pi, 0)$ и $(0, \pm\pi)$ (зона β) (см. рис. 1):

$$H_2 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \left[\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1} \alpha_{\mathbf{p}\sigma}^+ \alpha_{\mathbf{p}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1} \beta_{\mathbf{p}\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2} \beta_{\mathbf{p}\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}\sigma} \right]. \quad (2)$$

Здесь $\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1}$, $\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1}$ и $\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2}$ — энергии квазичастиц в дырочной и электронных зонах соответственно,

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1} = -\frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m_1} + \mu, \quad \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1} = \frac{\hbar^2 p_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 p_y^2}{2m_y} - \mu,$$

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2} = \frac{\hbar^2 p_x^2}{2m_y} + \frac{\hbar^2 p_y^2}{2m_x} - \mu,$$

квазиимпульсы α -фермионов отсчитываются от точки $(0, 0)$, а β_1 - и β_2 -фермионов — от точек $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$ соответственно, μ — химический потенциал. В общем случае гамильтониан взаимодействия включает в себя взаимодействие типа плотность–плотность, процессы рассеяния с волновыми векторами $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ и (π, π) , а также процессы перескока пар квазичастиц.

Рассмотрим вначале взаимодействие типа плотность–плотность между α - и β -фермионами и процессы перескока пар квазичастиц:

$$H_4 = U_1 \sum \alpha_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{\mathbf{p}_2\sigma'} \alpha_{\mathbf{p}_1\sigma} +$$

$$+ \frac{U_3}{2} \sum \left(\beta_{\mathbf{p}_3\sigma'}^+ \beta_{\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \alpha_{\mathbf{p}_2\sigma'} \alpha_{\mathbf{p}_1\sigma} + \text{h.c.} \right). \quad (3)$$

Здесь зависимостью параметров взаимодействия от волнового вектора пренебрегается; α , (α^+) , β , (β^+) — операторы уничтожения (рождения) для дырочных и электронных ферми-поверхностей; суммирование предполагается по всем импульсам $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)$ и спинам (σ, σ') ; h.c. — эрмитово сопряжённое слагаемое. Поскольку имеются две β -зоны, естественно ввести в рассмотрение два параметра порядка ВСП: $\Delta_1 \propto \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{\mathbf{p}\delta}^+ \sigma_{\delta\gamma} \beta_{\mathbf{p}\gamma} \rangle$ (где $\sigma_{\delta\gamma}$ — элементы матриц Паули) с волновым вектором $\mathbf{Q}_1 = (\pi, 0)$ и $\Delta_2 \propto \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{\mathbf{p}\delta}^+ \sigma_{\delta\gamma} \beta_{\mathbf{p}\gamma} \rangle$ с вектором $\mathbf{Q}_2 = (0, \pi)$. Без потери общности мы можем считать, что вектор Δ_1 направлен вдоль оси z , а Δ_2 лежит в плоскости xz . Для дальнейшего удобнее переопреде-

лить эти параметры как

$$\Delta_1^z = -U_{\text{SDW}} \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \beta_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle, \quad (4)$$

$$\Delta_1^{z(x)} = -U_{\text{SDW}} \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{\mathbf{p}\uparrow}^+ \beta_{\mathbf{p}\uparrow(1)} \rangle,$$

где $U_{\text{SDW}} = U_1 + U_2$. Предположим вначале, что электронные пакеты имеют форму кругов, т.е. $m_x = m_y = m$ и $\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1} = \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2} = \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta}$. В этом случае гамильтониан (3) диагонализуются тремя последовательными боголюбовскими преобразованиями и самосогласованное уравнение для параметра порядка сводится к следующему:

$$1 = \frac{U_{\text{SDW}}}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}})^2 + \Delta^2}}. \quad (5)$$

Из наших расчётов следуют два важных вывода. Во-первых, самосогласованное уравнение определяет комбинацию параметров порядка $\Delta_1^2 + \Delta_2^2$, но каждый из них отдельно из этого уравнения не может быть найден. Это означает, что на данном уровне расчёта пара векторных параметров порядка, Δ_1 и Δ_2 , может рассматриваться как шестикомпонентный обобщённый вектор. Состояние волн спиновой плотности здесь характеризуется спонтанным нарушением $O(6)$ -симметрии, и это упорядоченное состояние имеет пять голдстоуновских мод. Вырожденное основное состояние соответствует двухподрешёточным состояниям с антиферромагнитным упорядочением вдоль диагоналей $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$, для которых $\Delta_1 = 0$ или $\Delta_2 = 0$, а также многим другим вариантам — часть из них показана на рис. 2.

Кроме того, следует отметить, что обнаруженное вырождение больше, чем в $J_1 - J_2$ -модели локализованных спинов. В нашем случае не только угол между двумя подрешётками может быть произвольным, но и величины упорядоченных моментов на подрешётках могут быть различными.

В заключение отметим, что интегрирование по импульсам в уравнении (5) не ограничивается областью поверхности Ферми. Конечный параметр порядка ВСП получается и тогда, когда поверхность Ферми исчезает. Это происходит в результате того, что электронно-дырочная петля, образованная α - и β -фермионами, подобна петле частица–частица, так как имеется различие в знаке фермионных дисперсий α - и β -зон. Как следствие, образование ВСП не связано с малыми размерами дырочных и электронных пакетов. Иными словами, ВСП в данном случае возникает благодаря нестингу между α - и β -зонами, но не нестингу в отдельных ферми-поверхностях.

Включим теперь взаимодействие между двумя электронными пакетами, поскольку оно не является малым и должно быть учтено в теоретическом рассмотрении, и выясним, может ли это снять вырождение. Можно выделить четыре типа взаимодействия:

$$H_4^{\text{ex}} = U_6 \sum \beta_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{\mathbf{p}_2\sigma'} \beta_{\mathbf{p}_1\sigma} +$$

$$+ U_7 \sum \beta_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{\mathbf{p}_2\sigma'} \beta_{\mathbf{p}_1\sigma} +$$

$$+ \frac{U_8}{2} \sum \left(\beta_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{\mathbf{p}_2\sigma'} \beta_{\mathbf{p}_1\sigma} + \text{h.c.} \right) +$$

$$+ \frac{U_4}{2} \sum \left(\beta_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{\mathbf{p}_2\sigma'} \beta_{\mathbf{p}_1\sigma} + \beta_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{\mathbf{p}_2\sigma'} \beta_{\mathbf{p}_1\sigma} \right) \quad (6)$$

(мы используем терминологию, принятую в работе [16]). Все U_i считаются положительными. Проводя последовательные боголюбовские преобразования и усреднение, получаем следующие поправки к энергии основного состояния:

$$E_{\text{gr}}^{\text{ex}} = 2A^2(U_6 + U_8 - U_7 - U_4) \frac{|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2}{\Delta^4} + 4A^2 U_7 \frac{(\Delta_1 \Delta_2)^2}{\Delta^4}. \quad (7)$$

Видно, что $E_{\text{gr}}^{\text{ex}}$ теперь зависит от величин и относительных направлений Δ_1 и Δ_2 . Когда все взаимодействия имеют одинаковую силу, первое слагаемое в правой части (7) обращается в нуль, а второе имеет минимум при $\Delta_1 \perp \Delta_2$. Симметрия $O(6)$ понижается, но только до $O(3) \times O(2)$, т.е. величины параметров порядка на каждом узле одинаковы, так как $(\Delta_1 + \Delta_2)^2 = (\Delta_1 - \Delta_2)^2$, но угол между $\Delta_1 + \Delta_2$ и $\Delta_1 - \Delta_2$ всё ещё произволен. Это точно такая же ситуация, как и в классической $J_1 - J_2$ -модели. Однако если $(U_6 + U_8 - U_7 - U_4) \neq 0$, то симметрия понижается до $O(3)$ уже в приближении среднего поля. Так как U_4 редуцируется и даже меняет знак в процессе ренормгрупповых преобразований [14], а другие U при этом не изменяются, наиболее вероятной является ситуация $U_6 + U_8 - U_7 - U_4 > 0$, и, следовательно, минимальным энергиям соответствуют случаи $\Delta_1 = 0$ или $\Delta_2 = 0$, что в свою очередь соответствует ВСП с волновым вектором $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$. Это как раз та ситуация, которая наблюдается в экспериментах. Если $U_6 + U_8 - U_7 - U_4 < 0$, то минимум $E_{\text{gr}}^{\text{ex}}$ реализуется при $|\Delta_1| = |\Delta_2|$ и параметры порядка подрешёток будут ортогональны друг другу. Спиновое упорядочение в этом случае изображено на рис. 2в. Спиновая конфигурация такого типа была найдена ранее при анализе упорядочения в двухорбитальной модели.

Обсудим далее, что произойдёт, если мы учтём тот факт, что электронные пакеты являются не круговыми, а эллиптическими, т.е. эффективные массы m_x и m_y не равны между собой и $\varepsilon_k^{\beta_1} \neq \varepsilon_k^{\beta_2}$. Для сохранения возможности аналитического рассмотрения будем считать, что отклонения от круговой формы малы, и введём $m_x = (1 + \delta)m$ и $m_y = (1 - \delta)m$, где $\delta \ll 1$. Выполнив последовательные боголюбовские преобразования, найдём

$$E_{\text{gr}}^{\text{ellipt}} = C |\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2, \quad C = \delta^2 \frac{m\mu^2}{4\pi\Delta^4}. \quad (8)$$

Из (8) видно, что учёт эллиптичности электронных пакетов снимает вырождение в пользу ВСП с волновым вектором $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$. Именно эта ситуация, как отмечалось, соответствует экспериментальным данным. Итак, эллиптичность приводит к эффективному взаимодействию между параметрами порядка ВСП, которое при $\Delta \ll \mu$ способствует тому же основному состоянию, которое возникает при учёте взаимодействия между двумя электронными пакетами.

Рассмотрим для сравнения ту же самую модель коллективизированных электронов, однако теперь взаимодействие между электронами проводимости будем считать таким же, как и в $J_1 - J_2$ -модели. Тогда гамильтониан модели примет вид

$$H^{J_1 - J_2} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{S}(\mathbf{p}) \mathbf{S}(-\mathbf{p}) \times \\ \times [J_1 (\cos p_x + \cos p_y) + J_2 \cos p_x \cos p_y], \quad (9)$$

где $S(\mathbf{p}) = (1/2) \sum_{\alpha} a_{\mathbf{p}, \alpha}^+ \sigma_{\alpha\beta} a_{\mathbf{p}+\mathbf{p}, \beta}$, a^+ , a — фермионные операторы, которые являются дырочными, когда \mathbf{p} находится в окрестности точки $(0, 0)$, и электронными, если \mathbf{p} находится вблизи точки $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$. Член, описывающий кинетическую энергию, тот же самый, что и в (2). Во избежание недоразумений отметим, что рассматриваемая здесь модель отличается от модели локализованных спинов даже в том случае, когда параметры J_1 и J_2 много больше энергии Ферми. В частности, в рассматриваемой модели нет требования об отсутствии двукратного заполнения состояний на одном узле, как это предполагается в $t - J$ -модели для купратов. Вариант $J_1 - J_2$ -модели для локализованных моментов будет рассмотрен ниже.

Оператор энергии (9) можно сопоставить с оператором потенциальной энергии в (3), рассматривая значения импульса \mathbf{p} в области точек $(0, 0)$, $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$. Записывая операторы спина в представлении вторичного квантования, находим, что $U_3 = 3J_2$ и $U_1 = J_2 - J_1$. Таким образом, в данной модели $U_{\text{SDW}} = U_1 + U_3 = J_{\text{SDW}} = 4J_2 - J_1$. Как и в (3), логично ввести векторные параметры порядка с компонентами $\Delta_1^z = -J_{\text{SDW}} \sum \langle \alpha_{\mathbf{p}1}^+ \beta_{\mathbf{p}1} \rangle$ и $\Delta_2^{z(x)} = -J_{\text{SDW}} \sum \langle \alpha_{\mathbf{p}1}^+ \beta_{2\mathbf{p}1(1)} \rangle$. Расчёт, выполненный в приближении среднего поля аналогично описанному выше, приводит к уравнению для параметра порядка $\Delta^2 = |\Delta_1|^2 + |\Delta_2|^2$:

$$1 = \frac{J_{\text{SDW}}}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}})^2 + \Delta^2}}. \quad (10)$$

Решение для $\Delta^2 = |\Delta_1|^2 + |\Delta_2|^2$ существует при $J_2 > J_1/4$. При больших J_2 реализуется антиферромагнитное упорядочение вдоль диагоналей. Условие $J_2 > J_1/4$ полезно сопоставить с соответствующим неравенством для $J_1 - J_2$ -модели локализованных спинов (тогда видно, что эти модели действительно различаются). Вырождение между различными ВСП-состояниями с одинаковым значением $\Delta^2 = |\Delta_1|^2 + |\Delta_2|^2$ снимается, если мы включим в рассмотрение взаимодействие между электронными пакетами. Такое взаимодействие описывается фурье-образами J_1 и J_2 при импульсах $\mathbf{p} = (0, 0)$ и $\mathbf{p} = (\pi, \pi)$. Легко проверить, что член с $\mathbf{p} = (\pi, \pi)$ перемешивает электронные состояния и это эквивалентно подключению взаимодействий U_6 , U_7 и U_8 , в то время как наличие члена с $\mathbf{p} = (0, 0)$ аналогично включению U_6 и U_4 .

Записывая $\mathbf{S}(\mathbf{p})\mathbf{S}(-\mathbf{p})$ в представлении вторичного квантования, мы получаем оператор, квадратичный по β_1 - и β_2 -фермионам, в той же самой форме с коэффициентами

$$U_6^s = J_1 - 3J_2, \quad U_7^s = -J_1 - 3J_2, \\ U_8^s = 3(J_1 - J_2), \quad U_4^s = -3(J_1 + J_2). \quad (11)$$

Подставляя эти коэффициенты в выражение для полной энергии, получаем

$$E_{\text{gr}}^{J_1 - J_2} = 2A^2 \left[4J_1 \frac{|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2}{\Delta^4} - (J_1 + 3J_2) \frac{(\Delta_1 \Delta_2)^2}{\Delta^4} \right], \quad (12)$$

где $A > 0$. Видно, что теперь множитель перед $(\Delta_1 \Delta_2)^2$ отрицателен, т.е. энергия уменьшается, когда векторы Δ_1 и Δ_2 параллельны. В этом случае $|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2 = (\Delta_1 \Delta_2)^2$ и из

(12) мы получаем

$$E_{\text{gr}}^{J_1-J_2} = -2A^2(J_2 - J_1) \frac{|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2}{A^4}. \quad (13)$$

Видно, что состояния с $\Delta_1 = 0$ или $\Delta_2 = 0$, которые соответствуют волновым векторам ВСП с $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$, стабилизируются только при $J_1/4 < J_2 < J_1$. Для больших J_2 энергия минимальна при $\Delta_1 = \pm \Delta_2$. Соответствующее ВСП-состояние имеет АФМ порядок в одной подрешётке, но вторая подрешётка неупорядоченна (рис. 2г). Такое состояние можно рассматривать в качестве примера магнитного упорядочения при обобщении теории Ландау для случая двухкомпонентного параметра порядка. Интересно также отметить, что когда параметр J_2 доминирует, спин-спиновое взаимодействие между двумя электронными зонами стабилизирует иную ВСП, отличную от той, которая обусловлена взаимодействием в зарядовом канале.

Выше мы нашли, что магнитный полосовой (страйповый) порядок $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$ стабилизируется в трёхзонной модели (одна дырочная и две электронных зоны) обычным взаимодействием зарядов. Ниже мы включим в рассмотрение второй дырочный пакет и выясним, как это может повлиять на стабилизацию ВСП в ферропниктидах. Второй дырочный ферми-контур слабее связан с электронными контурами, чем тот, который уже был учтён в трёхзонной модели. Это связано с двумя причинами: различие в силе взаимодействия и в степени перемешивания с электронными ферми-контурами. Ниже мы обсудим оба этих фактора.

Вначале рассмотрим модель из двух круговых электронных и дырочных ферми-поверхностей. Предположим, что их размеры одинаковы, но существует взаимодействие двух типов между дырочными и электронными зонами: $U_{\text{SDW}}^{(1)}$ для одной дырочной зоны и $U_{\text{SDW}}^{(2)}$ для другой. Имеются четыре параметра порядка: Δ_{11} , Δ_{12} , Δ_{21} и Δ_{22} . Параметры Δ_{11} и Δ_{21} соответствуют ВСП с волновым вектором \mathbf{Q}_1 , а два других — ВСП с вектором \mathbf{Q}_2 . Без потери общности можно считать, что Δ_{11} направлен вдоль оси z , а Δ_{12} лежит в плоскости xz , но направления Δ_{21} и Δ_{22} могут быть произвольными. Для упрощения обсуждения предположим, что ВСП-конфигурации копланарны. Пусть Δ_{11} и Δ_{21} направлены вдоль оси z , а Δ_{12} и Δ_{22} — вдоль оси x . При таких предположениях мы, по аналогии, имеем

$$\begin{aligned} \Delta_{11} &= \Delta_1^z = -U_{\text{SDW}}^{(1)} \sum \langle \alpha_{1\mathbf{p}\uparrow}^+ \beta_{1\mathbf{p}\uparrow} \rangle, \\ \Delta_{12} &= \Delta_1^x = -U_{\text{SDW}}^{(1)} \sum \langle \alpha_{1\mathbf{p}\uparrow}^+ \beta_{2\mathbf{p}\uparrow} \rangle, \\ \Delta_{21} &= \Delta_2^z = -U_{\text{SDW}}^{(2)} \sum \langle \alpha_{2\mathbf{p}\uparrow}^+ \beta_{1\mathbf{p}\uparrow} \rangle, \\ \Delta_{22} &= \Delta_2^x = -U_{\text{SDW}}^{(2)} \sum \langle \alpha_{2\mathbf{p}\uparrow}^+ \beta_{2\mathbf{p}\uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Как и ранее, начнём обсуждение с включения взаимодействия одной дырочной зоны с электронными состояниями (U_1 и U_3). Производя частичное усреднение в четырёхфермионных слагаемых с выделением параметров порядка, мы приходим к гамильтониану квадратичного вида: $H_{\text{eff}}^{(2)} = H^{\text{kin}} + H_{\alpha_1\beta}^{(2)} + H_{\alpha_2\beta}^{(2)}$, где

$$H^{\text{kin}} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma, i=1,2} \varepsilon_{\mathbf{p}} [\alpha_{i\mathbf{p}\sigma}^+ \alpha_{i\mathbf{p}\sigma} - \beta_{i\mathbf{p}\sigma}^+ \beta_{i\mathbf{p}\sigma}], \quad (15)$$

$$\begin{aligned} H_{\alpha_1\beta}^{(2)} &= - \sum_{\mathbf{p}} \left[\alpha_{1\mathbf{p}\uparrow}^+ (\Delta_1^z \beta_{1\mathbf{p}\uparrow} + \Delta_1^x \beta_{2\mathbf{p}\uparrow}) - \right. \\ &\quad \left. - \alpha_{1\mathbf{p}\downarrow}^+ (\Delta_1^z \beta_{1\mathbf{p}\downarrow} - \Delta_1^x \beta_{2\mathbf{p}\downarrow}) \right] + \text{h.c.}, \\ H_{\alpha_2\beta}^{(2)} &= - \sum_{\mathbf{p}} \left[\alpha_{2\mathbf{p}\uparrow}^+ (\Delta_2^z \beta_{1\mathbf{p}\uparrow} + \Delta_2^x \beta_{2\mathbf{p}\uparrow}) - \right. \\ &\quad \left. - \alpha_{2\mathbf{p}\downarrow}^+ (\Delta_2^z \beta_{1\mathbf{p}\downarrow} - \Delta_2^x \beta_{2\mathbf{p}\downarrow}) \right] + \text{h.c.}, \end{aligned} \quad (16)$$

Часть, включающая α_1 -дырки и параметры Δ_1^z и Δ_1^x , может быть диагонализирована так же, как и в случае трёхзонной модели, т.е. посредством введения новых операторов. Самосогласованное уравнение для щели Δ_1 ($\Delta_1 = [(\Delta_1^z)^2 + (\Delta_1^x)^2]^{1/2}$) имеет вид

$$1 = \frac{U_{\text{SDW}}^{(1)}}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}})^2 + \Delta_1^2}}, \quad (17)$$

а уравнение для щели Δ_2 ($\Delta_2 = [(\Delta_2^z)^2 + (\Delta_2^x)^2]^{1/2}$) выражается как

$$1 = \frac{U_{\text{SDW}}^{(2)}}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}})^2 + \Delta_2^2}}. \quad (18)$$

Ясно, что оба уравнения, (17) и (18), ненулевыми решениями Δ_1 и Δ_2 способствуют понижению энергии, если, конечно, такие решения существуют. Это означает, что энергия ещё больше уменьшается, если в дополнение к формированию состояний с $\Delta_1^z = \Delta_1 \cos \theta$ и $\Delta_1^x = \Delta_1 \sin \theta$ образуется состояние с $\Delta_2^z = -\Delta_2 \sin \theta$ и $\Delta_2^x = \Delta_2 \cos \theta$. Более того, для равных круговых ферми-контуров решения для Δ_1 и Δ_2 существуют для любых $U_{\text{SDW}}^{(1)}$ и $U_{\text{SDW}}^{(2)}$. Получающиеся фермионные возбуждения оказываются с энергетическими щелями.

Таким образом, мы приходим к выводу, что в четырёхзонной модели с одинаковыми размерами дырочных и электронных пакетов состояние ВСП является диэлектрическим.

Вясним теперь, совместимо ли это заключение с наблюдением ВСП с волновыми векторами $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$. Так как угол θ не входит в явном виде в квадратичные формы, основное состояние снова оказывается вырожденным. Вырожденный ВСП-мультиплет может быть описан следующим выражением:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{R}) &\propto n_z (\Delta_1 \cos \theta - \Delta_2 \sin \theta) \exp(i\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}) + \\ &\quad + n_x (\Delta_1 \sin \theta + \Delta_2 \cos \theta) \exp(i\mathbf{Q}_2 \mathbf{R}). \end{aligned} \quad (19)$$

Это вырожденное множество не содержит $(0, \pi)$ - и $(\pi, 0)$ -состояний только с одним вектором ВСП (либо \mathbf{Q}_1 или \mathbf{Q}_2). Эти состояния получаются, если положить $\tan \theta = \Delta_1/\Delta_2$ или $\tan \theta = -\Delta_2/\Delta_1$. Возникает вопрос: будут ли такие состояния стабилизироваться другими взаимодействиями, как это было для $(0, \pi)$ - и $(\pi, 0)$ -состояний в трёхзонной модели? По нашим представлениям, нет, не будут. Аргумент таков: состояния $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$ в четырёхзонной модели получаются при таком выборе θ , при котором Δ_1 и Δ_2 имеют компоненты с обоими волновыми векторами, \mathbf{Q}_1 и \mathbf{Q}_2 . Компонента полного спина с \mathbf{Q}_1 или \mathbf{Q}_2 обращается в нуль при компенсации компонент Δ_1 и Δ_2 . В самом деле, при

$U_{\text{SDW}}^{(2)} \ll U_{\text{SDW}}^{(1)}$ угол θ близок к нулю или к $\pi/2$, но не равен ни одному из этих значений. Напомним, что ранее, рассматривая снятие вырождения в трёхзонной модели, мы нашли, что взаимодействие между β_1 - и β_2 -электронами совместно с эффектом эллиптичности приводят к энергии вида $E_{\text{gr}}(\theta) = E_0 + E_1 \sin^2(2\theta)$. Минимум реализовался при значениях θ , равных нулю или $\pi/2$. Для того чтобы проверить, что произойдёт в четырёхзонной модели, мы распространили наш анализ на случай конечных $U_{\text{SDW}}^{(2)}$ и проанализировали поведение минимума $E_{\text{gr}}(\theta)$, добавляя малый параметр $U_{\text{SDW}}^{(2)}/U_{\text{SDW}}^{(1)}$ как возмущение. Детали расчёта мы здесь опускаем, поскольку они аналогичны тем, которые пояснялись для трёхзонной модели. Мы нашли, что минимум $E_{\text{gr}}(\theta)$ не смещается от $\theta = 0$ и $\theta = \pi/2$.

Итак, в четырёхзонной модели взаимодействия, снимающие вырождение состояний ВСП, не приводят к стабилизации $(0, \pi)$ -состояний или $(\pi, 0)$ -состояний. Например, когда $\theta = 0$,

$$S(\mathbf{R}) \propto n_z \Delta_1 \exp(i\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}) + n_x \Delta_2 \exp(i\mathbf{Q}_2 \mathbf{R}).$$

Такое ВСП-состояние соответствует двухподрешёточной структуре с двумя равными параметрами порядка, но с неколлинеарными спинами.

Итог этого анализа: $(0, \pi)$ -состояния или $(\pi, 0)$ -состояния получаются, только если Δ_2 строго равно нулю, т.е. вторая дырочная зона не имеет отношения к образованию ВСП. Только в этом случае взаимодействия и эффект эллиптичности снимают вырождение в пользу $(0, \pi)$ -состояний или $(\pi, 0)$ -состояний. В других случаях параметр порядка с необходимостью имеет обе, \mathbf{Q}_1 и \mathbf{Q}_2 , компоненты. ВСП оказывается модулированной как вдоль оси x , так и вдоль оси y . Это заключение имеет прямое отношение к электронной структуре. При $\Delta_2 = 0$ одна дырочная и одна электронная зоны не имеют энергетических щелей, т.е. система остаётся металлической.

Как отмечалось выше, для дырочных и электронных пакетов круговой формы имеется совершенный (идеальный) нестинг, поэтому $\Delta_2 \neq 0$ при любом значении $U_{\text{SDW}}^{(2)}$. Ситуация меняется, когда дырочные ферми-контуры имеют разные размеры и электронные пакеты являются эллиптическими. Повторяя расчёты для этой ситуации, в общем случае мы получаем состояние с четырьмя ВСП, которое описывается гамильтонианом

$$H_{\text{SDW}} = \sum_{a,b} \sum_{\mathbf{p}} E_{1,2\mathbf{p}} (e_{a,b\mathbf{p}}^+ e_{a,b\mathbf{p}} + p_{a,b\mathbf{p}}^+ p_{a,b\mathbf{p}}) + \sum_{a,b} \sum_{\mathbf{p}} E_{3,4\mathbf{p}} (e_{a,b\mathbf{p}}^+ e_{a,b\mathbf{p}} + p_{a,b\mathbf{p}}^+ p_{a,b\mathbf{p}}). \quad (20)$$

Здесь e^+ и e — операторы рождения и уничтожения новых квазичастиц, которые возникают после диагонализации квадратичной формы гамильтониана с параметрами порядка ВСП,

$$E_{1,2\mathbf{p}} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1} + \bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1} + \bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}})^2 + 4|\Delta_1|^2},$$

$$E_{3,4\mathbf{p}} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_2} + \bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_2} + \bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}})^2 + 4|\Delta_2|^2},$$

где $\bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1} \cos^2 \theta + \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2} \sin^2 \theta$, $\bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2} \cos^2 \theta + \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1} \sin^2 \theta$. Самосогласованные уравнения для двух щелей таковы:

$$1 = U_{\text{SDW}}^{(1)} \sum_{\mathbf{p}} \frac{n(E_{1\mathbf{p}}) - n(E_{2\mathbf{p}})}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1} - \bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}})^2 + 4|\Delta_1|^2}}, \quad (21)$$

$$1 = U_{\text{SDW}}^{(2)} \sum_{\mathbf{p}} \frac{n(E_{3\mathbf{p}}) - n(E_{4\mathbf{p}})}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_2} - \bar{\varepsilon}_{\mathbf{p}})^2 + 4|\Delta_2|^2}}. \quad (22)$$

Анализируя эти уравнения, мы находим, что при несовершенном нестинге возникновение магнетизма с ВСП является пороговым явлением, т.е. для получения ненулевых Δ_1 и Δ_2 взаимодействия U_{SDW} должны превышать определённую величину. Мы нашли, что дырочная зона с большей массой носителей, т.е. с большим ферми-контуром, должна быть сильнее связана с электронными зонами. Эта зона выступает в качестве α_1 -зоны в нашем рассмотрении. Когда $U_{\text{SDW}}^{(1)}$ превышает пороговое значение $U_{\text{cr}}^{(1)}$, в системе возникает ВСП с $\Delta_1 \neq 0$. Это полосовое упорядочение с волновым вектором $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$. Для дырочной зоны (α_2 -зона в нашей терминологии) ВСП с $\Delta_2 \neq 0$ возникает, когда $U_{\text{SDW}}^{(2)}$ превышает критическое значение $U_{\text{cr}}^{(2)} > U_{\text{cr}}^{(1)}$. Если это происходит, то возникает ВСП с \mathbf{Q}_1 - и \mathbf{Q}_2 -компонентами. Эта ситуация иллюстрируется на рис. 3а, б. Согласно с экспериментальными данными режим $U_{\text{SDW}}^{(1)} > U_{\text{cr}}^{(1)}$ и $U_{\text{SDW}}^{(2)} > U_{\text{cr}}^{(2)}$ представляется вполне разумным.

Наш вывод о том, что полосовой порядок связан с $\Delta_1 \neq 0$ и $\Delta_2 = 0$, непосредственно определяется топологическими особенностями, а именно тем, что оба дырочных ферми-контура расположены вокруг точки Г. В самом деле, предположим, что дырочная и электронная зоны перемешиваются, образуя ВСП с вектором

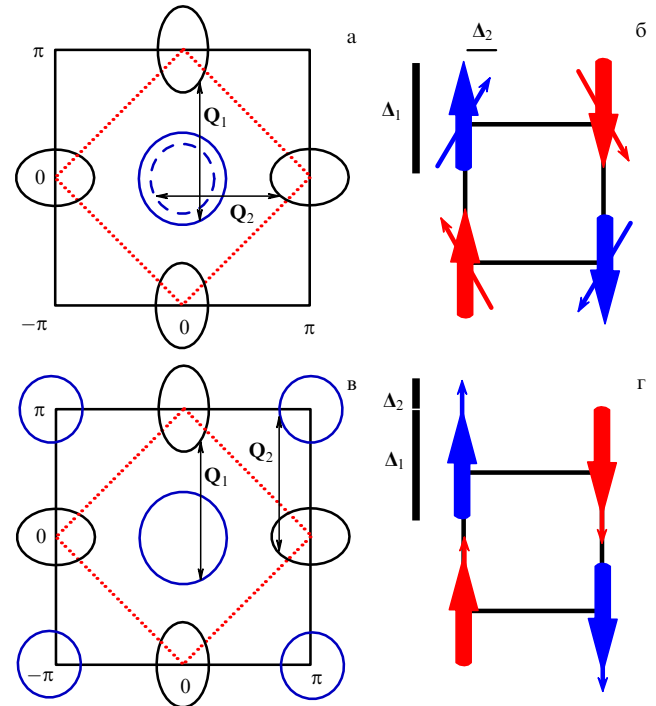


Рис. 3. Ферми-контуры и изменения в магнитной структуре, связанные с возникновением относительно малого Δ_2 (а, б) для пниктидов и (в, г) для $t-t'$ -модели с $t \ll t'$.

$\mathbf{Q}_1 = (0, \pi)$ (рис. 3а). При сильном взаимодействии спектр возбуждений ВСП приобретает энергетическую щель, что блокирует связь с другой электронной зоной. Однако если блокировка оказывается недостаточно сильной, то другая пара зон, соединённая вектором $\mathbf{Q}_1 = (0, \pi)$, может также перемешиваться, приводя к возникновению ВСП, и, следовательно, полосовой порядок $\mathbf{Q}_1 = (0, \pi)$ начнёт нарушаться. Ситуация будет другой, если вторая дырочная зона центрирована не около точки $(0, 0)$, а около точки (π, π) (рис. 3в). В этом случае вторая пара зон соединяется примерно таким же волновым вектором, как и первая. Следовательно, первоначально установившийся полосовой порядок не будет нарушаться (рис. 3г). Рисунок 3в соответствует случаю, реализующемуся в $t-t'-U$ -модели при половинном заполнении зоны. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = t \sum_{i, \delta_1, \sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i+\delta_1\sigma} + t' \sum_{i, \delta_2, \sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i+\delta_2\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (23)$$

где δ_1 и δ_2 — расстояния до ближайших и следующих за ближайшими соседей соответственно, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$. Энергия квазичастиц $\epsilon_{\mathbf{p}} = 2t(\cos p_x + \cos p_y) + 4t' \cos p_x \cos p_y - \mu$ имеет максимумы в точках $(0, 0)$ и (π, π) . При $t \neq 0$ эффективные массы различны. Минимумы энергии и, соответственно, электронные пакеты расположены около точек $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$. Топология ферми-контуров изображена на рис. 3в. При больших значениях U данная модель сводится к гейзенберговской J_1-J_2 -модели. Все квазичастичные возбуждения в этой модели имеют щели. В приближении среднего поля параметры порядка ВСП-состояний вырождены.

Поучительно рассмотреть различие между четырёхзонной моделью и $t-t'-U$ -моделью более подробно. Напомним, что в четырёхзонной модели эффекты эллиптичности электронных пакетов и взаимодействия между ними снимают вырождение уже на уровне приближения среднего поля. Ниже мы покажем, что в $t-t'-U$ -модели в приближении среднего поля снятия вырождения не происходит даже тогда, когда $t \neq 0$ и электронные пакеты являются эллиптическими. В этом случае состояния $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$ остаются вырожденными с неограниченно большим числом подрешёточных состояний. За рамками приближения среднего поля в J_1-J_2 -модели квантовые флуктуации стабилизируют $(0, \pi)$ - или $(\pi, 0)$ -состояния. Для демонстрации того, что в $t-t'-U$ -модели параметр порядка ВСП вырожден в приближении среднего поля, рассмотрим случай малого t и введём два параметра порядка:

$$A_1 = -\frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \sigma_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1, \beta} \rangle$$

с волновым вектором \mathbf{Q}_1 и

$$A_2 = -\frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \sigma_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2, \beta} \rangle$$

с вектором \mathbf{Q}_2 . Далее введём четыре типа фермионных операторов с квазиимпульсами около точек $(0, 0)$, $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$, (π, π) и переформулируем $t-t'-U$ -модель в соответствии с представлением о дырках и электронах. Опуская детали расчёта, который аналогичен описанному выше, приведём результаты. Дополнительное

слагаемое в квадратичной форме гамильтониана получается от взаимодействия дырок и электронов. При $t = 0$ все четыре закона дисперсии оказываются одинаковыми (за исключением знака) и гамильтониан диагонализуются, как и ранее. Энергия основного состояния зависит только от суммы $A_1^2 + A_2^2$, т.е. имеется вырождение.

Рассмотрим теперь эффект взаимодействия между электронными зонами. Есть четыре типа электрон-электронных взаимодействий, аналогичных U_6, U_7, U_8 и U_4 . Все они происходят от одного начального U и имеют одинаковый коэффициент (префактор). Электрон-электронное взаимодействие приводит в энергию основного состояния слагаемое вида $E_{\text{gr}}^{\text{ex}} = 4A^2 U (\Delta_1 \Delta_2)^2 / \Delta^4$. Этот член "упорядочивает" Δ_1 и Δ_2 , делая их перпендикулярными друг другу, что приводит к равенству величин параметров порядка $\Delta_1 + \Delta_2$ и $\Delta_1 - \Delta_2$ в двух подрешётках. Однако в отсутствие члена $|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2$ угол между двумя подрешётками остаётся произвольным.

Рассмотрим далее, к чему может привести эллиптическая форма электронных пакетов. Напомним, что в нашей модели эффекты эллиптичности приводили к поправкам, пропорциональным $|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2$. В $t-t'-U$ -модели ситуация очень похожа. Опять имеются два вклада в энергию основного состояния E_{gr} . Один из них получается во втором порядке теории возмущений при учёте недиагональных членов гамильтониана, а другой связан с изменением закона дисперсии. Вклад от недиагональных членов определяется выражением

$$E_{\text{gr}}^{a, \text{ellipt}} = 8t^2 \frac{|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2}{\Delta^4} \times \sum_{\mathbf{p}} \frac{(\cos^2 p_x + \cos^2 p_y) \Delta^2}{[\Delta^2 + 16(t')^2 \cos^2 p_x \cos^2 p_y]^{3/2}} + \dots, \quad (24)$$

где, как и ранее, под многоточием подразумеваются слагаемые, которые зависят только от Δ . Вклад, обусловленный изменением дисперсии диагональных членов гамильтониана, имеет вид

$$E_{\text{gr}}^{b, \text{ellipt}} = -8t^2 \frac{|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2}{\Delta^4} \times \sum_{\mathbf{p}} \frac{(\cos^2 p_x + \cos^2 p_y) \Delta^2}{[\Delta^2 + 16(t')^2 \cos^2 p_x \cos^2 p_y]^{3/2}} + \dots, \quad (25)$$

Сравнивая (25) и (24), мы видим, что оба вклада взаимно компенсируются. Таким образом, в рамках $t-t'-U$ -модели снятия вырождения параметра порядка ВСП при учёте эллиптичности электронных пакетов не происходит. Этот результат, скорее всего, останется справедливым и при учёте более высоких членов разложения энергии по степеням t/t' .

В данном докладе проведён анализ микроскопических механизмов, приводящих к формированию волн спиновых плотностей в железосодержащих пниктидах, на основе работы [16]. Рассмотрена модель коллективизированных электронов с двумя дырочными ферми-поверхностями, центрированными около Γ -точки Fe-зоны Бриллюэна, и двумя электронными пакетами около точек $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$.

В общем случае параметр порядка ВСП в такой модели является комбинацией двух компонент с волновыми векторами $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$. Однако в экспериментах по

рассеянию нейтронов наблюдается только одна из компонент. В докладе показано, что именно одна из компонент, $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$, стабилизируется, если считать, что только одна из дырочных зон перемещается с электронными зонами при образовании состояния ВСП. При этом вторая дырочная зона остаётся бесщелевой, что и объясняет металлическое состояние пниктидов с ВСП. При идеальном нестинге параметр порядка ВСП в этой трёхзонной модели сильно вырожден. Вырождение снимается в пользу $(0, \pi)$ -упорядочения или $(\pi, 0)$ -упорядочения при учёте взаимодействий и эллиптической формы электронных пакетов. Рассчитанные спектральная интенсивность ARPES, ферми-контур, а также дисперсия зон вблизи уровня Ферми соответствуют экспериментальным данным.

Я выражаю благодарность И.И. Мазину и А.В. Чубукову за полезные обсуждения. Работа поддержана субсидией, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

Список литературы

1. Kamihara Y et al. *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296 (2008)
2. Hirschfeld P J, Korshunov M M, Mazin I I *Rep. Prog. Phys.* **74** 124508 (2011)
3. Liu C et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 177005 (2008)
4. Terashima K et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106** 7330 (2009)
5. Zabolotnyy V B et al. *Nature* **457** 569 (2009)
6. Yang L X et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 107002 (2009)
7. Lu D H et al. *Nature* **455** 81 (2008)
8. Ding H et al. *J. Phys. Condens. Matter* **23** 135701 (2011)
9. Richard P et al. *Rep. Prog. Phys.* **74** 124512 (2011)
10. Coldea A I et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 216402 (2008)
11. Shishido H et al. *Phys. Rev. Lett.* **104** 057008 (2010)
12. Carrington A *Rep. Prog. Phys.* **74** 124507 (2011)
13. Singh D J, Du M-H *Phys. Rev. Lett.* **100** 237003 (2008)
14. Boeri L, Dolgov O V, Golubov A A *Phys. Rev. Lett.* **101** 026403 (2008)
15. Fernandes R M et al. *Phys. Rev. B* **85** 024534 (2012)
16. Eremin I, Chubukov A V *Phys. Rev. B* **81** 024511 (2010)
17. Chandra P, Coleman P, Larkin A I *Phys. Rev. Lett.* **64** 88 (1990)
18. Si Q, Abrahams E *Phys. Rev. Lett.* **101** 076401 (2008)
19. Xu C, Müller M, Sachdev S *Phys. Rev. B* **78** 020501(R) (2008)
20. Yildirim T *Phys. Rev. Lett.* **101** 057010 (2008)
21. Uhrig G S et al. *Phys. Rev. B* **79** 092416 (2009)
22. Nakajima M et al. *Phys. Rev. B* **81** 104528 (2010)
23. Rice T M *Phys. Rev. B* **2** 3619 (1970)
24. Келдыш Л В, Копяев Ю В *ФТТ* **6** 2791 (1964); Keldysh L V, Kopyaev Yu V *Sov. Phys. Solid State* **6** 2219 (1965)
25. Andersen O K, Boeri L *Ann. Physik* **523** 8 (2011)
26. Liu C et al. *Nature Phys.* **6** 419 (2010)
27. Pratt D K et al. *Phys. Rev. Lett.* **106** 257001 (2011)
28. Cvetkovic V, Tesanovic Z *Europhys. Lett.* **85** 37002 (2009)
29. Chubukov A V, Efremov D V, Eremin I *Phys. Rev. B* **78** 134512 (2008)
30. Brydon P M R, Timm C *Phys. Rev. B* **80** 174401 (2009)
31. Brydon P M R, Timm C *Phys. Rev. B* **79** 180504(R) (2009)
32. Wang F et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 047005 (2009)
33. Platt C, Honerkamp C, Hanke W *New J. Phys.* **11** 055058 (2009)
34. de la Cruz C et al. *Nature* **453** 899 (2008)
35. Klauss H-H et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 077005 (2008)
36. Fisher I R, Degiorgi L, Shen Z X *Rep. Prog. Phys.* **74** 124506 (2011)

PACS numbers: 74.20.Rp, **74.25.-q**, 74.62.Dh
DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408h.0882

Сверхпроводящее состояние в соединениях железа и спин-флуктуационная теория спаривания

М.М. Коршунов

*Beyond the pairs of opposites of which the world consists, other, new insights begin¹.
Herman Hesse, "Inside and Outside", in Stories of Five Decades (London: Jonathan Cape, 1974)*

Совсем недавно научное сообщество было взбудоражено новым открытием. На поле высокотемпературной сверхпроводимости, где последние двадцать лет безраздельно доминировали купраты, появился новый игрок — соединения железа [1]. Хотя критическая температура перехода соединений железа в сверхпроводящее состояние T_c не превысила температуру жидкого азота, уже в конце 2008 г., менее чем через год после открытия этого нового класса, она достигла 56 К. На сегодняшний день рекорд среди монокристаллов принадлежит $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ с $T_c = 57,5$ К [2], а большие надежды внушает открытие сверхпроводимости с $T_c \sim 60$ К в однослойных плёнках FeSe [3, 4].

Вообще, из соединений железа, обладающих сверхпроводимостью, можно выделить два класса: пниктиды и халькогениды. Базовым элементом в этих соединениях является квадратная решётка железа, в большинстве слабодопированных соединений подверженная орторомбическим искажениям при температурах, сравнимых с температурой перехода в антиферромагнитную (АФМ) фазу T_{SDW} . В первом классе соединений железо находится в тетраэдрическом окружении атомов мышьяка или фосфора, во втором — атомов селена, теллура или серы. Пниктиды бывают однослойными: 1111 (LaFeAsO , LaFePO , $\text{Sr}_2\text{VO}_3\text{FeAs}$ и т.д.) и 111 (LiFeAs , LiFeP и др.), а также двухслойными, типа 122, содержащими два слоя FeAs на элементарную ячейку (BaFe_2As_2 , KFe_2As_2 и т.п.). К халькогенидам относятся соединения типа 11 ($\text{Fe}_{1-\delta}\text{Se}$, $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$, плёнки FeSe) и типа 122 (KFe_2Se_2). Структура и физические свойства соединений железа подробно обсуждаются во многих обзорах (см., например, [5–16]).

Характерная особенность соединений железа, по сравнению, например, с купратами, состоит в качественном, а иногда даже и в количественном согласии ферми-поверхности, измеряемой посредством фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy — ARPES) и с помощью квантовых осцилляций с ферми-поверхностью, вычисленной первопринципными методами. Это, а также малая вели-

¹ "По ту сторону противопоставлений, противоположностей, из которых состоит наш мир, открываются новые, иные, возможности познания". Г. Гессе "Что внутри и вовне" (пер. С. Ромашко), *Книга рассказов. Новеллы* (М.: Текст, 2002).

М.М. Коршунов. Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, РФ
E-mail: mkor@iph.krasn.ru

чина магнитного момента на железе ($\sim 0,3\mu_B$) в пниктидах и отсутствие в недопированном случае диэлектрического состояния позволяют говорить о малой или средней величине электронных корреляций. Поэтому естественной начальной точкой описания скорее является модель делокализованных электронов, а не мотт-хаббардовский предел и модели типа $t-J_1-J_2$.

Вскоре после открытия сверхпроводимости пниктидов были проведены оценки возможности спаривания за счёт электрон-фононного взаимодействия. Константа связи оказалась даже меньше, чем у алюминия [17], хотя T_c в соединениях железа значительно выше. Это привело к выводу о том, что вряд ли спаривание, обусловленное электрон-фононным взаимодействием, является доминирующим, хотя, возможно, требуется более тщательный анализ, учитывающий специфические особенности зонной структуры [18]. Такая ситуация в свою очередь сразу привела к поискам альтернативных теорий сверхпроводящего спаривания. Используемые в теориях взаимодействия варьируются от спиновых и орбитальных флуктуаций до сильнокоррелированных мотт-хаббардовских и хундовских обменных констант. Описать и даже упомянуть все теории в данной статье не представляется возможным, поэтому сосредоточимся на одной из наиболее перспективных теорий — спин-флуктуационной теории сверхпроводящего спаривания.

Перспективной спин-флуктуационная теория сверхпроводящего спаривания является по ряду причин: 1) эта теория основана на модели делокализованных электронов, что служит хорошей отправной точкой для описания соединений железа; 2) сверхпроводящая фаза возникает сразу после антиферромагнитной или сосуществует с ней, при этом спин-решётчатая релаксация $1/T_1 T$ постепенно меняет характер поведения от кюри-вейсовского до паулиевского при увеличении допирования и снижении T_c [19], что говорит об уменьшении роли спиновых флуктуаций; 3) для описания разнообразных наблюдаемых свойств пниктидов и халькогенидов не требуется вводить в теорию дополнительные параметры, а нужно учитывать особенности зонной структуры и взаимодействий в различных классах соединений железа [16].

Сверхпроводники на основе железа представляют собой квазидвумерные вещества, в которых проводящей плоскостью является квадратная решётка атомов железа. Как показали результаты первых расчётов в рамках теории функционала плотности (Density Functional Theory — DFT) [20–22], весьма неплохо согласующиеся с результатами измерений ARPES и квантовых осцилляций, вблизи уровня Ферми доминируют $3d^6$ -состояния Fe^{2+} . При этом все пять орбиталей, $d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$, d_{xy} , d_{xz} и d_{yz} , лежат на поверхности Ферми или вблизи. Такая ситуация приводит к существенной "многоорбитальности" и многозонности низкоэнергетической электронной структуры, которую уже невозможно описать в однозонной модели. Так, например, в пятиорбитальной модели из работы [23], довольно хорошо воспроизводящей результаты DFT-расчётов [24], ферми-поверхность состоит из четырёх карманов: двух дырочных в области точки $(0,0)$ и двух электронных в области точек $(\pi,0)$ и $(0,\pi)$ (рис. 1). Такая геометрия в k -пространстве приводит к возможности возникновения волны спиновой плотности (Spin-Density Wave — SDW) из-за нестинга между дырочной и электронной ферми-поверхностями на волновом векторе $Q = (\pi,0)$ или $Q = (0,\pi)$. При

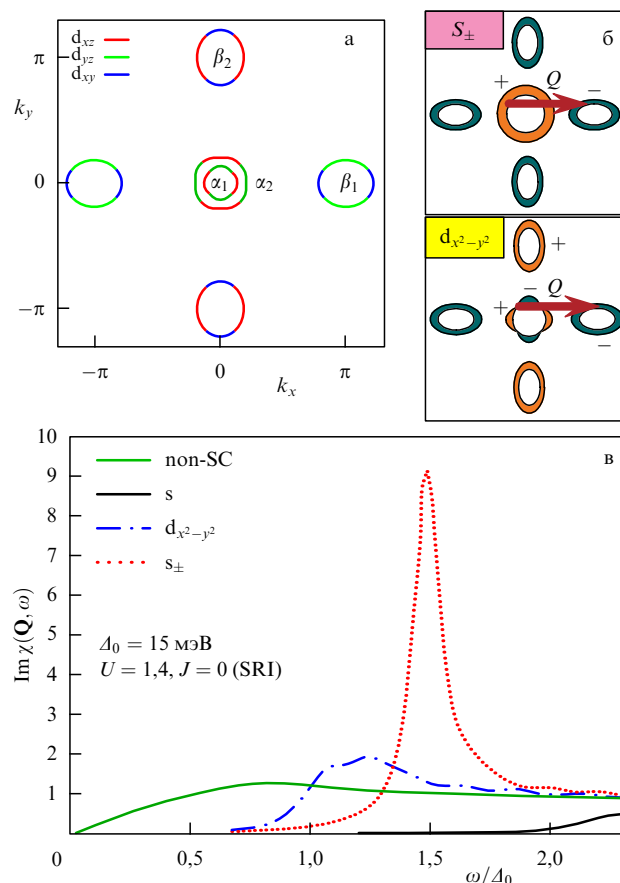


Рис. 1. (а) (В цвете онлайн.) Ферми-поверхность в модели [23] при электронном допировании $x = 0,05$ в зоне Бриллюэна, соответствующей одному атому Fe на элементарную ячейку. Орбитали, дающие максимальные вклады в ферми-поверхность, показаны различными цветами: d_{xz} — красным, d_{yz} — зелёным, d_{xy} — синим. (б) Структура сверхпроводящей щели s_+ и $d_{x^2-y^2}$ -типа на ферми-поверхности, вектор $Q = (\pi, 0)$ соединяет электронные и дырочные карманы. (в) Вычисленная в модели [23] частотная зависимость $Im \chi(q = Q, \omega)$ в нормальном состоянии (non-SC) и в сверхпроводящем с симметриями s (s_+), $d_{x^2-y^2}$ и s_+ . Расчёт выполнен для хаббардовского взаимодействия $U = 1,4$ эВ и хундовского обмена $J = 0$ при наличии спин-вращательной инвариантности (Spin-Rotational Invariance — SRI). В последнем случае возникает резонансный пик при $\omega < 2\Delta_0$.

увеличении уровня допирования x дальний SDW-порядок исчезает. Если это электронное допирование, то при x выше определённого значения дырочные карманы исчезнут и останутся только электронные, что соответствует $K_x Fe_{2-y} Se_2$ и монослоям $FeSe$ [4]. При увеличении концентрации дырок сначала возникает новый дырочный карман вокруг точки (π, π) , а затем исчезают электронные ферми-поверхности. Описанная ситуация возникает, в частности, в KFe_2As_2 . То, что максимальные вклады в зоны на поверхности Ферми дают $d_{xz, yz}$ - и d_{xy} -орбитали, подтверждается спектрами ARPES [25, 26]. При этом, как указано ниже, наличие нескольких карманов и многоорбитальный характер зон существенно влияют на картину сверхпроводящего спаривания.

Прежде чем перейти к изложению многоорбитального варианта теории, опишем, как строится спин-флуктуационная теория спаривания в однозонном случае с гамильтонианом хаббардовского взаимодействия $H = \sum_f U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow}$, где U — одноузельное кулоновское

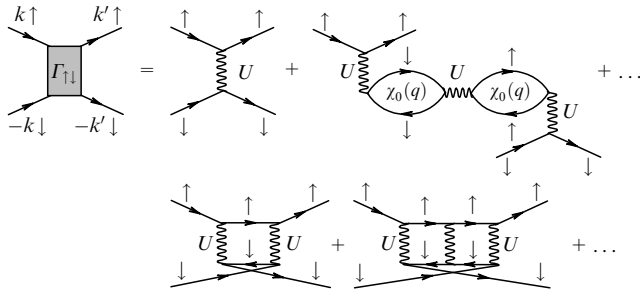


Рис. 2. Куперовская вершина $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ для синглетного сверхпроводящего состояния в RPA.

отталкивание (хаббардовское), $n_{f\sigma}$ — оператор числа частиц на узле f со спином σ . Сверхпроводящее взаимодействие в синглетном канале определяется куперовской вершиной $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$, которая в духе теории Берка–Шриффера [27–29] даётся диаграммным рядом в приближении случайных фаз (Random Phase Approximation — RPA) (рис. 2). Базовым элементом является электрон-дырочная петля — "голая" восприимчивость

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}})}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{p}}},$$

где $f(\varepsilon_{\mathbf{p}})$ — фермиевская функция распределения для дисперсии электронов $\varepsilon_{\mathbf{p}}$, ω_n — мацубаровская частота. Сумма петель и лестниц даёт

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow} = U(1 + U^2\chi_0^2 + \dots) + U^2\chi_0(1 + U\chi_0 + \dots) = \frac{U}{1 - U^2\chi_0^2} + \frac{U^2\chi_0}{1 - U\chi_0} =$$

$$= \frac{3}{2} U^2\chi_s - \frac{1}{2} U^2\chi_c + U, \quad (2)$$

где χ_s и χ_c — спиновая и зарядовая восприимчивости соответственно,

$$\chi_s = \chi_c = \frac{\chi_0}{1 \mp U\chi_0}. \quad (3)$$

В системе возникает магнитная нестабильность, если выполняется критерий Стонера $1 = U\chi_0(\mathbf{q}, \omega = 0)$. Ферромагнитная нестабильность соответствует $\mathbf{q} = 0$, а интересующая нас АФМ-нестабильность возникает на антиферромагнитном волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$. Если нам удастся избежать нестабильности, например, с помощью допирования, то дальний порядок не возникнет, но произведение $U\chi_0(\mathbf{q}, \omega = 0)$ будет близко к единице, что приведёт к большой величине спиновой восприимчивости χ_s и, соответственно, к её очень большому вкладу в куперовскую вершину $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$. Однако, в отличие от электрон-фононного взаимодействия в теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ), $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ приводит не к притяжению, а к эффективному отталкивательному взаимодействию $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Если записать гамильтониан системы в среднем поле, выделив в явном виде сверхпроводящее взаимодействие,

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma} a_{\mathbf{k}'\bar{\sigma}},$$

где $\bar{\sigma} = -\sigma$, $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ — оператор рождения электрона с импульсом \mathbf{k} и спином σ , то уравнение для щели будет

иметь вид

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{2E_{\mathbf{k}'}} \Delta_{\mathbf{k}'}(T) \tanh \frac{E_{\mathbf{k}'}}{2T}, \quad (4)$$

где $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$. В случае электрон-фононного взаимодействия с константой связи g_{e-ph} в теории БКШ имеем $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -g_{e-ph}^2$ и уравнение (4) имеет решение $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0(T)$, что и соответствует s-типу сверхпроводящего параметра порядка. В соединениях железа орбитальные флуктуации, усиленные электрон-фононным взаимодействием, могут приводить к знакопостоянному решению, которое в многозонном случае называют s_{++} -состоянием [30, 31]. С другой стороны, для спин-флуктуационного взаимодействия $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') > 0$ и s-тип решения не удовлетворяет уравнению (4). Для спиновых флуктуаций $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ имеет максимум на волновом векторе \mathbf{Q} , и если мы воспользуемся очень грубым приближением: $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = |\lambda| \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{Q})$, то (4) примет вид

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = -|\lambda| \frac{\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}(T)}{2E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2T}. \quad (5)$$

Очевидно, что у уравнения (5) есть решение, когда $\Delta_{\mathbf{k}}$ и $\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ имеют разные знаки. В простейшем случае $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ и уравнение переходит в

$$1 = |\lambda| \frac{1}{2E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2T}.$$

Решением будет щель, меняющая знак на векторе \mathbf{Q} . Если этот вектор соединяет различные зоны квазичастиц (ферми-поверхности, принадлежащие различным зонам), что и реализуется в соединениях железа, то решение такого типа с симметрией A_{1g} называется s_{\pm} -состоянием [22]. Конкурирующими будут состояния с симметрией B_{1g} , а именно имеющие d_{xy} - и $d_{x^2-y^2}$ -типы параметра порядка.

В многоорбитальном случае центральный объект спин-флуктуационной теории — динамическая спиновая восприимчивость — является тензором по орбитальным индексам l, l', m и m' :

$$\chi_{ss'}^{ll', mm'}(\mathbf{q}, i\Omega) = - \int_0^\beta d\tau \exp(i\Omega\tau) \langle T_\tau S_{ll'}^s(\mathbf{q}, \tau) S_{m'm}^{s'}(-\mathbf{q}, 0) \rangle. \quad (6)$$

Здесь Ω — мацубаровская частота, $S_{ll'}^s(\mathbf{q}, \tau)$ — s -я компонента вектора спинового оператора с мацубаровским временем τ ,

$$\mathbf{S}_{ll'}(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \alpha, \alpha'} a_{\mathbf{p}l\alpha}^\dagger(\tau) \hat{\sigma}_{\alpha\alpha'} a_{\mathbf{p}+q l' \alpha'}(\tau),$$

где $\hat{\sigma}$ — вектор, составленный из матриц Паули $\hat{\sigma}$, $a_{\mathbf{p}l\alpha}^\dagger$ — оператор рождения электрона на орбитали l с импульсом \mathbf{p} и спином α . Для получения нулевого по взаимодействию приближения расцепляем (6) по теореме Вика, вводим нормальные и аномальные функции Грина

$$G_{ml\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \tau) = - \langle T_\tau a_{\mathbf{k}m\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k}l\sigma'}^\dagger(0) \rangle,$$

$$F_{ml\sigma\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, \tau) = \langle T_\tau a_{\mathbf{k}m\sigma}^\dagger(\tau) a_{-\mathbf{k}l\bar{\sigma}'}^\dagger(0) \rangle,$$

$$F_{ml\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \tau) = \langle T_\tau a_{\mathbf{k}m\sigma}(\tau) a_{-\mathbf{k}l\bar{\sigma}'}(0) \rangle,$$

переходим к мацубаровским частотам ω_n и получаем для $(+/-)$ -компоненты восприимчивости в отсутствие спин-орбитального взаимодействия

$$\chi_{0,+/-}^{ll',mm'}(\mathbf{q}, i\Omega) = -T \sum_{\omega_n, \mathbf{p}} [G_{m\uparrow\uparrow}(\mathbf{p}, i\omega_n) G_{l'm'\downarrow\downarrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\Omega + i\omega_n) - F_{lm'\uparrow\downarrow}^\dagger(\mathbf{p}, -i\omega_n) F_{l'm\downarrow\uparrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\Omega + i\omega_n)]. \quad (7)$$

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

Куперовская вершина $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ ищется в нормальной фазе, где нет аномальных функций Грина. Функции Грина в орбитальном базисе являются недиагональными и зависят от двух орбитальных индексов. Имеет смысл перейти в зонный базис, построенный на операторах рождения и уничтожения $b_{\mathbf{k}\mu\sigma}^\dagger$ и $b_{\mathbf{k}\mu\sigma}$ электронов с зонным индексом μ , где функции Грина диагональны, $G_{\mu\sigma}(\mathbf{k}, i\Omega) = 1/(i\Omega - \varepsilon_{\mathbf{k}\mu\sigma})$. Переход от орбитального базиса к зонному осуществляется с помощью матричных элементов $\varphi_{\mathbf{k}m}^\mu: |\sigma m \mathbf{k}\rangle = \sum_\mu \varphi_{\mathbf{k}m}^\mu |\sigma \mu \mathbf{k}\rangle$. Тогда $a_{\mathbf{k}m\sigma} = \sum_\mu \varphi_{\mathbf{k}m}^\mu b_{\mathbf{k}\mu\sigma}$ и

$$\chi_{0,+/-}^{ll',mm'}(\mathbf{q}, i\Omega) = -T \sum_{\omega_n, \mathbf{p}, \mu, \nu} \varphi_{\mathbf{p}m}^\mu \varphi_{\mathbf{p}l'}^{*\mu} G_{\mu\uparrow}(\mathbf{p}, i\omega_n) \times G_{\nu\downarrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\Omega + i\omega_n) \varphi_{\mathbf{p}+q\nu'}^\nu \varphi_{\mathbf{p}+qm'}^{*\nu}. \quad (8)$$

В дальнейшем мы будем использовать модель зонной структуры H_0 из работы [23], основанную на DFT-расчётах [24] для однослойного пниктида LaFeAsO. В качестве взаимодействия возьмём двухчастичный гамильтониан с одноузельным взаимодействием общего вида [23, 32–34]:

$$H = H_0 + U \sum_{f,m} n_{f m \uparrow} n_{f m \downarrow} + U' \sum_{f,m < l} n_{f l} n_{f m} + J \sum_{f,m < l} \sum_{\sigma, \sigma'} a_{f l \sigma}^\dagger a_{f m \sigma}^\dagger a_{f l \sigma'} a_{f m \sigma'} + J' \sum_{f,m \neq l} a_{f l \uparrow}^\dagger a_{f l \downarrow}^\dagger a_{f m \downarrow} a_{f m \uparrow}, \quad (9)$$

где $n_{f m} = n_{f m \uparrow} + n_{f m \downarrow}$, f — индекс узла, U и U' — внутри- и межорбитальное хаббардовское отталкивание, J — хундовский обмен, J' — парный перескок. Обычно параметры подчиняются спин-вращательной инвариантности, что приводит к уменьшению свободных параметров теории вследствие соотношений $U' = U - 2J$ и $J' = J$.

На основании взаимодействия в гамильтониане (9) можно построить RPA для спиновой восприимчивости $\chi_{+-}(\mathbf{q}, i\Omega)$ [23]. Для того чтобы получить решение, нужно перейти от тензоров к матрицам с индексами $i = l + l' n_{\text{orb}}$ и $j = m + m' n_{\text{orb}}$, где n_{orb} — число орбиталей. Тогда в матричном виде спиновая восприимчивость в RPA выражается как

$$\hat{\chi}_{+-} = (\hat{1} - \hat{\chi}_{0,+/-} \hat{U}^{+-})^{-1} \hat{\chi}_{0,+/-}, \quad (10)$$

где \hat{U}^{+-} — матрица взаимодействий в $(+/-)$ -канале.

Куперовская вершина в многоорбитальном случае подобна таковой в однозонном случае (1),

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow}^{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \left[\frac{3}{2} \hat{U}_s \hat{\chi}_s(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \hat{U}_s - \frac{1}{2} \hat{U}_c \hat{\chi}_c(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \hat{U}_c + \frac{1}{2} \hat{U}_s + \frac{1}{2} \hat{U}_c \right]_{l_1 l_2 l_3 l_4}, \quad (11)$$

где $\hat{\chi}_{s,c} = (\hat{1} \mp \hat{\chi}_0 \hat{U}_{s,c})^{-1} \hat{\chi}_0$ — спиновая (s) и зарядовая (c) восприимчивости, $\hat{U}_{s,c}$ — матрицы взаимодействия в спиновом и зарядовом каналах, $l_1 - l_4$ — орбитальные индексы.

Необходимость построения теории в орбитальном представлении вызвана тем, что именно в нём взаимодействие хаббардовского типа, содержащееся в (9), остаётся локальным. Сверхпроводящие пары, однако, формируются на уровне зон, а не орбиталей, поэтому мы должны преобразовать куперовскую вершину в зонное представление с помощью матричных элементов $\varphi_{\mathbf{k}m}^\mu$:

$$\Gamma^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4} \varphi_{\mathbf{k} l_2}^{*\mu} \varphi_{-\mathbf{k} l_3}^{*\mu} \Gamma_{\uparrow\downarrow}^{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) \varphi_{\mathbf{k}' l_1}^\nu \varphi_{-\mathbf{k}' l_4}^\nu. \quad (12)$$

Как показывают расчёты, $\Gamma^{\mu\nu}$ быстро убывает с увеличением частоты в области частот, много меньших ширины зоны. Хотя уравнение для сверхпроводящей щели зависит, вообще говоря, от $\text{Im } \Gamma^{\mu\nu}$, импульсы \mathbf{k} и \mathbf{k}' , дающие главный вклад в спаривание, должны соответствовать малым частотам, при которых эти импульсы лежат вблизи ферми-поверхности. По аналогии с тем, как константа связи для электрон-фононного взаимодействия определяется интегралом по частотам от функции Элиашберга $\alpha^2 F(\omega)$, здесь, используя соотношения Крамерса – Кронига, получаем

$$\int_0^\infty d\omega \frac{\text{Im } \Gamma^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)}{\omega} = \text{Re } \Gamma^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega=0) \equiv \tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (13)$$

Таким образом, задача вычисления эффективного спаривающего взаимодействия сводится к нахождению действительной части $\Gamma^{\mu\nu}$ на нулевой частоте, что существенно облегчает расчёты.

Если параметр порядка $\Delta_{\mathbf{k}}$ представить в виде произведения амплитуды Δ_0 на угловую часть $g_{\mathbf{k}}$, то можно определить безразмерный параметр связи λ как результат решения задачи для собственных значений (λ) и собственных векторов ($g_{\mathbf{k}}$) [23]:

$$\lambda g_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{v}} \oint_{\mathbf{v}} \frac{d\mathbf{k}'_{\parallel}}{2\pi} \frac{1}{2\pi v_{F\mathbf{k}'}} \tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') g_{\mathbf{k}'}, \quad (14)$$

где $v_{F\mathbf{k}}$ — скорость Ферми, контурный интеграл берётся по \mathbf{k}'_{\parallel} , принадлежащему \mathbf{v} -й поверхности Ферми, а зонный индекс μ однозначно определяется тем, на какой поверхности Ферми лежит импульс \mathbf{k} . Положительные λ соответствуют притяжению, наибольшему из них будет отвечать максимальное значение 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 являются наиболее выгодными и какие будут конкурировать между собой.

С точки зрения механизма сверхпроводящего спаривания как спин-флуктуационные теории [23, 34, 35] и их самосогласованные обобщения в приближении FLEX (Fluctuation-exchange approximation) [36–38], так и ренормгрупповой анализ [39, 40] являются довольно сложными численными методами. Но поскольку для спаривания важна амплитуда рассеяния в канале частица – частица на ферми-поверхности, угловую зависимость этой амплитуды можно разложить по тем же гармони-

кам, что и $\Delta_{\mathbf{k}}$. Такой метод, называемый LANA (Lowest Angular Harmonics Approximation — приближение низших угловых гармоник), позволяет с помощью ограниченного набора параметров, не прибегая к сложным расчётам, описать спаривание в соединениях железа как при малом допировании, так и в случаях экстремального допирования электронами или дырками [41–43]. Основное предположение LANA состоит в том, что куперовская вершина $\tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ факторизуется по импульсам \mathbf{k} и \mathbf{k}' :

$$\tilde{\Gamma}^{\eta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{m,n} C_{mn}^{\eta} \Psi_m^{\eta}(\mathbf{k}) \Psi_n^{\eta}(\mathbf{k}'), \quad (15)$$

где индекс η соответствует группе симметрии параметра порядка, C_{mn}^{η} — коэффициенты, а функции Ψ представляют собой разложение по угловым гармоникам. Разложения, в зависимости от η , имеют различную функциональную форму. Так, например для A_{1g} -представления $\Psi_m^{A_{1g}}(\mathbf{k}) = a_m + b_m \cos(4\phi_{\mathbf{k}}) + c_m \cos(8\phi_{\mathbf{k}}) + \dots$, а для B_{1g} -представления $\Psi_m^{B_{1g}}(\mathbf{k}) = a_m^* \cos(2\phi_{\mathbf{k}}) + b_m^* \cos(6\phi_{\mathbf{k}}) + c_m^* \cos(10\phi_{\mathbf{k}}) + \dots$

Теперь задачу можно свести к нахождению функции $\tilde{\Gamma}_{ab}^{\eta}$, где a и b соответствуют номерам ферми-поверхностей. Так, на рис. 1 это дырочные, $\alpha_{1,2}$, и электронные, $\beta_{1,2}$, карманы. Например, для расширенных s - и $d_{x^2-y^2}$ -компонент можно записать

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{\alpha_i\alpha_j}^{\eta} &= U_{\alpha_i\alpha_j} + \tilde{U}_{\alpha_i\alpha_j} \cos(2\phi_i) \cos(2\phi_j), \\ \tilde{\Gamma}_{\alpha_i\beta_1}^{\eta} &= U_{\alpha_i\beta_1} [1 + 2\gamma_{\alpha_i\beta_1} \cos(2\theta_1)] + \tilde{U}_{\alpha_i\beta_1} \times \\ &\quad \times [1 + 2\tilde{\gamma}_{\alpha_i\beta_1} \cos(2\theta_1)] \cos(2\phi_i), \\ \tilde{\Gamma}_{\beta_1\beta_1}^{\eta} &= U_{\beta_1\beta_1} \left\{ 1 + 2\gamma'_{\beta_1\beta_1} [\cos(2\theta_1) + \cos(2\theta_2)] + \right. \\ &\quad \left. + 4\gamma'_{\beta_1\beta_1} \cos(2\theta_1) \cos(2\theta_2) \right\} + \\ &\quad + \tilde{U}_{\beta_1\beta_1} \left\{ 1 + 2\tilde{\gamma}'_{\beta_1\beta_1} [\cos(2\theta_1) + \cos(2\theta_2)] + \right. \\ &\quad \left. + 4\tilde{\gamma}'_{\beta_1\beta_1} \cos(2\theta_1) \cos(2\theta_2) \right\}, \end{aligned}$$

где U_{ij} и \tilde{U}_{ij} — взаимодействия в s - и d -каналах соответственно, $\gamma_{\alpha\beta}$, $\gamma_{\beta\beta}$, $\gamma'_{\beta\beta}$, $\tilde{\gamma}_{\alpha\beta}$, $\tilde{\gamma}'_{\beta\beta}$ — меры анизотропии взаимодействия, ϕ_i и θ_i — углы на дырочных и электронных ферми-поверхностях, отмеренные от оси k_x . Уравнение для параметра порядка тогда сводится к матричному уравнению 4×4 , которое легко решить. Коэффициенты C_{mn}^{η} и все a , b и т.д., входящие в разложение Ψ , можно получить из сравнения с расчётом полной $\tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ с помощью уравнений (11) и (12). Сравнение результатов для параметра порядка показало, что подход LANA очень хорошо воспроизводит результаты RPA [42].

Одним из преимуществ LANA является возможность варьировать эффективные параметры взаимодействия U_{ij} и \tilde{U}_{ij} , определяя таким образом, насколько стабильно какое-либо конкретное решение для щели. В такой фермиологической картине можно понять, какое именно взаимодействие приводит к спариванию.

На рисунке 3 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 между щелями s_{\pm} - и d -типа. Однако при наличии и электронных, и дырочных карманов всегда выигрывает s_{\pm} -состояние. Доминирующее взаимодействие U_{ij} и \tilde{U}_{ij} , которое было получено из анализа результатов LANA, показано стрелками, связывающими частицы на поверхностях Ферми. Так, при слабом допировании главным является 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 $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$, когда дырочные карманы

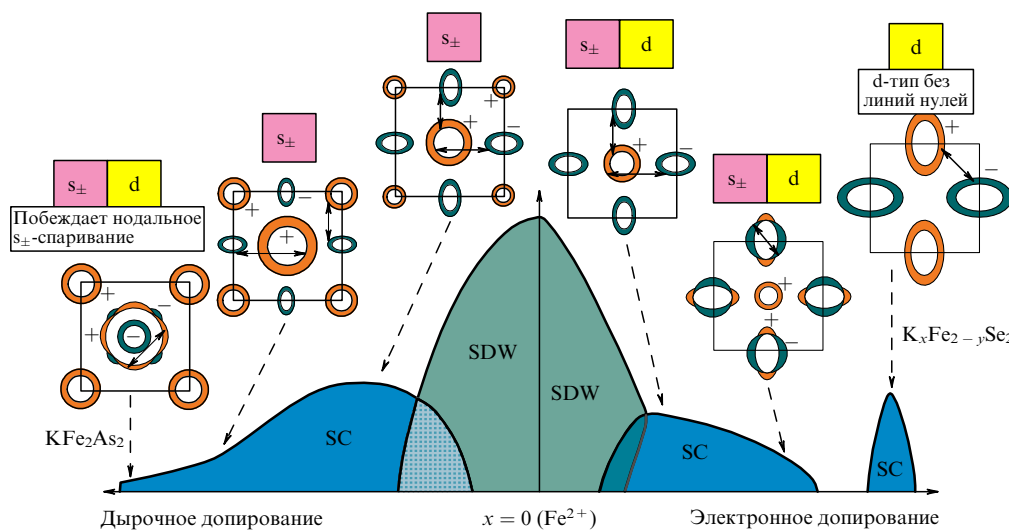


Рис. 3. (В цвете онлайн.) Схематическая фазовая диаграмма соединений железа для допирования дырками и электронами. Сосуществование АФМ (SDW) и сверхпроводящей (SC) фаз является микроскопическим для электронного допирования и макроскопическим (разбиение на SDW- и SC-области) для дырочного допирования. Качественная картина симметрий сверхпроводящего параметра, следующая из спин-флуктуационной теории [16, 23, 35] и LANA [42, 43] для двумерной системы, показана на схематических ферми-поверхностях на вставках над фазовой диаграммой; s_{\pm} и d обозначают доминирующую и субдоминирующую симметрию спаривания. Сплошными двойными стрелками (\leftrightarrow) показано доминирующее взаимодействие.

исчезают, система формирует сверхпроводимость d-типа вследствие сильного взаимодействия между электронными ферми-карманами. Остаётся открытым вопрос: будет ли выгодным такое состояние по сравнению со связующе-антисвязующим s_{\pm} -состоянием [16, 44] при переходе в зону Бриллюэна, соответствующую двум атомам Fe на элементарную ячейку? Казалось бы, из-за спин-орбитального взаимодействия, которое там, что очевидно, присутствует [45], и следующей из него гибридизации вдоль симметричных направлений связующе-антисвязующее s_{\pm} -состояние должно быть наиболее выгодным [46]. Но, как показывают расчёты в 10-орбитальной модели для $K_{0.8}Fe_{1.7}Se_2$ и $K_{0.85}Fe_{1.8}Se_2$, доминирующим всегда является спаривание $d_{x^2-y^2}$ -типа [47].

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. рис. 1), 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 A_{1g} -представлению и соответствует s_{\pm} -состоянию с добавленными высшими угловыми гармониками [43].

Что касается экспериментального наблюдения s_{\pm} -состояния, то одними из первых были получены результаты по неупругому рассеянию нейтронов. Так как $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ описывает возбуждения частица–дырка, а в сверхпроводящем состоянии все возбуждения на частотах, меньших $\approx 2\Delta_0$ (при $T = 0$), отсутствуют, то только на частотах выше этого значения $\text{Im } \chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ становится ненулевой. Из аномальных функций Грина в выражении (7) возникают члены, пропорциональные $1 - \Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}/E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Эти множители называются аномальными факторами когерентности. На уровне Ферми $E_{\mathbf{k}} \equiv (\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)^{1/2} = |\Delta_{\mathbf{k}}|$. Если $\Delta_{\mathbf{k}}$ и $\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ имеют одинаковый знак, то факторы когерентности будут равны нулю, что приведёт к плавному возрастанию спиновой восприимчивости с увеличением частоты при $\omega > \Omega_c$, где $\Omega_c = \min(|\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|)$, тогда как при меньших, чем Ω_c , частотах $\text{Im } \chi_0(\mathbf{q}, \omega) = 0$. Это видно из зависимости, приведённой на рис. 1, для сверхпроводимости классического s-типа (s_{++} -состояние). Если же, как в случае s_{\pm} - и d-состояний в соединениях железа, вектор $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, 0)$ соединяет ферми-поверхности с разными знаками щели, $\text{sgn } \Delta_{\mathbf{k}} \neq \text{sgn } \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, то факторы когерентности отличны от нуля и в мнимой части χ_0 возникает скачок при $\omega = \Omega_c$. В соответствии с соотношениями Крамерса–Кронига в действительной части появляется логарифмическая сингулярность. Для определённого набора параметров U, U', J, J' , входящих в матрицу \hat{U}^{\pm} , ненулевое значение $\text{Re } \chi_0$ и $\text{Im } \chi_0 = 0$ приводят к расходимости мнимой части восприимчивости в RPA (10). Соответствующий пик в $\text{Im } \chi(\mathbf{Q}, \omega)$, который называется "спиновым резонансом", появляется при частоте $\Omega_{\text{res}} \leq \Omega_c$. На рисунке 1 этот пик хорошо виден для s_{\pm} -состояния. В случае симметрии $d_{x^2-y^2}$, хотя резонанс и мог бы в принципе возникнуть из-за знакопеременности щели, вектор \mathbf{Q} соединяет состояния на

дырочной ферми-поверхности вблизи нулей щели $\Delta_{\mathbf{k}}$ и полная щель в $\text{Im } \chi_0$, определяемая Ω_c , очень мала. Поскольку $\Omega_c \ll \Delta_0$, скачок в $\text{Im } \chi_0$ исчезающе мал и восприимчивость в RPA показывает небольшое увеличение по сравнению с таковой для нормального состояния (см. рис. 1). То же справедливо для d_{xy} - и $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -симметрий [48] и для триплетного p-типа спаривания [49].

Таким образом, наличие спинового резонанса является эксклюзивным свойством s_{\pm} -состояния. Для соединений железа спиновый резонанс был предсказан теоретически [48, 49], а затем обнаружен экспериментально в семействах пниктидов и халькогенидов 1111, 122 и 11 [50–58].

Вводя дополнительное затухание квазичастиц и подбирая параметры, можно добиться появления пика в магнитной восприимчивости в s_{++} -состоянии на частотах выше Ω_c [59, 60]. С экспериментальной точки зрения важно отличить ситуацию с резонансным пиком при $\Omega_{\text{res}} \leq \Omega_c$ от ситуации увеличения восприимчивости при $\omega > \Omega_c$. Первый случай относится к s_{\pm} -состоянию и косвенно подтверждает спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости, а второй — к s_{++} -состоянию и теории сверхпроводимости за счёт орбитальных флуктуаций или электрон-фононного взаимодействия. Пока точного ответа нет, но совокупность экспериментальных данных как по спиновому резонансу, так и по интерференции квазичастиц (quasiparticle interference scattering), глубине проникновения, теплоёмкости и многим другим наблюдаемым характеристикам свидетельствует в пользу s_{\pm} -состояния [16].

Суммируя вышеизложенное, можно сказать, что, несмотря на многообразие материалов, многоорбитальная спин-флуктуационная теория спаривания объясняет многие наблюдаемые особенности сверхпроводников на основе железа, в частности различные варианты экспериментально наблюдаемого поведения щели. Анизотропное s_{\pm} -состояние и его структура нулей на ферми-поверхностях очень чувствительны к таким деталям электронной структуры, как орбитальный характер зон, спин-орбитальное взаимодействие и изменение зонной структуры в зависимости от уровня допирования.

Я выражаю благодарность О.В. Долгову, И.М. Ерёмину, А. Кордюку, И.И. Мазину, В.М. Пудалову, М.В. Садовскому, Ю.Н. Тогушовой, Р.И. Hirschfeld и А.В. Чубукову за полезные обсуждения. Работа поддержана грантом РФФИ 13-02-01395, программой Президиума РАН 20.7, программой государственной поддержки ведущих научных школ (НШ-2886.2014.2), фондом "Династия" и МЦФФМ.

Список литературы

1. Kamihara Y et al. *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296 (2008)
2. Fujioka M et al., arXiv:1401.5611
3. Wang Q-Y et al. *Chinese Phys. Lett.* **29** 037402 (2012)
4. Liu D et al. *Nature Commun.* **3** 931 (2012)
5. Садовский М В *УФН* **178** 1243 (2008); Sadovskii M V *Phys. Usp.* **51** 1201 (2008)
6. Ивановский А Л *УФН* **178** 1273 (2008); Ivanovskii A L *Phys. Usp.* **51** 1229 (2008)
7. Изюмов Ю А, Курмаев Э З *УФН* **178** 1307 (2008); Izyumov Yu A, Kurmaev E Z *Phys. Usp.* **51** 1261 (2008)
8. Ishida K, Nakai Y, Hosono H *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** 062001 (2009)
9. Johnston D C *Adv. Phys.* **59** 803 (2010)
10. Paglione J, Greene R L *Nature Phys.* **6** 645 (2010)

11. Mazin I I *Nature* **464** 183 (2010)
12. Lumsden M D, Christianson A D *J. Phys. Condens. Matter* **22** 203203 (2010)
13. Wen H-H, Li S *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **2** 121 (2011)
14. Basov D N, Chubukov A V *Nature Phys.* **7** 272 (2011)
15. Stewart G R *Rev. Mod. Phys.* **83** 1589 (2011)
16. Hirschfeld P J, Korshunov M M, Mazin I I *Rep. Prog. Phys.* **74** 124508 (2011)
17. Boeri L, Dolgov O V, Golubov A A *Phys. Rev. Lett.* **101** 026403 (2008)
18. Eschrig H, arXiv:0804.0186
19. Ning F et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** 013711 (2009)
20. Lebegue S *Phys. Rev. B* **75** 035110 (2007)
21. Singh D J, Du M-H *Phys. Rev. Lett.* **100** 237003 (2008)
22. Mazin I I et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 057003 (2008)
23. Graser S et al. *New J. Phys.* **11** 025016 (2009)
24. Cao C, Hirschfeld P J, Cheng H-P *Phys. Rev. B* **77** 220506(R) (2008)
25. Kordyuk A A *ФHT* **38** 1119 (2012); *Low Temp. Phys.* **38** 888 (2012)
26. Brouet V et al. *Phys. Rev. B* **86** 075123 (2012)
27. Berk N F, Schrieffer J R *Phys. Rev. Lett.* **17** 433 (1966)
28. Scalapino D J *J. Low Temp. Phys.* **117** 179 (1999)
29. Scalapino D J, Loh E (Jr.), Hirsch J E *Phys. Rev. B* **34** 8190(R) (1986)
30. Kontani H, Onari S *Phys. Rev. Lett.* **104** 157001 (2010)
31. Onari S, Kontani H *Phys. Rev. B* **85** 134507 (2012)
32. Castellani C, Natoli C R, Ranninger J *Phys. Rev. B* **18** 4945 (1978)
33. Oleś A M *Phys. Rev. B* **28** 327 (1983)
34. Kuroki K et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 087004 (2008)
35. Kemper A F et al. *New J. Phys.* **12** 073030 (2010)
36. Ikeda H *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** 123707 (2008)
37. Ikeda H, Arita R, Kuneš J *Phys. Rev. B* **81** 054502 (2010)
38. Zhang J et al. *Phys. Rev. B* **79** 220502(R) (2009)
39. Chubukov A V, Efremov D V, Eremin I *Phys. Rev. B* **78** 134512 (2008)
40. Thomale R et al. *Phys. Rev. Lett.* **106** 187003 (2011)
41. Maiti S et al. *Phys. Rev. Lett.* **107** 147002 (2011)
42. Maiti S et al. *Phys. Rev. B* **84** 224505 (2011)
43. Maiti S, Korshunov M M, Chubukov A V *Phys. Rev. B* **85** 014511 (2012)
44. Mazin I I *Phys. Rev. B* **84** 024529 (2011)
45. Korshunov M M et al. *J. Supercond. Novel Magn.* **26** 2873 (2013)
46. Khodas M, Chubukov A V *Phys. Rev. Lett.* **108** 247003 (2012)
47. Kreisel A et al. *Phys. Rev. B* **88** 094522 (2013)
48. Korshunov M M, Eremin I *Phys. Rev. B* **78** 140509(R) (2008)
49. Maier T A, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **78** 020514(R) (2008)
50. Inosov D S et al. *Nature Phys.* **6** 178 (2010)
51. Christianson A D et al. *Nature* **456** 930 (2008)
52. Lumsden M D et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 107005 (2009)
53. Christianson A D et al. *Phys. Rev. Lett.* **103** 087002 (2009)
54. Park J T et al. *Phys. Rev. B* **82** 134503 (2010)
55. Argyriou D N et al. *Phys. Rev. B* **81** 220503(R) (2010)
56. Castellani J-P et al. *Phys. Rev. Lett.* **107** 177003 (2011)
57. Qiu Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **103** 067008 (2009)
58. Babkevich P et al. *J. Phys. Condens. Matter* **22** 142202 (2010)
59. Onari S, Kontani H, Sato M *Phys. Rev. B* **81** 060504(R) (2010)
60. Onari S, Kontani H *Phys. Rev. B* **84** 144518 (2011)

PACS numbers: **74.25. -q**, **74.45. +c**, 74.62.Dh, 74.70.Xa
DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408i.0888

Андреевская спектроскопия железосодержащих сверхпроводников: температурная зависимость параметров порядка и их скейлинг с T_c

Т.Е. Кузьмичёва, С.А. Кузьмичёв, М.Г. Михеев,
Я.Г. Пономарёв, С.Н. Чесноков, В.М. Пудалов,
Е.П. Хлыбов, Н.Д. Жигадло

1. Введение

Одним из ключевых, но весьма неожиданных открытий в истории физики твёрдого тела стало создание [1] в 2006 г. первого представителя класса слоистых высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на основе железа — оксипниктида LnOFePn (где Ln — лантаноид, Pn — пниктид); впоследствии эту систему стали обозначать как 1111. С 2008 г. класс железосодержащих сверхпроводников заметно расширился: было синтезировано несколько семейств пниктидов и халькогенидов железа [2–4]. По структуре оксипниктиды схожи с ВТСП-купратами: они представляют собой стопку сверхпроводящих слоёв (Fe–As), чередующихся вдоль c -направления со спейсерами — несверхпроводящими блоками оксидов (Ln–O). Несмотря на достаточно ярко выраженную слоистость и анизотропию физических свойств, электронная подсистема железосодержащих сверхпроводников по сравнению с таковой в купратах менее квазидвумерна, так как высота блоков Fe–As превосходит толщину CuO_2 -слоя, а расстояния между сверхпроводящими блоками в железосодержащих сверхпроводниках значительно меньше, чем подобный промежуток в купратах. Этот факт можно назвать одной из причин [5] того, что полученная максимальная критическая температура железосодержащих сверхпроводников $T_c \approx 57,5 \text{ K}$ [44], хотя и является достаточно высокой, не достигает уровня T_c купратов.

Сверхпроводимость в железосодержащих материалах возникает при подавлении состояния с волной спиновой плотности с помощью допирования сверхпроводящих блоков Fe–As или приложения внешнего давления [7]. Однако существенное отличие этих материалов от купратов заключается в многозонном характере их недавно открытой сверхпроводимости. Зонные расчёты показали (в качестве обзора см. [8]), что в этих материалах

Т.Е. Кузьмичёва. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, РФ; Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, РФ
E-mail: kute@sci.lebedev.ru

С.А. Кузьмичёв, М.Г. Михеев, Я.Г. Пономарёв, С.Н. Чесноков. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, РФ

В.М. Пудалов. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, РФ; Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл., РФ

Е.П. Хлыбов. Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, РФ; International Laboratory for High Magnetic Fields and Low Temperatures, Wrocław, Poland

Н.Д. Жигадло. Laboratory for Solid State Physics, ETH Zurich, Zurich, Switzerland

существуют электронные и дырочные квазидвумерные зоны, а поверхности Ферми состоят из слабо гофрированных вдоль c -направления цилиндров (около точек Γ и M), на которых могут образовываться несколько сверхпроводящих конденсатов.

Вопреки наблюдению сильного изотопического эффекта [9], в одной из ранних теоретических работ было показано [10], что высокотемпературная сверхпроводимость железосодержащих сверхпроводников не может быть основана исключительно на электрон-фононном взаимодействии. Последнее, хоть и играет важную роль, не позволяет [10] воспроизвести наблюдаемые значения T_c в рамках теории Элиашберга [11]. Принимая во внимание конгруэнтность электронных и дырочных листов поверхности Ферми вдоль Γ – M -направления (так называемый нестинг), близость антиферромагнитного состояния [12, 13], а также появление пика динамической спиновой восприимчивости ("магнитного резонанса"), наблюдаемого экспериментально [14], Мазин и др. [12] предложили теоретическое объяснение механизма сверхпроводимости в пниктидах и селенидах железа посредством введения знакопеременного (в различных зонах) параметра порядка — так называемую s^\pm -модель. В простейшем случае в этой модели рассматриваются два изотропных параметра порядка (в электронной и дырочной зонах), одинаковых по амплитуде, но находящихся в противофазе (т.е. формально имеющих противоположные знаки). Основную роль в этой модели сверхпроводимости играет сильное межзонное взаимодействие на спиновых флуктуациях вдоль Γ – M -направления, при этом внутризонное электрон-фононное взаимодействие на порядок слабее. Позднее, когда обнаружилась очевидная несостоятельность положений первоначальной модели, связанная, в частности, с неустойчивостью системы с сильным межзонным взаимодействием относительно рассеяния на примесях [15–21], s^\pm -модель была расширена [22].

Согласно результатам расчётов для s^\pm -системы энергия магнитного резонанса не должна превышать ширину большей сверхпроводящей щели: $E_{\text{res}} \leq 2\Delta_L$ [13, 14]. Однако наблюдаемый в экспериментах (см. ссылки, приведённые в работе [16]) пик восприимчивости достаточно размыт, а его положение не всегда удовлетворяет резонансному условию [15, 16]. Более того, в недавней работе по купратам [23] было показано, что подобный "магнитный резонанс" определяется самим сверхпроводником, а его энергия совпадает с 2Δ . Альтернативная теория двухщелевого сверхпроводящего состояния железосодержащих сверхпроводников основана на спаривании посредством орбитальных флуктуаций [16]. Эта модель позволяет успешно описать такое состояние в рамках знакопостоянного параметра порядка (s^{++} -тип симметрии).

Тем не менее в обеих конкурирующих теориях [12, 16] не отрицается важность электрон-фононного спаривания, определяющего внутризонное взаимодействие в каждом из сверхпроводящих конденсатов. С другой стороны, как показано в работе [24], расчёт критической температуры по формуле Аллена – Дайнса для железосодержащих сверхпроводников с максимальными T_c не даёт величин, наблюдаемых экспериментально. Из этого авторы [24] делают вывод, что для таких соединений (в том числе LnOFePn) влияние нефононных механизмов образования куперовских пар значительно.

Также было показано, что изменение T_c для разных железосодержащих сверхпроводников связано с вариацией плотности состояний на уровне Ферми. В пределах одного семейства такого изменения можно достичь модификацией химического состава спейсеров. Подобное удалённое допирование (δ -допирование) сверхпроводящих блоков успешно применяется для ВТСП-купратов.

Настоящая работа посвящена как экспериментальной проверке вышеуказанной проблемы, так и сравнению значений относительного параметра — характеристического отношения теории Бардина – Купера – Шриффера (БКШ) $2\Delta_L/(k_B T_c)$, отражающего силу электрон-бозонной связи в соединениях LnOFeAs (семейство 1111) с различными T_c .

2. Обзор экспериментальных исследований

С момента открытия сверхпроводимости на основе железа прошло восемь лет, тем не менее многие её аспекты остаются неясными. До сих пор не установилось единое мнение о характере сверхпроводимости, количестве и типах симметрии параметров порядка. Результаты экспериментов по определению важнейших энергетических параметров железосодержащих материалов — сверхпроводящих щелей и положения магнитного резонанса — крайне противоречивы. Экспериментаторы сталкиваются с рядом трудностей. Большинство традиционных методов определения сверхпроводящих щелей, таких как измерение теплоёмкости, лондоновской глубины проникновения и ядерного магнитного резонанса (ЯМР), подразумевают обработку экспериментальных данных с помощью моделей, которые, в основном, не учитывают анизотропию транспортных и сверхпроводящих свойств железосодержащих сверхпроводников, поэтому, как правило, дают эффективные величины энергетических параметров, усреднённые по всему объёму образца. В частности, до сих пор не отработан метод синтеза монокристаллов оксипниктидов достаточно больших размеров (см. [25] и приведённые там ссылки), поэтому измерения их свойств обычно ведутся на поликристаллах. Всё это, скорее всего, является причиной низкой разрешающей способности подобных нелокальных методов, а полученные параметры часто оказываются редуцированными.

Действительно, измерения температурной зависимости лондоновской глубины проникновения [26–28] установили существование только одной сверхпроводящей щели с $2\Delta/(k_B T_c) \leq 3,52$, причём максимальное значение $2\Delta/(k_B T_c) \approx 3,4$ получено на монокристаллах [27]. Аналогичные значения характеристического отношения получены в экспериментах по исследованию оптических свойств [29], теплоёмкости [30] и ЯМР [31]. Две сверхпроводящие щели с достаточно высокими отношениями, $2\Delta_L/(k_B T_c) \approx 7$ –8 и $2\Delta_S/(k_B T_c) \approx 2$ –3, были разрешены с помощью ЯМР [32, 33], при этом авторами не исключается возможность реализации d -волновой симметрии.

Популярные локальные методики, например спектроскопия точечных контактов, сканирующая туннельная микроскопия (СТМ), а также фотоэмиссия с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy — ARPES) основаны на исследовании поверхностных свойств образца, поэтому на их результатах сказывается влияние поверхностных дефектов. В случае оксипниктидов так называемой системы 1111, сильная

анизотропия которых позволяет раскалывать их вдоль *ab*-направления, по границе между Fe–As- и Ln–O-слоями, поверхность образца оказывается заряженной [34]. Отсутствие поверхностных зарядов присуще только семейству (Li, Na)FeAs, что должно было бы сделать эту систему (111) главным объектом исследований для поверхностных методик. Но и тут не обошлось без принципиальных сложностей: из-за наличия атомов щелочных металлов сверхпроводники системы 111 чрезвычайно химически активны и быстро деградируют (в том числе в присутствии кислорода и паров воды).

Данных по ARPES, позволяющих различить обе сверхпроводящие щели, для оксипниктидов пока нет. По результатам ARPES хорошо видна большая щель, открывающаяся на дырочном цилиндре около Γ -точки поверхности Ферми, однако нет определённости относительно степени её анизотропии. По данным [35] для монокристаллов Nd-1111 большая щель не имеет точек нулей в *k*-пространстве, а $2\Delta/(k_B T_c) \approx 6,6$, что близко к значению, оценённому нами, и характерно для сильного электрон-бозонного взаимодействия. В то же время данные для поликристаллов La-1111 [36] одинаково хорошо описываются как d-волновой, так и s-волновой моделями, а характеристическое отношение теории БКШ имеет меньшее значение: $2\Delta/(k_B T_c) \sim 3,6$ при аппроксимации s-волновой моделью или $2\Delta/(k_B T_c) \sim 4,1$ при возможной d-симметрии щели.

Проводимость туннельных NIS-контактов (N — нормальный металл, S — сверхпроводник, I — изолятор) исследовалась в ряде работ с помощью СТМ [37–41]. В этих работах наблюдалась единственная сверхпроводящая щель с $2\Delta/(k_B T_c) = 3,5–4$. В работах [42, 43] на поликристаллах Nd-1111 получены NIS-спектры, содержащие две щелевые особенности, обусловленные изотропными Δ_L и Δ_S . Характеристическое отношение для большой щели было определено как $2\Delta_L/(k_B T_c) = 6,2 \pm 0,7$, что согласуется с данными NS-спектроскопии, полученными в [44], и с результатами данной работы. В работе [43] также показано, что воспроизводящая тонкая структура спектров с хорошей точностью соответствует рассчитанной функции Элиашберга $\alpha^2 F(\omega)$ и фононной плотности состояний, полученной экспериментально в работе [45], и, таким образом, имеет фононную природу [43]. Более того, критическая температура $T_c^{\text{theory}} = 48,8$ К, оценённая из расчётов $\alpha^2 F(\omega)$ с использованием однощелевой s-волновой модели, оказалась близкой к критической температуре образца $T_c^{\text{sample}} \approx 51$ К, что также подтверждает вывод [43] о сильном электрон-фононном взаимодействии.

Впечатляет расхождение в экспериментальных данных не только по величине сверхпроводящих щелей (разброс значений $2\Delta_L/(k_B T_c)$ более чем в шесть раз: $2\Delta_L/(k_B T_c) = 3,5–22,3$), но и по числу наблюдаемых щелей (см. обзоры [46, 47]). Это несоответствие присуще результатам, полученным с помощью наиболее популярной туннельной методики — спектроскопии точечных NS-контактов. К сожалению, при работе с поликристаллами семейства 1111 эта методика сталкивается с такими проблемами, как низкое качество поверхности и невозможность использования серебряной пасты для создания точечного контакта. На спектрах динамической проводимости, полученных в [48, 49] на La-1111 и Sm-1111, присутствуют достаточно чёткие максимумы, обусловленные малой щелью, при этом особенности, связанные с

большой щелью, практически не видны. Сильная асимметрия NS-спектров и необходимость использования для их аппроксимации семи коэффициентов (в случае двухщелевого сверхпроводника), по-видимому, затрудняют интерпретацию данных и приводят к разбросу результатов. Например, для Sm-1111 с различными концентрациями допанта и диапазоном $13,5 \leq T_c \leq 52$ К характеристическое отношение для большой щели, по данным [48], варьировалось в пределах 8–22, а для малой щели — в диапазоне 1,9–6,8; столь большие вариации могут быть объяснены только сменой механизма спаривания с изменением уровня допирования.

Подобное предположение, в особенности для семейства 1111, кажется практически невероятным. Температурные зависимости щелей, полученные в [49] для La-1111 и для Sm-1111, сильно различаются. На образцах Sm-1111 в [49] наблюдалось БКШ-образное "закрытие" обеих щелей. В то же время на La-1111 большая щель резко обращалась в нуль уже при температурах порядка $2/3 T_c$, а малая щель отклонялась от БКШ-зависимости, почти линейно стремясь к нулю при T_c . Подобное поведение щелей не описывается системой уравнений Москаленко и Сула [50–52] для двухщелевой сверхпроводимости и не получило подтверждения больше ни в одной из работ по железосодержащим сверхпроводникам. Сами авторы также не дают объяснения такому поведению щелей, считая его "артефактом". Обобщая результаты некоторых экспериментов, в работе [49] эта группа представила зависимости характеристических отношений большой и малой щелей от критической температуры для различных железосодержащих сверхпроводников. Согласно [49], $2\Delta_{L,S}/(k_B T_c)$ как функция T_c увеличивается при уменьшении T_c , резко возрастающая при $T_c \rightarrow 10$ К. Последнее утверждение кажется нам неубедительным как с точки зрения здравого смысла, так и ввиду отсутствия серьёзного экспериментального обоснования.

3. Детали эксперимента

Из представленного в разделе 2 следует, что для разрешения вопросов особенностей и механизмов сверхпроводимости железосодержащих соединений необходимо прежде всего обеспечить непосредственное экспериментальное определение сверхпроводящих щелей и их температурных зависимостей с высокой точностью. Для этого мы использовали андреевскую спектроскопию [53, 54] симметричных контактов типа SnS. В таких контактах при условии их малого диаметра *a* (меньшего квазичастичной длины свободного пробега *l* [55]) реализуется эффект многократных андреевских отражений от двух NS-границ. В этом случае на вольтамперных характеристиках (ВАХ) наблюдаются линейный участок избыточного тока при малых смещениях ("пьедалестал") и серия особенностей на смещениях

$$V_n = \frac{2\Delta}{en}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

называемая субгармонической щелевой структурой (СГС) [56–59]. В случае высокой прозрачности контакта на спектре динамической проводимости $dI(V)/dV$ появляется серия минимумов. В двухщелевом сверхпроводнике должны наблюдаться две подобные структуры, соответствующие каждой из щелей [60, 61]. Из-за конечного отношения l/a при малых смещениях *V* вероятность

баллистического прохождения SnS-интерфейса квазичастицей уменьшается, что приводит к постепенному снижению интенсивности андреевских рефлексов с увеличением их порядкового номера n . Когда V уменьшится, а n увеличится настолько, что будет выполнено условие $an = l$, избыточный ток достигнет насыщения. При дальнейшем стремлении смещения к нулю ток также начнёт убывать. Последнее объясняет линейность "пье-дестала" на ВАХ.

В наших экспериментах использовалась техника создания контактов на микротрещине (*break-junction*) [62]. Создание такого контакта основано на образовании в объёме образца двух соприкасающихся криогенных сколов, разделённых областью слабой связи (ScS-контакт, где s — слабая связь). Образец, изготовленный в виде тонкой прямоугольной пластины размером $3 \times 1,5 \times 0,2$ мм³, монтировался на пружинящем измерительном столике по стандартной четырёхточечной схеме подключения. Для закрепления образца на столике на его углы наносились капли жидкого In–Ga-припоя. Далее столик с образцом охлаждался до $T = 4,2$ К, после чего подвергался деформации, достаточной для образования микротрещины, разделяющей образец на две части. $I(V)$ - и $dI(V)/dV$ -характеристики контактов на микротрещине в железосодержащих сверхпроводниках, полученные в наших экспериментах [63–75], типичны для андреевского режима высокой прозрачности с баллистическим пролётом квазичастиц (см. рис. 2b и 5 из [57], а также рис. 4 из [59]).

Известно, что количество разломившихся зёрен при создании криогенного скола зависит от отношения $P_{\text{grains}}/P_{\text{layers}}$ (где P_{grains} — межзёренная прочность, P_{layers} — межслоевая прочность). Таким образом, для поликристаллов, полученных посредством многократного отжига, следует ожидать высокого процентного отношения между расслоившимися и нераскрывшимися кристаллитами, вдоль которых прошла микротрещина. Простой расчёт показывает, что уже при $P_{\text{grains}}/P_{\text{layers}} = 1,1$ следует ожидать появления на сколе около 6 % расслоившихся зёрен, а при $P_{\text{grains}}/P_{\text{layers}} = 2,5$ расколется примерно каждый второй кристаллит. Последнее позволяет практически с одинаковым успехом применять технику *break-junction* как на монокристаллах, так и на поликристаллических образцах [71].

Благодаря ярко выраженной слоистости железосодержащих сверхпроводников микротрещина проходит вдоль ab -плоскостей с формированием ступенек и террас на криогенных поверхностях. Очевидно, что высота таких ступенек кратна параметру решётки c . Ступеньки и террасы могут проявиться в виде не только одиночных ScS-контактов, но и стопочных структур типа $S-s-S-s-\dots-S$. В случае сверхпроводников на основе железа роль S играют блоки Fe–As, а в качестве слабой связи выступают спейсеры Ln–O. Очевидно, что стопочный контакт электрически эквивалентен нескольким идентичным последовательно соединённым ScS-контактам. Следовательно, смещение любых особенностей (отражающих объёмные свойства материала) ВАХ и динамической проводимости стопочного контакта окажется в N раз больше (N — число контактов в стопке) по сравнению со смещением особенностей характеристики ScS-контакта. Стопочные контакты впервые были получены на купратах [76–79], а впоследствии и на других слоистых сверхпроводниках [67–72, 74, 75]. Если такая

стопка находится в андреевском режиме (т.е. область слабой связи формально проявляет свойства нормального металла), то в ней должен наблюдаться эффект внутренних многократных андреевских отражений [78], аналогичный внутреннему эффекту Джозефсона [76, 78, 80]. Таким образом, для определения величины щели можно использовать формулу $V_n = 2\Delta N/(en)$.

Попытка объяснить получающиеся в эксперименте на микротрещине последовательные $S-s-S-s-\dots-S$ -контакты не внутренними эффектами, реализующимися на естественных стопочных контактах, а образованием цепочки из кристаллитов, соединённых межзёренными границами, не выдерживает критики. Так, в подобном случае из-за неэквивалентности межзёренных границ положение основных щелевых особенностей должно быть случайным, а не кратным $2\Delta/e$. Форма особенностей на спектрах динамической проводимости, так же как и тонкая структура, не должны воспроизводиться при механической перестройке контакта. Более того, с возрастанием числа N последовательно подключённых зёрен (обладающих разными сопротивлениями в нормальном состоянии) и с сопутствующим увеличением числа неэквивалентных межзёренных границ выраженность особенностей dI/dV -спектров должна драматически ослабевать с возрастанием N . Однако нами наблюдается прямо противоположная тенденция: с возрастанием N качество спектров улучшается, а положение и форма особенностей СГС отлично воспроизводятся при масштабировании оси смещений на целочисленный номер N . Кроме того, подобное поведение мы наблюдаем на монокристаллах различных сверхпроводников.

Суммируя сказанное, заключаем, что используемая нами техника формирования симметричных контактов на микротрещине обладает рядом преимуществ:

- 1) наличие чистых криогенных сколов в объёме образца: в процессе создания микротрещины сверхпроводящие берега образца прецизионно сдвигаются, скользят относительно друг друга вдоль ab -плоскостей. Микротрещина при этом не открывается, что препятствует деградации поверхности;
- 2) обеспечение условий для локального измерения сверхпроводящих параметров (в пределах контактной области диаметром порядка нескольких десятков нанометров);
- 3) применимость как для монокристаллических, так и для поликристаллических образцов слоистых соединений. В частности, как нами показано в [71], диаметр получаемого контакта 10–30 нм на несколько порядков меньше как размера кристаллитов, так и типичной ширины террас в исследованных нами образцах;
- 4) возможность получения нескольких десятков одиночных и стопочных контактов на сколах одного образца с помощью механической перестройки, что позволяет набирать статистику данных, судить о их воспроизводимости и оценивать однородность сверхпроводящих образцов на наномасштабах. Последнее приближает возможности методики к возможностям сканирующей туннельной микроскопии;
- 5) исключение перегрева контактной области благодаря удалённости токовых контактов образца (истинное четырёхточечное подключение);
- 6) возможность использовать два метода исследования железосодержащих сверхпроводников: андреевскую и внутреннюю андреевскую спектроскопию. Причём

последний метод при его реализации на высококачественных естественных стопочных контактах (к тому же не подверженных перегреву) гарантирует измерение объёмных величин сверхпроводящих щелей. Вклад поверхностных дефектов в проводимость таких контактов уменьшается в N раз; это также подразумевает увеличение в N раз точности определения сверхпроводящих параметров [71].

Подводя итог, заметим, что внутренняя андреевская спектроскопия, реализуемая нами с помощью техники *break-junction*, является сегодня единственным методом, который позволяет определять нередуцированные объёмные величины сверхпроводящих параметров порядка локально. При этом амплитуды щелей могут быть получены непосредственно из динамической проводимости SnS-контактов при любых температурах, вплоть до T_c [56, 57, 59], без необходимости подгонки расчётных спектров к экспериментальным с использованием семи подгоночных параметров.

4. Характеристики образцов

Мы использовали поликристаллические образцы оксипниктидов на основе различных лантаноидов, а также моно- и поликристаллы FeSe. Типичные нормированные температурные зависимости сопротивления при сверхпроводящем переходе образцов показаны на рис. 1. Почти оптимально допированные образцы $GdO_{1-x}F_xFeAs$ с номинальными концентрациями фтора $0,09 \leq x \leq 0,21$ и объёмными критическими температурами $T_c^{bulk} = 46-53$ К и $GdO_{0,88}FeAs$ (кружки на рис. 1) с $T_c^{bulk} \approx 50$ К были синтезированы методом высокого давления, подробно описанным в [66, 81].

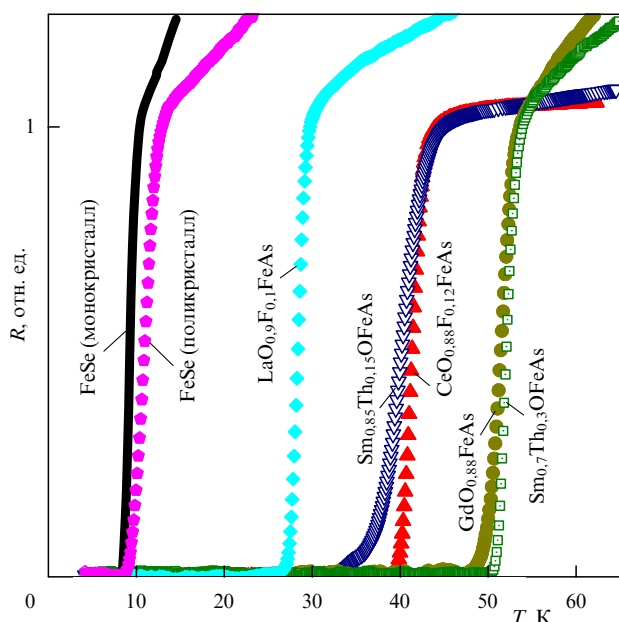


Рис. 1. Нормированные зависимости сопротивления от температуры при сверхпроводящем переходе для образцов железосодержащих сверхпроводников: монокристалла FeSe (сплошная кривая) — объёмная критическая температура $T_c^{bulk} \approx 9,5$ К, и поликристаллов FeSe (пятиугольники) — $T_c^{bulk} \approx 11$ К, $LaO_{0,9}F_{0,1}FeAs$ (ромбы) — $T_c^{bulk} \approx 28$ К, $Sm_{0,85}Th_{0,15}OFeAs$ и $Sm_{0,7}Th_{0,3}OFeAs$ (треугольники вершиной вниз и квадраты) — $T_c^{bulk} \approx 40$ и 52 К соответственно, $CeO_{0,88}F_{0,12}FeAs$ (треугольники вершиной вверх) — $T_c^{bulk} \approx 41$ К, $GdO_{0,88}FeAs$ (кружки) — $T_c^{bulk} \approx 51,5$ К.

Аналогичный метод использовался для синтеза образцов $CeO_{0,88}F_{0,12}FeAs$ (треугольники вершиной вверх на рис. 1) с $T_c^{bulk} \approx 41$ К. Образцы $Sm_{1-x}Th_xOFeAs$ (треугольники вершиной вниз и квадраты на рис. 1) имели концентрацию допирующего тория в диапазоне $0,15 \leq x \leq 0,3$ и критические температуры $T_c^{bulk} = 40-52,5$ К, соответственно; детали их синтеза и характеристики приведены в [82]. Наиболее низкую критическую температуру, $T_c^{bulk} = 21-29$ К, среди исследованных оксипниктидов имели образцы $LaO_{0,9}F_{0,1}FeAs$ (ромбы на рис. 1) [63, 83]. Объёмная критическая температура монокристаллов FeSe (сплошная кривая) составляла $T_c^{bulk} \approx 10$ К [73], а поликристаллов (пятиугольники на рис. 1) — $T_c^{bulk} \approx 11$ К [64, 70]. Все T_c^{bulk} были определены по максимуму производной $dR(T)/dT$.

5. Экспериментальные результаты

На рисунке 2 приведены спектр динамической проводимости одиночного SnS-контакта (верхняя кривая) и нормированные спектры стопочных андреевских контактов (с $N = 2, 6, 9$ и 8). Контакты получены на различных оптимально допированных образцах $GdO_{1-x}F_xFeAs$ и $GdO_{0,88}FeAs$ [65, 66, 71] с критическими температурами $T_c = 46-50$ К. На спектрах хорошо видны достаточно чёткие особенности: наиболее интенсивные минимумы,

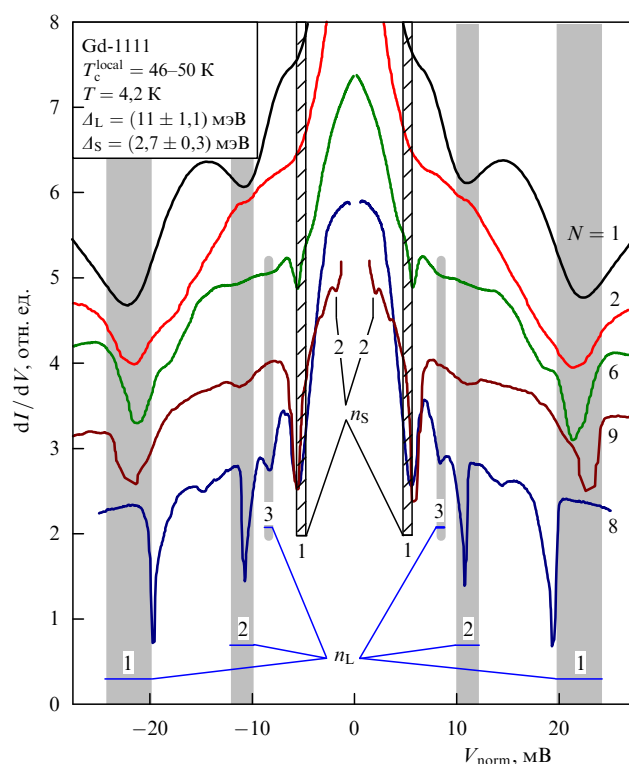


Рис. 2. (В цвете онлайн.) Спектры динамической проводимости стопочных SnS-андреевских контактов (четыре нижние кривые), число контактов в стопке $N = 2, 6, 9$ и 8 соответственно, нормированные на спектр одиночного SnS-контакта (верхняя кривая, $N = 1$). SnS-контакты получены на различных образцах $GdO(F)FeAs$ с критическими температурами $T_c = 46-50$ К. Положения минимумов субгармонической щелевой структуры от большой щели $\Delta_L = 11,0 \pm 1,1$ мэВ обозначены серыми областями и номерами, соответствующими индексу n_L , а от малой щели $\Delta_S = 2,7 \pm 0,3$ мэВ — заштрихованными областями, стрелками и соответствующими n_S номерами. Ширина указанных областей соответствует диапазону значений каждой из щелей.

расположенные при смещениях $V_{L1} \approx 22$ мВ и $V_{L2} \approx 11$ мВ (их положение отмечено на рис. 2 серыми областями, ширина которых соответствует 10%-ной погрешности, и индексами n_L), а также особенности при $V_{L3} \approx 7,3$ мВ (отмечены как $n_L = 3$). Согласно формуле (1) они являются первым, вторым и третьим андреевскими минимумами от большой щели $\Delta_L \approx 11$ мэВ. Следующая особенность, расположенная на меньшем смещении, $V \approx 5,5$ мВ, имеет много большую относительную амплитуду, чем третий минимум от Δ_L , поэтому она не может быть интерпретирована как четвёртый андреевский рефлекс, составляющий СГС от большой щели. Следовательно, этот минимум начинается вторую СГС, состоящую из особенностей при $V_{S1} \approx 5,5$ мВ и $V_{S2} \approx 2,7$ мВ (отмечены заштрихованными областями, ширина которых покрывает диапазон значений малой щели, и значениями индексов n_S на рис. 2) и определяющую величину малой щели $\Delta_S = 2,7 \pm 0,3$ мэВ.

В проведённых нами исследованиях железосодержащих сверхпроводников было получено несколько сотен различных одиночных и стопочных андреевских контактов, на спектрах которых наблюдались две независимые СГС [63–75]. После нормировки стопочных характеристик для приведения их к шкале энергий одиночного SnS-контакта (т.е. масштабирования оси смещений *в целое число раз*) положения особенностей как для большой, так и для малой щелей совпадали.

Таким образом, на ScS-контактах мы стабильно наблюдали эффекты многократных и внутренних многократных андреевских отражений, причём SnS-андреевская и внутренняя андреевская спектроскопии давали сходные величины щелей. Так как стопочные контакты являются частью естественной структуры железосодержащих сверхпроводников, можно заключить, что транспорт вдоль *c*-направления в этих материалах имеет андреевский характер.

Высокое качество контактов на микротрещине позволяет нам различать тонкую структуру андреевских рефлексов. Следует обратить внимание на воспроизводящуюся слегка асимметричную форму первых минимумов от большой щели (см. рис. 2): при уменьшении напряжения динамическая проводимость сначала резко убывает, достигая минимума, а затем более плавно возрастает. Подобный феномен является, по нашим оценкам, признаком 20–30%-ной анизотропии Δ_L в *k*-пространстве (свидетельствуя о гофрированном *s*-волновом типе симметрии параметра порядка) [71]. Сделать выводы о степени анизотропии Δ_S пока не представляется возможным, поскольку СГС от малой щели расположена на подъёме проводимости ("пьедестале" от большой щели), что затрудняет интерпретацию формы андреевских рефлексов от Δ_S . Значительная амплитуда первых минимумов СГС, как для Δ_L , так и Δ_S , позволяет косвенно сделать заключение об отсутствии нулей (т.е. узлов) на зависимости сверхпроводящих параметров порядка от направления в *k*-пространстве.

Влияние температуры на СГС от большой и малой щелей на нормированном по смещению в целое число раз $dI(V)/dV$ -спектре стопочного контакта показано на рис. 3. Соответствующая характеристика, полученная при $T = 4,2$ К на образце $\text{GdO}_{0,88}\text{FeAs}$, приведена на рис. 2 (третья сверху кривая). Для наглядности характеристики были сдвинуты по вертикальной оси в порядке увеличения температуры. Сильную размытость миниму-

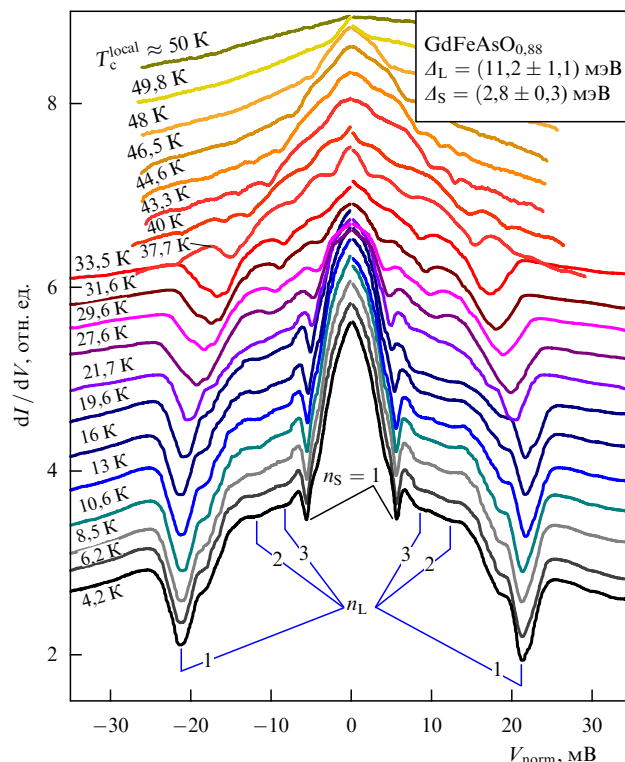


Рис. 3. (В цвете онлайн.) Динамическая проводимость SnS-контакта, созданного в образце $\text{GdO}_{0,88}\text{FeAs}$, измеренная в интервале температур $4,2 \text{ К} \leq T \leq T_c^{\text{local}}$. Локальная критическая температура контакта $T_c^{\text{local}} \approx 50$ К. Для наглядности спектры сдвинуты по оси ординат в порядке увеличения температуры. Положения андреевских минимумов от большой щели при $T = 4,2$ К обозначены номерами, соответствующими индексу n_L , а от малой щели — как $n_S = 1$.

мов $n_L = 3$ и $n_S = 2$ можно объяснить относительно большим диаметром этого контакта, сравнимым с длиной свободного пробега. Тем не менее основные щелевые особенности (обозначенные на рис. 3 как $n_L = 1$ и $n_S = 1$) достаточно чётко видны при температурах вплоть до T_c , что позволяет, используя формулу $2\Delta_{L,S}(T) = V_{nL,S}(T)en$, построить температурные зависимости большой и малой щелей без дополнительных расчётов.

Следует подчеркнуть, что асимметричная форма минимумов сохраняется при различных T . С возрастанием температуры эти минимумы сдвигаются в сторону малых смещений, и при $T = T_c^{\text{local}} \approx 50$ К динамическая проводимость контакта линеаризуется. Это соответствует переходу контактной области размером порядка 10–30 нм в нормальное состояние. Локальная критическая температура образца может отличаться от объёмной T_c^{bulk} , полученной нелокальными методами, например с помощью измерений сопротивления (см. рис. 1). Определив T_c^{local} контакта, можно вычислить характеристические отношения теории БКШ с высокой точностью: для данного контакта $2\Delta_L/(k_B T_c^{\text{local}}) \approx 5,2 \gg 3,52$, $2\Delta_S/(k_B T_c^{\text{local}}) \approx 1,3 \ll 3,52$.

По результатам измерений спектров андреевских контактов в диапазоне температур $4,2 \text{ К} \leq T \leq T_c^{\text{local}}$ получены температурные зависимости обеих щелей для различных железосодержащих сверхпроводников. Для примера на рис. 4 приведены $\Delta_L(T)$ (заполненные символы) и $\Delta_S(T)$ (незаполненные символы) для оксипниктидов на основе самария (треугольники и квадраты) и гадолиния (кружки) [69–74]. Прежде всего, очевидно, что

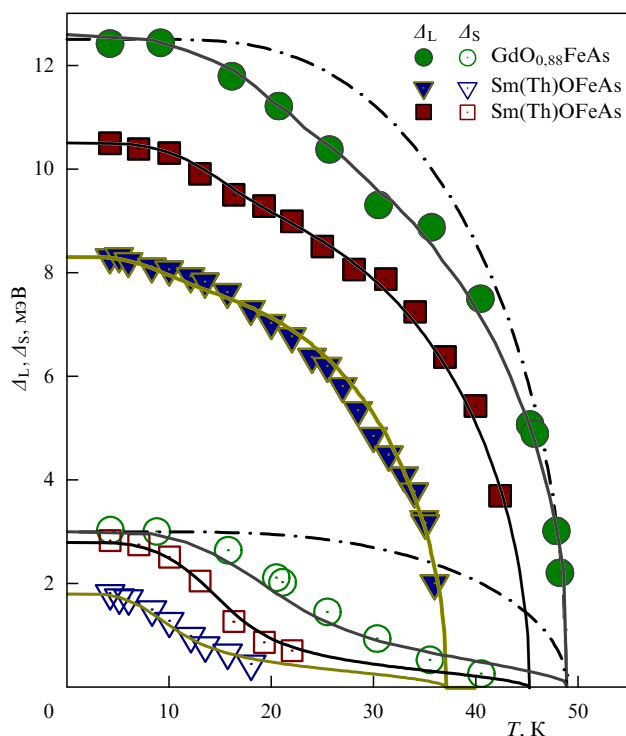


Рис. 4. Температурные зависимости большой щели (заполненные символы) и малой щели (незаполненные символы) для $\text{GdO}_{0.88}\text{FeAs}$ (кружки) — $T_c^{\text{local}} \approx 49$ К, Sm(Th)OFeAs : квадраты — $T_c^{\text{local}} \approx 45$ К, и треугольники $T_c^{\text{local}} \approx 37$ К. Для сравнения приведены теоретические БКШ-образные функции, соответствующие однощелевой модели (штрихпунктирные кривые) и двухщелевой модели (сплошные кривые).

при увеличении температуры большая и малая щели ведут себя по-разному. Зависимость большой щели $\Delta_L(T)$ в целом соответствует стандартному БКШ-типу (штрихпунктирные кривые), хотя и немного "проседает" относительно него, что является следствием межзонного взаимодействия со вторым конденсатом. Малая щель $\Delta_S(T)$ отклоняется от БКШ-образной зависимости сильнее: при температурах порядка $T \sim T_c^{\text{local}}/3$ щель резко уменьшается и затем плавно стремится к нулю при локальной T_c . Таким образом, сверхпроводимость в обоих конденсатах, судя по всему, исчезает при единой критической температуре T_c^{local} .

Различное температурное поведение большой и малой щелей, несоответствие стандартной БКШ-образной функции, а также воспроизводимость формы $\Delta(T)$ -характеристик (не только для различных контактов на одном и том же образце, но и для контактов, сформированных на образцах различных представителей семейства 1111) подтверждают наблюдение двухщелевой сверхпроводимости (см. рис. 4): особенности SnS -спектров относятся к разным СГС и, следовательно, отражают свойства разных конденсатов. Более того, наши исследования показали, что форма температурных зависимостей двух щелей качественно воспроизводится для железосодержащих сверхпроводников различных семейств (см. рис. 4, а также работы [64, 67–70, 72, 74, 75]).

Для анализа полученных температурных зависимостей мы аппроксимировали их двухщелевой системой уравнений Москаленко и Сула [50, 52] с перенормированным БКШ-интегралом (сплошные кривые на рис. 4). Эта

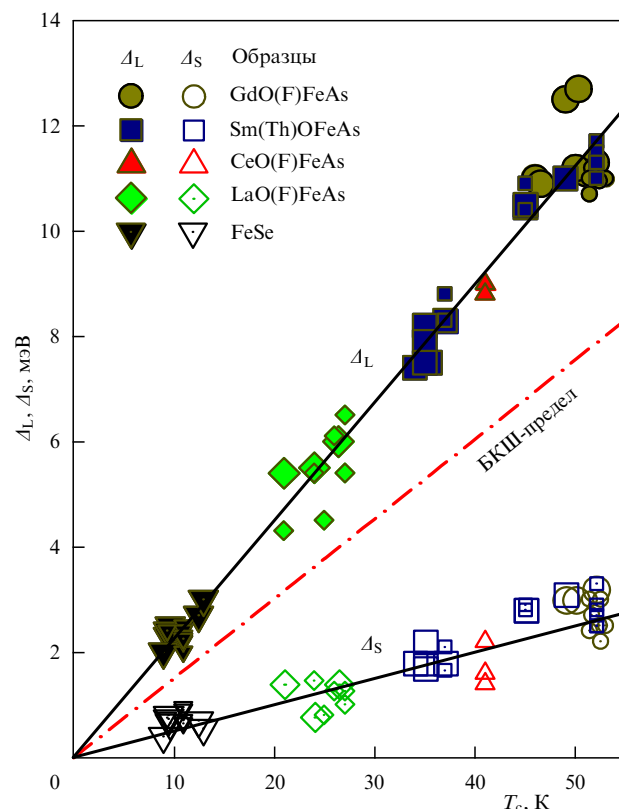


Рис. 5. Зависимость большой (заполненные символы) и малой (незаполненные символы) щели от критической температуры для Gd-1111 (кружки), Sm-1111 (квадраты), Ce-1111 (треугольники вершиной вверх), La-1111 (ромбы) и FeSe (треугольники вершиной вниз). Большими символами обозначены данные, соответствующие T_c^{local} , малыми — T_c^{bulk} . Сплошные линии приведены для удобства рассмотрения, штрихпунктирной линией показан БКШ-предел слабой связи.

система включает в себя набор из четырёх констант электрон-бозонного взаимодействия $\lambda_{ij} = V_{ij}N_j$, где V_{ij} — матричный элемент взаимодействия в k -пространстве между i -й и j -й зонами, N_j — нормальная плотность состояний на уровне Ферми j -й зоны. Как видно из рис. 4, теоретические кривые хорошо согласуются с экспериментальными результатами, следовательно, двухщелевая БКШ-образная модель применима для описания сверхпроводящих свойств исследованных железосодержащих сверхпроводников.

Таким образом, наблюдаемые в эксперименте отклонения $\Delta_L(T)$ и $\Delta_S(T)$ от однощелевых зависимостей можно объяснить влиянием эффекта близости в k -пространстве [84] между двумя конденсатами вследствие ненулевого межзонного взаимодействия. Проведённая нами аппроксимация измеренных температурных зависимостей позволила сравнить эффективность внутризонного и межзонного взаимодействий конденсатов для различных представителей семейства 1111.

6. Обсуждение

На рисунке 5 представлены зависимости большой щели (заполненные символы) и малой щели (незаполненные символы) от T_c для исследованных нами железосодержащих сверхпроводников: Gd-1111 , Sm-1111 , Ce-1111 , La-1111 и FeSe . Критические температуры исследованных соединений перекрывают практически весь диапазон вплоть до максимального значения $T_c = 53$ К для ис-

пользованных образцов. Данные для контактов с известной T_c^{local} показаны большими символами; для контактов, спектры которых были получены только при $T = 4,2$ К, была использована T_c^{bulk} (малые символы). В большинстве случаев, как и следовало ожидать, точки, построенные относительно T_c^{bulk} , оказываются ниже, чем построенные относительно T_c^{local} , так как обычно $T_c^{\text{bulk}} > T_c^{\text{local}}$. Поэтому становится очевидным, что для более корректной оценки $2\Delta_{L,S}/(k_B T_c)$ необходимо использовать в расчёте именно локальные сверхпроводящие параметры. Следовательно, выводы о сохранности либо изменении механизма спаривания как при вариации степени электронного допирования для семейств 1111, так и в целом для сверхпроводников различных семейств будут более обоснованными.

Согласно нашим данным (см. рис. 5), обе щели прямо пропорциональны критической температуре в интервале $9 \leq T_c \leq 53$ К с хорошей точностью. Наблюдаемый скейлинг с T_c означает, что отношение величины большой щели к величине малой остаётся при этих T_c примерно постоянным. Так, из данных, приведённых на рис. 5, следует, что усреднённое значение $\langle \Delta_L/\Delta_S \rangle \approx 4$. Заметим также, что амплитуды параметров порядка, полученные нами как на поликристаллах FeSe, так и на монокристаллах, совпадают, образуя единую группу точек (треугольники вершиной вниз на рис. 5).

Не меняется в пределах погрешностей и характеристическое отношение для каждой из зон (рис. 6). Для большой щели это отношение составляет $2\Delta_L/(k_B T_c) =$

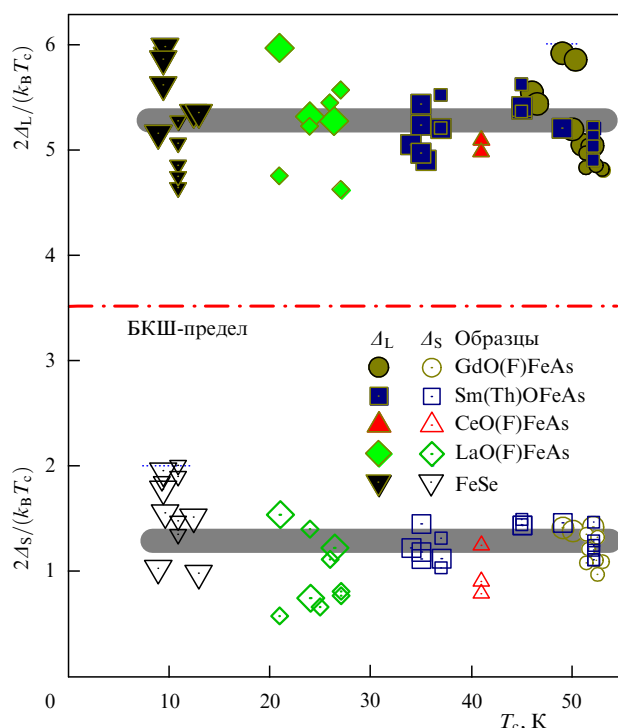


Рис. 6. Зависимость характеристических отношений $2\Delta_i/(k_B T_c)$ для большой (заполненные символы) и малой (незаполненные символы) щели от критической температуры для Gd-1111 (кружки), Sm-1111 (квадраты), Ce-1111 (треугольники вершиной вверх), La-1111 (ромбы) и FeSe (треугольники вершиной вниз). Большими символами обозначены данные, соответствующие T_c^{local} , малыми — T_c^{bulk} . Сплошными линиями показаны усреднённые значения отношений, штрихпунктирная линия соответствует БКШ-пределу слабой связи, равному 3,52.

$= 4,6-6,0$, что заметно превышает БКШ-предел слабой связи, равный 3,52. По всей вероятности, это объясняется сильным электрон-бозонным взаимодействием в зонах с большой щелью. Сплошные горизонтальные линии на рис. 6 отражают усреднённые значения отношений БКШ. Очевидно, что тенденция к значительному изменению силы связи (и тем более к смене механизма спаривания) не просматривается, а усреднённое значение отношения $\langle 2\Delta_L/(k_B T_c) \rangle \approx 5,2$. Аналогичная величина для энергии магнитного резонанса в оксипниктидах $E_{\text{res}}/(k_B T_c) = 5,1-5,3$ получена из рассеяния поляризованных нейтронов в работах [85, 86]. Для малой щели $2\Delta_S/(k_B T_c) = 0,6-2,0 \ll 3,52$. Последнее, очевидно, связано с тем, что наблюдаемая общая T_c контакта не описывает свойства конденсата с малой щелью, т.е. не является для него "собственной".

"Собственные" параметры каждого из сверхпроводящих конденсатов (в гипотетическом случае нулевого межзонного взаимодействия) $2\Delta_L/(k_B T_c^L)$ и $2\Delta_S/(k_B T_c^S)$, а также относительные константы связи (нормированные на внутризонную λ_{LL} для конденсата с большой щелью Δ_L), отношение плотностей состояний в зонах $\alpha = \lambda_{LS}/\lambda_{SL} \equiv N_S/N_L$ и силы эффективного внутризонного взаимодействия к межзональному $\beta = [\lambda_{LL}\lambda_{SS}/(\lambda_{LS}\lambda_{SL})]^{1/2} = (V_{LL}V_{SS})^{1/2}/V_{LS}$ были оценены нами из аппроксимации температурных зависимостей щелей с помощью расширенной модели Москаленко и Сула (см. таблицу). Стоит подчеркнуть, что форма всех полученных $\Delta_{L,S}(T)$ -зависимостей для разных семейств качественно воспроизводится. Для всех исследованных нами соединений "собственное" значение $2\Delta_L/(k_B T_c^L)$ для конденсата с большой щелью оказалось порядка 4,2–4,8, а для конденсата с малой щелью — в среднем немного ниже — от БКШ-предела 3,5 до 4,5. Таким образом, сверхпроводимость в

Таблица. Параметры сверхпроводящего состояния, рассчитанные из аппроксимации температурных зависимостей большой и малой щелей для оксипниктидов на основе лантана, самария и гадолиния*

Соединение	Gd-1111 [65]	La-1111	Sm-1111 [70]
Параметры			
T_c^{local} , К	49	50	21
T_c^{local} , К	45	45	37
Δ_L , мэВ	12,5	11,2	5,4
Δ_S , мэВ	3	3	1,4
$2\Delta_L/(k_B T_c^{\text{local}})$	5,9	5,2	6
$2\Delta_S/(k_B T_c^{\text{local}})$	1,4	1,4	1,5
$2\Delta_L/(k_B T_c^L)$	4,8	4,3	4,4
$2\Delta_S/(k_B T_c^S)$	3,8	3,53	3,7
T_c^{local}/T_c^L	0,81	0,83	0,73
T_c^{local}/T_c^S	0,84	0,84	0,87
$\lambda_{SS}/\lambda_{LL}$	0,63	0,58	0,75
$\lambda_{LS}/\lambda_{LL}$	0,26	0,37	0,36
$\lambda_{SL}/\lambda_{LL}$	0,023	0,073	0,025
$\alpha = \lambda_{LS}/\lambda_{SL} = N_S/N_L$	11,2	5,1	15,5
$\beta = (V_{LL}V_{SS})^{1/2}/V_{LS}$	10,4	4,6	9,4
$\beta = (V_{LL}V_{SS})^{1/2}/V_{LS}$	14,4	14,4	14

* $\lambda_{ij} = V_{ij}N_j$ — константы электрон-бозонного взаимодействия, $i = L, S$, $j = L, S$.

обоих конденсатах может быть описана в рамках теории сильной связи Элиашберга [11].

Принимая во внимание наличие сильного изотопического эффекта в железосодержащих сверхпроводниках [9] и некоторые экспериментальные данные [19, 43], можно сделать вывод о сильном электрон-фононном спаривании внутри каждой из зон. В зонах с малой щелью взаимодействие слабее: на это указывает также то, что λ_{SS} в среднем составляет $\sim 60\%$ от λ_{LL} . Хотя внутризонное спаривание играет основную роль в сверхпроводимости оксипниктидов ($\beta \gg 1$), для описания двухщелевого состояния необходимо учитывать и межзонное взаимодействие.

По нашим данным (см. таблицу), конденсаты взаимодействуют достаточно слабо, но именно благодаря $\lambda_{LS,SL} \neq 0$ малая щель не обращается в нуль при температурах вплоть до значения локальной критической температуры контакта; действительно, в случае отсутствия межзонного взаимодействия, согласно теории [50, 52], малая щель БКШ-образно закрывалась бы при своей "собственной" T_c^S . Таким образом, при температурах выше T_c^S сверхпроводимость в A_S -конденсате имеет наведённый характер вследствие влияния "ведущего" A_L -конденсата (эффект близости в k -пространстве). Последнее обуславливает наблюдаемый прогиб температурной зависимости большой щели относительно однощелевой БКШ-образной функции, что влечет за собой понижение общей T_c^{local} относительно "собственной" T_c^L , по нашим данным, примерно на 20–30 % (см. таблицу). Так как подобные прогибы обусловлены влиянием зон с малой щелью, их интенсивность будет зависеть от отношения плотностей состояний в двух зонах (параметр α): по нашим оценкам, в зонах с малой щелью плотность состояний в среднем на порядок выше, чем в зонах с большой щелью.

Итак, оценённые нами относительные λ_{ij} и "собственные" $2\Delta_i/(k_B T_c^i)$ значения остаются примерно постоянными, несмотря на изменение концентрации как допанта, так и образующего лантаноида Sm/Gd/Ce/La. В исследованных образцах варьируется химический состав только спейсеров, а не сверхпроводящих блоков Fe–As. Степень структурного упорядочения последних практически постоянна, при этом изменяется только уровень допирования и, соответственно, величины плотностей состояний в зонах $N_{L,S}$.

Таким образом, наши исследования подтверждают, что спейсеры в структуре 1111 играют роль зарядовых резервуаров, не участвуя непосредственно в сверхпроводимости. Можно предположить, что подобные различия состава не влияют на механизм спаривания и силу электрон-фононного взаимодействия. Принимая во внимание одинаковую квазидвумерную размерность A_L - и A_S -конденсатов и сходное строение соответствующих поверхностей Ферми для семейства 1111 и FeSe [87], можно легко объяснить наблюдаемый экспериментально скейлинг обеих щелей с критической температурой. Последнее утверждение согласуется с теоретическими представлениями [24].

7. Заключение

Итак, нами были проведены исследования железосодержащих сверхпроводников различных семейств с критическими температурами, перекрывающими практически весь диапазон от 9 К вплоть до максимального значения

$T_c = 53$ К. На естественных стопочных контактах, созданных в этих материалах, наблюдался эффект внутренних многократных андreeвских отражений. С помощью спектроскопии таких контактов установлено, что в железосодержащих сверхпроводниках андreeвские отражения вносят существенный вклад в транспорт вдоль c -направления. В вышеуказанных материалах нами обнаружена двухщелевая сверхпроводимость, определены величины большой и малой сверхпроводящих щелей и соответствующие характеристические отношения теории БКШ. Получены температурные зависимости большой и малой щелей $\Delta_{L,S}(T)$, которые хорошо воспроизводятся для разных семейств железосодержащих сверхпроводников и описываются двухзонной моделью Москаленко и Сула. Сделан вывод об s -волновом типе симметрии параметра порядка Δ_L с анизотропией в k -пространстве примерно 20–30 % и отсутствием точечных нулей Δ_L .

Экспериментально установлено, что для всех исследованных оксипниктидов характеристическое отношение теории БКШ для зоны с большой щелью $2\Delta_L/(k_B T_c) \approx 5,2$ практически постоянно во всём диапазоне T_c (сила связи не изменяется), отражает уменьшение T_c^{local} относительно T_c^L примерно на 20% и в пределах погрешностей соответствует энергии магнитного резонанса $2\Delta_L \approx E_{\text{res}}$. Этот результат требует специального рассмотрения.

Оценка относительных констант связи и "собственных" характеристических параметров конденсатов (в гипотетическом случае отсутствия межзонного взаимодействия) $2\Delta_L/(k_B T_c^L) = 4,2–4,8$, $2\Delta_S/(k_B T_c^S) = 3,5–4,5$ позволила косвенно определить, что основную роль в сверхпроводимости железосодержащих оксипниктидов играет сильное электрон-фононное взаимодействие в каждом из конденсатов, которое описывается в рамках теории Элиашберга [11]. При этом конденсаты слабо взаимодействуют между собой ($\beta \gg 1$) (см. таблицу). Тем не менее для исследованных железосодержащих соединений межзонное взаимодействие оказывается сильнее, а внутризонное — слабее по сравнению с таковыми для другого двухщелевого сверхпроводника, MgB_2 . Так, для σ -зон в MgB_2 собственное отношение $2\Delta_\sigma/(k_B T_c^L) \approx 5,1$ и $\beta = 10–20$ [88], в то время как для соединений Ln-1111 параметр $\beta = 5–15$.

По нашим данным, средняя величина отношения составляет $\Delta_L/\Delta_S \approx 4$ и сохраняется во всём диапазоне $T_c = 9–53$ К. Наблюдаемый скейлинг сверхпроводящих щелей и T_c , как обсуждалось выше, вызван изменением плотности состояний $N_{L,S}$ в зонах. Согласно теории БКШ, за увеличение Δ и T_c отвечает усиление внутризонной константы связи $\lambda = VN$. Возможности химического допирования для повышения плотности состояний N в известных на сегодня железосодержащих сверхпроводниках крайне ограничены. Размышляя о перспективах увеличения V , укажем на гипотетическую возможность усиления внутризонного взаимодействия посредством увеличения плотности фононных состояний с высокими энергиями. Это могло бы быть осуществлено, например, изменением постоянных кристаллической решётки или внедрением в периодическую структуру слоёв-спейсеров, содержащих лёгкие атомы с незаполненной p -электронной оболочкой (B, C, N).

Авторы выражают благодарность Ю.Ф. Ельцеву, А.В. Садакову, К.С. Первакову, Л.Ф. Куликовой,

П.И. Арсееву, Н.К. Фёдорову, Д.А. Чарееву, А.Н. Васильеву, О.С. Волковой, Т. Hänke, С. Hess, R. Behr, R. Klingeler, B. Büchner, Th. Wolf. Исследования подержаны РФФИ (гранты 13-02-01451, 14-02-90425).

Список литературы

- Kamihara Y et al. *J. Am. Chem. Soc.* **128** 10012 (2006)
- Садовский М В *УФН* **178** 1243 (2008); Sadovskii M V *Phys. Usp.* **51** 1201 (2008)
- Ивановский А Л *УФН* **178** 1273 (2008); Ivanovskii A L *Phys. Usp.* **51** 1229 (2008)
- Изыумов Ю А, Курмаев Э З *УФН* **178** 1307 (2008); Izyumov Yu A, Kurmaev E Z *Phys. Usp.* **51** 1261 (2008)
- Abrikosov A A *Physica C* **317**–**318** 154 (1999)
- Fujioka M et al., arXiv:1401.5611
- Klauss H-H et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 077005 (2008)
- Mazin I I, Schmalian J *Physica C* **469** 614 (2009)
- Liu R H et al. *Nature* **459** 64 (2009)
- Boeri L, Dolgov O V, Golubov A A *Physica C* **469** 628 (2009)
- Элиашберг Г М *ЖЭТФ* **38** 966 (1960); Eliashberg G M *Sov. Phys. JETP* **11** 696 (1960)
- Mazin I I et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 057003 (2008)
- Korshunov M M, Eremin I *Phys. Rev. B* **78** 140509(R) (2008)
- de la Cruz C et al. *Nature* **453** 899 (2008)
- Paglione J, Greene R L *Nature Phys.* **6** 645 (2010)
- Onari S, Kontani H *Phys. Rev. Lett.* **103** 177001 (2009)
- Efremov D V et al. *Phys. Rev. B* **84** 180512(R) (2011)
- Sato M et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** 014710 (2010)
- Ikeuchi K et al. *JPS Conf. Proc.* **3** 015043 (2014)
- Ishizuka J et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** 123712 (2013)
- Shein I R, Ivanovskii A L *Phys. Lett. A* **375** 1028 (2011)
- Pandey S, Chubukov A V, Khodas M *Phys. Rev. B* **88** 224505 (2013)
- Zhou Y et al., arXiv:1311.0611
- Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *Письма в ЖЭТФ* **91** 567 (2010); *JETP Lett.* **91** 518 (2010)
- Zhigadlo N D et al. *Phys. Rev. B* **86** 214509 (2012)
- Malone L et al. *Phys. Rev. B* **79** 140501(R) (2009)
- Hashimoto K et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 017002 (2009)
- Prakash J et al. *J. Phys. Condens. Matter* **21** 175705 (2009)
- Chen G F et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 057007 (2008)
- Mu G et al. *Chinese Phys. Lett.* **25** 2221 (2008)
- Nakai Y et al. *Phys. Rev. B* **79** 212506 (2009)
- Kawasaki S et al. *Phys. Rev. B* **78** 220506(R) (2008)
- Matano K et al. *Europhys. Lett.* **83** 57001 (2008)
- Yin Y et al. *Physica C* **469** 535 (2009)
- Kondo T et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 147003 (2008)
- Sato T et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** 063708 (2008)
- Sugimoto A et al. *Physica C* **470** 1070 (2010)
- Ekino T et al. *Physica C* **470** S358 (2010)
- Jin R et al. *Supercond. Sci. Technol.* **23** 054005 (2010)
- Fasano Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **105** 167005 (2010)
- Millo O et al. *Phys. Rev. B* **78** 092505 (2008)
- Miyakawa N et al. *J. Supercond. Novel Magn.* **23** 575 (2010)
- Tanaka M, Shimada D *J. Supercond. Novel Magn.* **24** 1491 (2011)
- Samuely P et al. *Supercond. Sci. Technol.* **22** 014003 (2009)
- Le Tacon M et al. *Phys. Rev. B* **78** 140505(R) (2008)
- Seidel P *Supercond. Sci. Technol.* **24** 043001 (2011)
- Stewart G R *Rev. Mod. Phys.* **83** 1589 (2011)
- Daghero D et al. *Supercond. Sci. Technol.* **25** 084012 (2012)
- Daghero D et al. *Rep. Prog. Phys.* **74** 124509 (2011)
- Москаленко В А *ФММ* **8** 503 (1959)
- Москаленко В А *УФН* **113** 340 (1974); Moskalenko V A *Sov. Phys. Usp.* **17** 450 (1974)
- Suhl H, Matthias B T, Walker L R *Phys. Rev. Lett.* **3** 552 (1959)
- Андреев А Ф *ЖЭТФ* **48** 1823 (1964); Andreev A F *Sov. Phys. JETP* **19** 1228 (1964)
- Абрикосов А А и др. *УФН* **180** 109 (2010); Abrikosov A A et al. *Phys. Usp.* **53** 103 (2010)
- Шарвин Ю В *ЖЭТФ* **48** 984 (1965); Sharvin Yu V *Sov. Phys. JETP* **21** 655 (1965)
- Octavio M et al. *Phys. Rev. B* **27** 6739 (1983)
- Flensberg K, Hansen J B, Octavio M *Phys. Rev. B* **38** 8707 (1988)
- Arnold G B *J. Low Temp. Phys.* **68** 1 (1987)
- Kümmel R, Günsenheimer U, Nicolsky R *Phys. Rev. B* **42** 3992 (1990)
- Пономарев Я Г и др. *Письма в ЖЭТФ* **79** 597 (2004); Ponomarev Ya G et al. *JETP Lett.* **79** 484 (2004)
- Kuzmichev S A et al. *Solid State Commun.* **152** 119 (2012)
- Moreland J, Ekin J W *J. Appl. Phys.* **58** 3888 (1985)
- Ponomarev Ya G et al. *Phys. Rev. B* **79** 224517 (2009)
- Ponomarev Ya G et al. *ЖЭТФ* **140** 527 (2011); *JETP* **113** 459 (2011)
- Shanygina T E et al. *Письма в ЖЭТФ* **93** 95 (2011); *JETP Lett.* **93** 94 (2011)
- Пудалов В М и др. *УФН* **181** 672 (2011); Pudalov V M et al. *Phys. Usp.* **54** 648 (2011)
- Shanygina T E et al. *J. Phys. Conf. Ser.* **391** 012138 (2012)
- Kuzmichev S A et al. *Письма в ЖЭТФ* **95** 604 (2012); *JETP Lett.* **95** 537 (2012)
- Shanygina T E et al. *J. Supercond. Novel Magn.* **26** 2661 (2013)
- Ponomarev Ya G et al. *J. Supercond. Novel Magn.* **26** 2867 (2013)
- Kuzmicheva T E et al. *Europhys. Lett.* **102** 67006 (2013)
- Кузьмичев С А и др. *Письма в ЖЭТФ* **98** 816 (2013); Kuzmichev S A et al. *JETP Lett.* **98** 722 (2013)
- Chareev D et al. *CrystEngComm* **15** 1989 (2013)
- Кузьмичева Т Е, Кузьмичев С А, Жигадло Н Д *Письма в ЖЭТФ* **99** 154 (2014); Kuzmicheva T E, Kuzmichev S A, Zhigadlo N D *JETP Lett.* **99** 136 (2014)
- Roslova M et al. *CrystEngComm* **16** 6919 (2014)
- Ponomarev Ya G et al. *Physica C* **243** 167 (1995)
- Aminov B A et al., in *Advances in Superconductivity V* (Eds Y Bando et al.) (Tokyo: Springer-Verlag, 1993) p. 1037
- Ponomarev Ya G et al. *Inst. Phys. Conf. Ser.* (167) 241 (2000)
- Пономарев Я Г *УФН* **172** 705 (2002); Ponomarev Ya G *Phys. Usp.* **45** 649 (2002)
- Nakamura H et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** 123712 (2009)
- Khlybov E P et al. *JETP Lett.* **90** 429 (2009); *JETP Lett.* **90** 387 (2009)
- Zhigadlo N D et al. *Phys. Rev. B* **82** 064517 (2010)
- Kondrat A et al. *Eur. Phys. J. B* **70** 461 (2009)
- Yanson I K et al. *Phys. Rev. B* **67** 024517 (2003)
- Wakimoto S et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** 074715 (2010)
- Shamoto S-I et al. *Phys. Rev. B* **82** 172508 (2010)
- Subedi A et al. *Phys. Rev. B* **78** 134514 (2008)
- Кузьмичев С А, Кузьмичева Т Е, Чесноков С Н *Письма в ЖЭТФ* **99** 339 (2014); Kuzmichev S A, Kuzmicheva T E, Tchesnokov S N *JETP Lett.* **99** 295 (2014)

PACS numbers: **74.25.-q**, **74.45.+c**, **74.70.-b**
DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408j.0897

Магнитные и транспортные свойства кристаллов железосодержащих сверхпроводников семейства 122

Ю.Ф. Ельцев, К.С. Перваков, В.А. Власенко, С.Ю. Гаврилкин, Е.П. Хлыбов, В.М. Пудалов

1. Введение

Сверхпроводники на основе железа, которые были открыты в 2008 г. [1–5], моментально стали предметом

Ю.Ф. Ельцев, С.Ю. Гаврилкин. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, РФ
E-mail: eltsev@sci.lebedev.ru

К.С. Перваков, В.А. Власенко. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, РФ;
Международная лаборатория сильных магнитных полей и низких температур, Вроцлав, Польша
Е.П. Хлыбов. Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, РФ;
Международная лаборатория сильных магнитных полей и низких температур, Вроцлав, Польша

В.М. Пудалов. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, РФ;
Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Московская обл., РФ

огромного интереса научного сообщества, заняв одно из ведущих мест в ряду наиболее актуальных направлений современной физики твёрдого тела [6, 7]. Нынешние темпы исследований железосодержащих сверхпроводников могут быть сравнимы разве что с темпами развития работ по изучению купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) в первые годы после их открытия [8]. Железосодержащие сверхпроводники, в число которых к настоящему времени входит более ста различных по химическому составу соединений, представляют собой совершенно новый класс сверхпроводящих материалов, кристаллическая решётка которых содержит ионы 3d-металлов (Fe, Co, Ni), хорошо известных своими ферромагнитными свойствами. По этой причине *a priori* нельзя исключить возможность отличного от традиционного электрон-фононного механизма сверхпроводящего спаривания электронов в данных соединениях. Характерной особенностью всех железосодержащих сверхпроводников является наличие в их кристаллической структуре слоёв Fe–As в случае пниктидов либо слоёв Fe–Se в случае халькогенидов. Максимальная на сегодня критическая температура сверхпроводящего перехода T_c сверхпроводников на основе железа достигает 56 К [9] для соединения $Gd_{1-x}Th_xFeAsO$, что уступает только значениям T_c купратных ВТСП. Данное обстоятельство, несомненно, позволяет отнести сверхпроводники на основе железа также к классу ВТСП.

Интерес к сверхпроводникам на основе железа определяется рядом фундаментальных и прикладных аспектов: во-первых, открытие сверхпроводимости в данных соединениях разрушило иллюзию того, что высокотемпературная сверхпроводимость является свойством исключительно купратных сверхпроводников; во-вторых, можно предполагать, что исследование механизма ВТСП в железосодержащих сверхпроводниках откроет пути к нахождению более эффективного механизма спаривания по сравнению с таковым в купратах и, соответственно, более высоких значений T_c , что даёт новую надежду на достижение сверхпроводимости при комнатных температурах; в-третьих, теоретические и экспериментальные исследования зонной структуры железосодержащих сверхпроводников дают значения скорости электронов на поверхности Ферми v_F порядка 10^6 – 10^7 см s^{-1} , что в свою очередь означает малую длину когерентности $\xi \sim \hbar v_F / 2\pi k_B T_c \sim 1$ – 3 нм и, соответственно, высокие значения верхнего критического поля $H_{c2} = \phi_0 / 2\pi \xi^2$, превосходящие 100 Тл [10]. Кроме того, на основании экспериментальных данных можно сделать однозначный вывод о том, что плотность критического тока в железосодержащих сверхпроводниках при температурах жидкого гелия превосходит 10^6 А $см^{-2}$ [11–13], что сопоставимо с таковой в купратных сверхпроводниках. Железосодержащие сверхпроводники также обладают гораздо меньшей анизотропией H_{c2} и J_c по сравнению с анизотропией H_{c2} и J_c в купратных сверхпроводниках [11], а межзёрненные границы, в отличие от межзёрненных границ в купратных ВТСП, являются "прозрачными" для сверхпроводящего тока и не ограничивают его величину [14]. Все перечисленные моменты позволяют сделать вывод о широких перспективах практического использования недавно открытых железосодержащих сверхпроводников, в первую очередь в "сильноточных" применениях в высоких магнитных полях.

Данный доклад не направлен на анализ существующих представлений об особенностях зонной структуры железосодержащих сверхпроводников, возможных меха-

низмах сверхпроводящего спаривания, типах симметрии параметра порядка, проявлениях многощелевой сверхпроводимости. Мы сосредоточим внимание на полученных нами и другими исследовательскими группами результатах исследований магнитотранспортных свойств и токонесущей способности железосодержащих сверхпроводников, в частности кристаллов $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$, в зависимости от температуры, магнитного поля и типа легирования, что представляет значительный интерес с точки зрения оценки возможности практических применений данных материалов.

2. Образцы и методы измерений

Монокристаллы $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$, оптимально допированные, имеют меньшие величины T_c и $H_{c2}(0)$ по сравнению с таковыми соединений $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ и $BaFe_{2-x}Co_xAs_2$ семейства 122 с максимальной критической температурой, достигающей 40 и 25 К соответственно [14]. Возможно, по этой причине кристаллы семейства 122 с примесью Ni изучались не так интенсивно, как соединения семейства 122, легированные K и Co. С другой стороны, относительно низкие величины T_c и $H_{c2}(0)$ дают хорошую возможность для исследования сверхпроводящих токонесущих свойств и пиннинга вихрей в монокристаллах $BaFe_2As_2$, легированных Ni, в широком температурном диапазоне, покрывающем почти всю область фазовой диаграммы этого соединения.

Монокристаллы $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ выращивались с помощью метода раствор–расплав с использованием в качестве флюса шихты, содержащей компоненты, входящие в состав кристаллов, в данном случае FeAs. Исходные компоненты (Ba, FeAs и NiAs) высокой чистоты общей массой ≈ 5 г смешивались в молярной пропорции $1:5(1-x):5x$, помещались в корундовый тигель объёмом 3 $см^3$, запаивались в кварцевые трубки с остаточным давлением аргона 0,2 атм и загружались в трубчатую печь. На следующем этапе ампула нагревалась до температуры 1200 °С, выдерживалась при этой температуре в течение 24 ч для гомогенизации расплава и затем охлаждалась до 1070 °С со скоростью 2 °С $ч^{-1}$. При достижении данной температуры ампула вместе с печью из вертикального положения поворачивалась на 90°–95° для слива жидкого флюса из тигля. Далее ампула с кристаллами охлаждалась до комнатной температуры вместе с печью. В итоге в тигле образовывались практически свободные от флюса кристаллы размерами до 4×2 мм² в плоскости *ab* и толщиной несколько сотен микрон. Характеризация выращенных кристаллов с помощью рентгенофазового анализа показала отсутствие в них какой-либо побочной фазы.

Рисунок 1а, на котором видны только пики, соответствующие плоскостям $\{00l\}$, иллюстрирует данный вывод для образцов $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ ($x = 0,1$ и $x = 0,14$). Большей концентрации никеля в образце с $x = 0,14$ соответствует большее значение параметра решётки вдоль оси *c*. Понижение интенсивности рефлексов с возрастанием угла дифракции в образце с $x = 0,1$ может свидетельствовать о несколько неоднородном распределении никеля по объёму образца. Высокое качество монокристаллов $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ также подтверждается данными, приведёнными на рис. 1б, где показана температурная зависимость действительной, χ' , и мнимой, χ'' , частей магнитной восприимчивости для образца с $x = 0,1$, измеренная в магнитном поле величиной 0, 1, 5 и 9 Тл, приложенном вдоль оси *c*.

Видно, что в нулевом магнитном поле ширина сверхпроводящего перехода (оценённая по уровню 10–

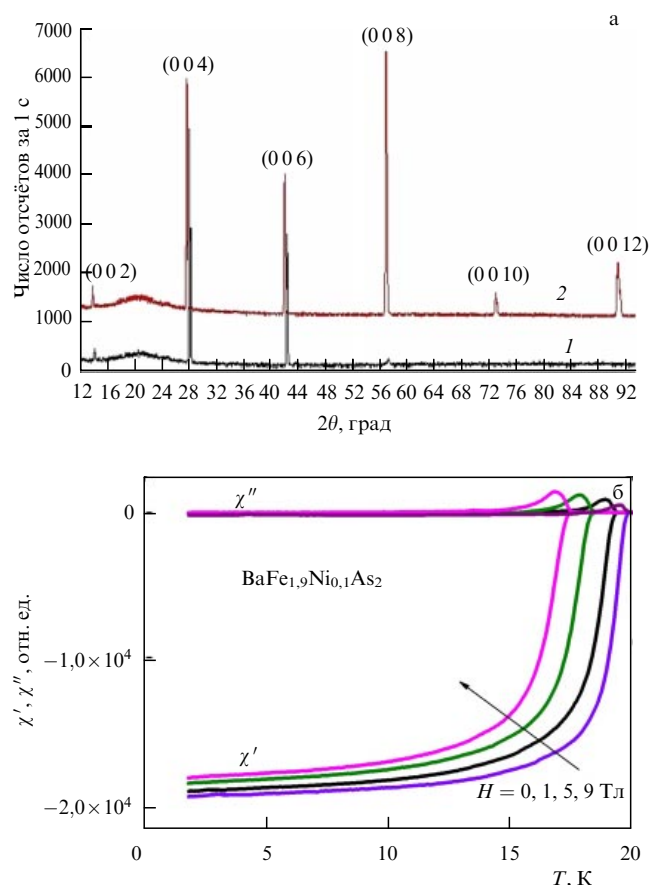


Рис. 1. (а) Результаты рентгенофазового анализа образцов BaFe_{1.9}Ni_{0.1}As₂ (1) и BaFe_{1.86}Ni_{0.14}As₂ (2). (б) Температурная зависимость действительной, χ' , и мнимой, χ'' , частей магнитной восприимчивости для образца BaFe_{1.9}Ni_{0.1}As₂ в магнитном поле 0, 1, 5 и 9 Тл, приложенном вдоль оси *c* [11].

90 %) составляет $\sim 1,5$ К, при этом с увеличением поля переход сдвигается в сторону более низких температур, практически не уширяясь. Величина T_c , определённая экстраполяцией линейной части перехода $\chi(T)$ к нулю, составила 19,5 К. Оценка производной верхнего критического поля по температуре даёт $dH_{c2}/dT \approx -4,2$ Тл К⁻¹. Из анализа аналогичных данных по $\chi'(T)$ для кристаллов BaFe_{1.86}Ni_{0.14}As₂ получены величины $T_c = 13$ К и $dH_{c2}/dT \approx -3,6$ Тл К⁻¹.

Для измерений магнитных и транспортных свойств из вырезанных кристаллов выкалывались образцы прямоугольной формы размером $\approx 2 \times (0,5-1,0) \times (0,1-0,2)$ мм³. Температурная зависимость магнитной восприимчивости измерялась на установке PPMS-9 (Physical Property Measurement System 9) (Quantum Design). Измерения кривых намагничивания проводились с помощью низкочастотного (3,6 Гц) вибрационного магнитометра с шаговым двигателем [15] в Международной лаборатории сильных магнитных полей и низких температур (г. Вроцлав, Польша). Типичная скорость развёртки магнитного поля составляла 20–90 Эс⁻¹.

3. Магнитотранспортные свойства кристаллов

BaFe_{2-x}Ni_xAs₂ ($x = 0,1$ и $x = 0,14$)

На рисунке 2а в качестве примера приведены температурные зависимости сопротивления $R(T)$ кристалла BaFe_{1.9}Ni_{0.1}As₂ в магнитных полях величиной до 9 Тл,

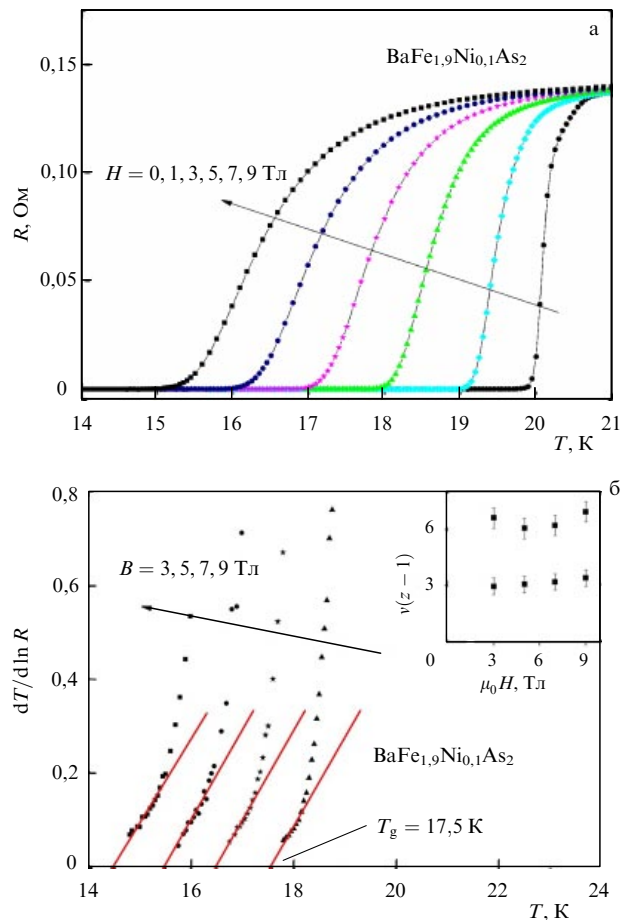


Рис. 2. (а) Температурная зависимость сопротивления кристалла BaFe_{1.9}Ni_{0.1}As₂ в различных магнитных полях, приложенных параллельно оси *c* кристалла. (б) Зависимость $R(T)$ образца BaFe_{1.9}Ni_{0.1}As₂ в различных магнитных полях (указанных на рисунке) в координатах Фогеля–Фулчера. Прямыми линиями показана линейная аппроксимация экспериментальных данных. Стрелка в нижней части рисунка отмечает полученную линейной экстраполяцией температуру плавления вихревого стекла T_g в магнитном поле 3 Тл. На вставке показана зависимость произведения критических экспонент $\nu(z-1)$ от магнитного поля. Верхний набор точек соответствует образцу BaFe_{1.9}Ni_{0.1}As₂, нижний — образцу BaFe_{1.86}Ni_{0.14}As₂.

приложенных параллельно оси *c*. Видно, что с возрастанием магнитного поля резистивный сверхпроводящий переход смещается в сторону низких температур, тогда как его ширина практически не изменяется. При малых сопротивлениях в области начала сверхпроводящего перехода температурная зависимость сопротивления хорошо описывается в рамках модели вихревого стекла [16]: $R(T) \sim (T - T_g)^{n(z-1)}$, где T_g — температура плавления вихревого стекла, n и z — статическая и динамическая критические экспоненты. Этот результат проиллюстрирован на рис. 2б, где зависимости $R(T)$ построены в координатах Фогеля–Фулчера. Видно, что в начальной части сверхпроводящего перехода $(d \ln R / dT)^{-1}$ линейно зависит от температуры. При этом прямые $(d \ln R / dT)^{-1}$ как функции температуры экстраполируются к температуре плавления (рис. 2б). Отметим также, что, как видно из вставки к рис. 2б, наклон прямых $(d \ln R / dT)^{-1}$ как функция T не зависит от величины приложенного магнитного поля, что также согласуется с моделью вихревого стекла [16]. Аналогичные данные получены и для

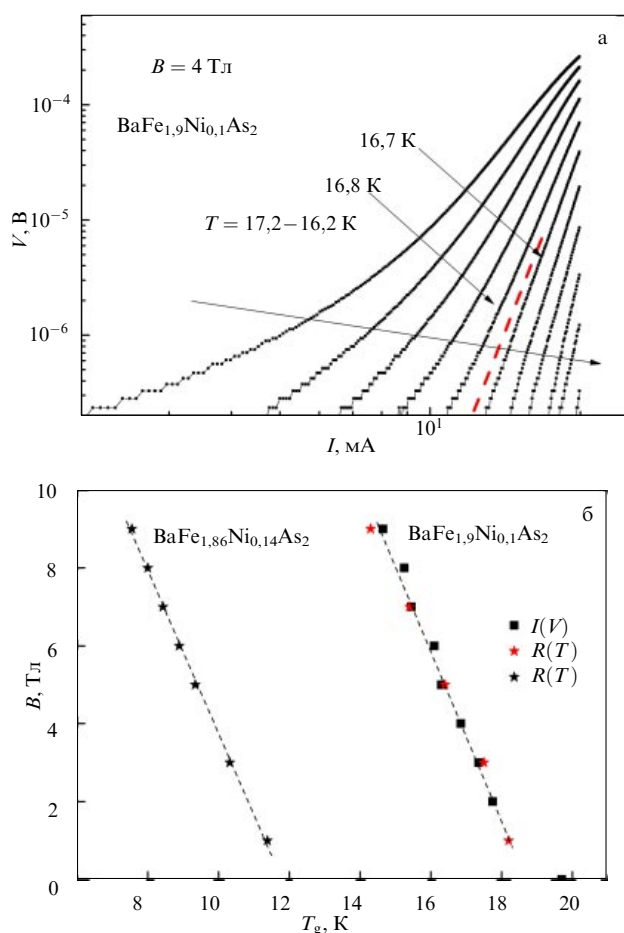


Рис. 3. (а) Вольт-амперные характеристики кристалла $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ в магнитном поле 4 Тл при различных температурах с шагом 0,1 К. Штриховая прямая соответствует температуре плавления вихревого стекла $T_g = 16,75$ К. (б) Линия плавления вихревого стекла $T_g(H)$ для кристаллов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ ($x = 0,1$ и $x = 0,14$). Звёзды соответствуют данным, полученным из измерений $R(T)$, квадраты — данным, полученным из измерений ВАХ.

кристаллов $\text{BaFe}_{1.86}\text{Ni}_{0.14}\text{As}_2$ с той лишь разницей, что температуры плавления вихревого стекла T_g имеют меньшие значения.

Ещё одним свидетельством в пользу применимости модели вихревого стекла для описания магнитотранспортных свойств кристаллов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ являются результаты измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ). Согласно модели вихревого стекла [16] положительная кривизна ВАХ в двойной логарифмической шкале указывает на состояние жидкого вихревого стекла, тогда как отрицательная кривизна ВАХ отражает вихревое стекло в твёрдой фазе с отличным от нуля критическим током. Прямая линия ВАХ в двойных логарифмических координатах соответствует переходу вихревой системы из твёрдого состояния в жидкое.

На рисунке 3а в качестве примера мы приводим результаты измерения ВАХ для кристалла $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ в магнитном поле величиной 4 Тл при различных температурах с шагом 0,1 К. Из рисунка отчётливо видно, что при $T_g = 16,75$ К происходит смена кривизны ВАХ с положительной на отрицательную. Аналогичные результаты получены и для других величин приложенного магнитного поля.

Таким образом, на основании полученных данных можно сделать вывод о том, что магнитотранспортные

свойства кристаллов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ хорошо описываются моделью вихревого стекла. Дополнительной иллюстрацией этого вывода служит рис. 3б, где мы приводим зависимости T_g от магнитного поля для кристаллов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ ($x = 0,1$ и $x = 0,14$), полученные из измерений $R(T)$ в различных магнитных полях, а также вольт-амперных характеристик в фиксированном магнитном поле при различных температурах. Отчётливо видно, что два независимых метода определения T_g дают прекрасно согласующиеся между собой результаты.

4. Магнитные свойства кристаллов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ ($x = 0,1$ и $x = 0,14$) и особенности зависимости плотности критического тока от магнитного поля

На рисунке 4 мы приводим данные измерений объёмной изотермической необратимой намагниченности кристаллов $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ и $\text{BaFe}_{1.86}\text{Ni}_{0.14}\text{As}_2$, $M(H)$ в зависимости от магнитного поля, приложенного параллельно оси c кристалла (рис. 4а, б) и параллельно плоскости ab (рис. 4в, г) при различных температурах, указанных на рисунке. Отчётливо видна симметрия кривых по отношению к оси ординат. В хорошем согласии с ранее публиковавшимися данными кривые $M(H)$ также демонстрируют резкий пик вблизи нулевого магнитного поля. Кроме того, для монокристалла $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ наблюдается широкий второй пик $J_c(H)$ для обеих ориентаций магнитного поля, тогда как для образца $\text{BaFe}_{1.86}\text{Ni}_{0.14}\text{As}_2$ второй пик отсутствует. С увеличением температуры положение второго пика сдвигается в сторону более низких магнитных полей. Отметим, что по поводу природы второго пика до сих пор не существует единого мнения.

На основании представленных на рис. 4 данных можно рассчитать плотность критического тока в исследованных кристаллах, используя хорошо известное выражение $J_c = 20\Delta M/a(1 - a/3b)$, полученное в рамках модели критического состояния Бина [17, 18], где a и b ($b > a$) — размеры кристалла в плоскости, перпендикулярной приложенному магнитному полю. В качестве примера на рис. 5 показана рассчитанная плотность критического тока для кристалла $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ в зависимости от поля, приложенного вдоль оси c (рис. 5а) и параллельно плоскости ab (рис. 5б), при различных температурах. Как и ожидалось, в соответствии с данными, представленными на рис. 4, при всех исследовавшихся в эксперименте температурах зависимость $J_c(H)$ является немонотонной с широким пиком, сдвигающимся в сторону низких полей при увеличении температуры. При этом значение J_c , полученное при низких температурах, превышает 10^6 А см⁻², что находится на верхней границе ранее опубликованных данных о плотности критического тока в монокристаллах семейства 122 [14, 19–26].

Анализ зависимости нормированной силы пиннинга $f_p = F_p/F_p^{\max} = J_c(H)H/((J_c(H)H)_{\max})$ от нормированного магнитного поля $h = H/H_{c2}$ является мощным инструментом для изучения механизма пиннинга в сверхпроводниках второго рода. В случае железосодержащих соединений, так же как и в случае купратных ВТСП, необходимо учитывать, что область жидкого вихревого состояния занимает значительную часть магнитной фазовой диаграммы и, соответственно, разница между верхним критическим полем и полем необратимости составляет существенную величину. По этой причине представляется целесообразным использовать для нормировки приложенного магнитного поля вместо H_{c2}

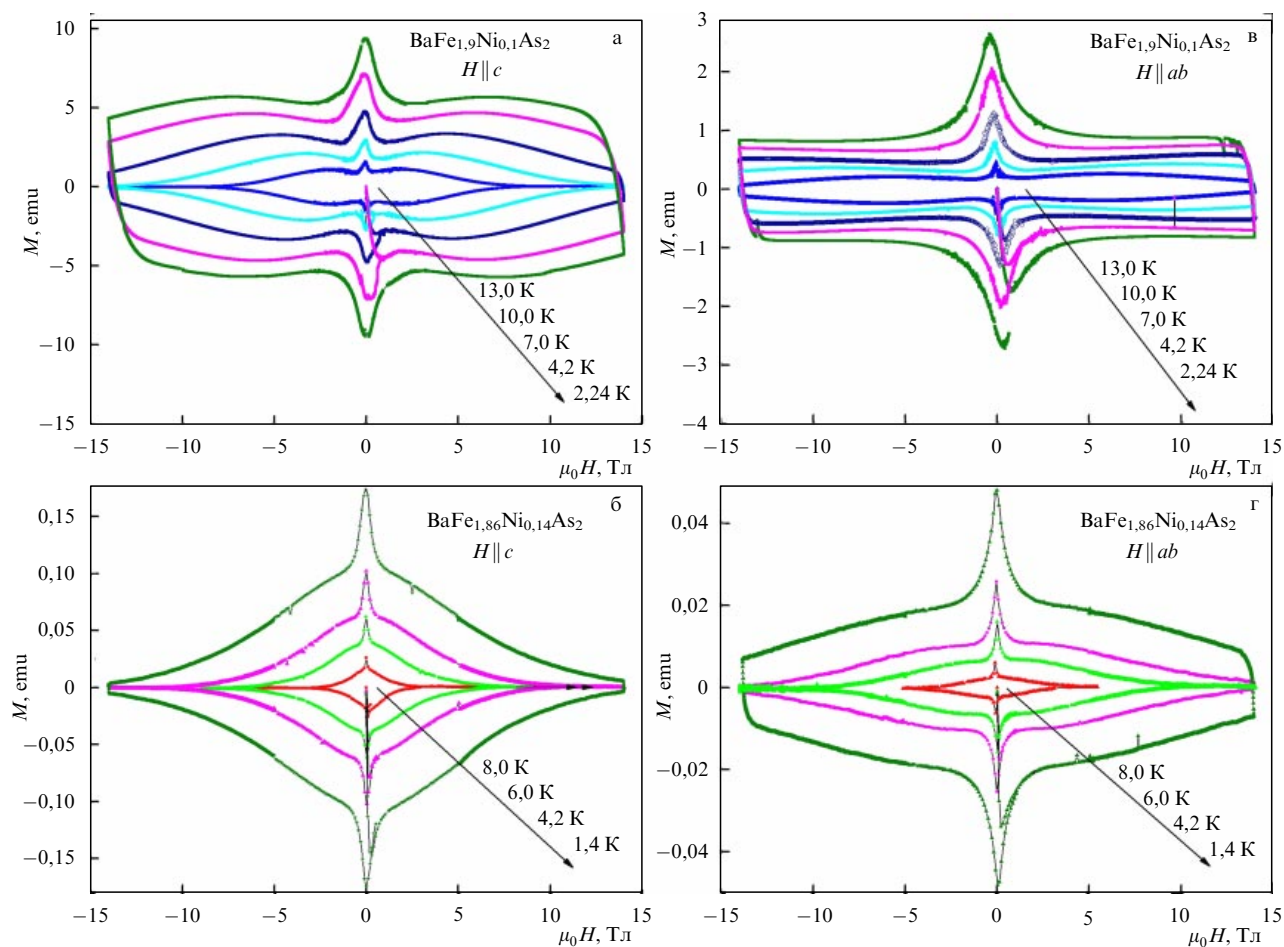


Рис. 4. Изотермическая необратимая намагниченность кристаллов $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ и $\text{BaFe}_{1.86}\text{Ni}_{0.14}\text{As}_2$ при различных (указанных на рисунке) температурах как функция магнитного поля в двух ориентациях магнитного поля: $H \parallel c$ и $H \parallel ab$ [11].

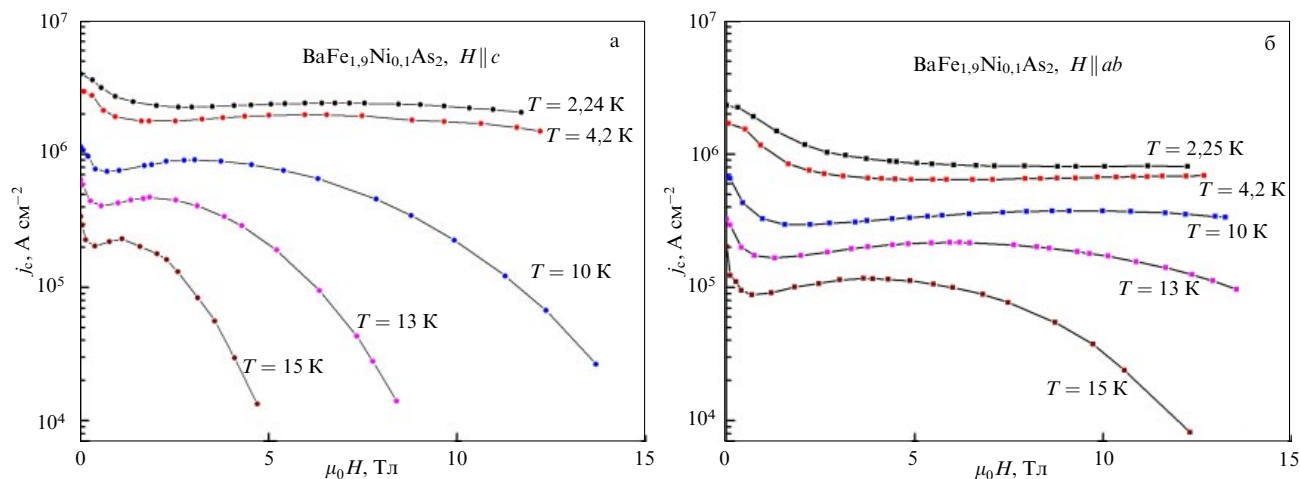


Рис. 5. Плотность критического тока для кристалла $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ в зависимости от магнитного поля, приложенного вдоль оси c (а) и параллельно плоскости ab (б), при различных температурах [11].

поле необратимости H_{irr} , при котором F_p и J_c обращаются в нуль. В модели Дью-Хьюза [27] в случае единого механизма пиннинга кривые $f_p(h)$, полученные при различных температурах, подчиняются скейлинговой зависимости $f_p \propto h^p(1-h)^q$ и должны укладываться на единую кривую с одинаковой позицией пика, дающей информацию о природе центров пиннинга. Позиция пика $h_{\text{max}} = 0,2$ предполагает пиннинг на границах зёрен, позиция пика $h_{\text{max}} = 0,33$ — пиннинг на нормальных

точечных дефектах размерами порядка длины когерентности ξ ; пик при $h_{\text{max}} = 0,7$ означает пиннинг, обусловленный пространственным изменением параметра порядка. В модели, разработанной Крамером [28], большая плотность сильных центров пиннинга даёт ярко выраженный пик при низких h , тогда как слабые и разреженные центры пиннинга будут давать пик $f_p(h)$ при более высоких h . На рисунке 6 представлена зависимость $f_p(h)$ для монокристаллов $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$, полу-

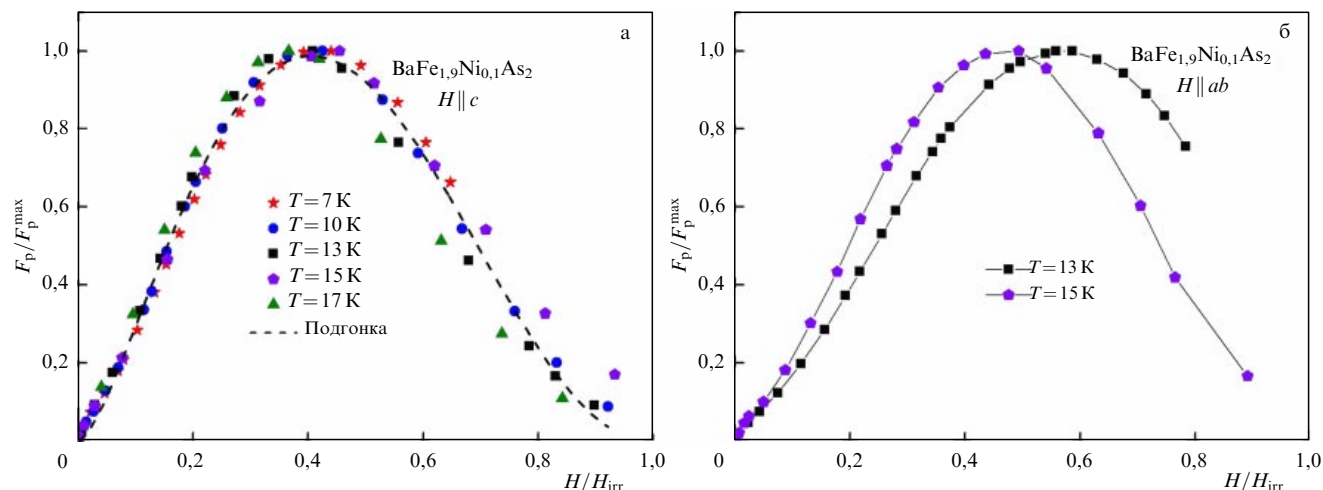


Рис. 6. Зависимость нормированной силы пиннинга $f_p = F_p/F_p^{\max} = J_c(H)H/(J_c(H)H)_{\max}$ от нормированного магнитного поля $h = H/H_{\text{irr}}$ для монокристаллов $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$, полученная при различных температурах в ориентациях магнитного поля $H \parallel c$ (а) и $H \parallel ab$ (б) [11].

ченная при различных температурах в двух ориентациях магнитного поля, с использованием данных для $J_c(H)$ при соответствующих температурах из рис. 5. Поле необратимости H_{irr} оценено из данных, приведённых на рис. 4.

Как видно из рис. 6, в ориентации поля $H \parallel c$ все экспериментальные кривые $f_p(h)$ с учётом погрешности эксперимента ложатся на одну кривую, что предполагает единый механизм пиннинга (подобный результат получен и для образца $\text{BaFe}_{1.86}\text{Ni}_{0.14}\text{As}_2$ с большей концентрацией никеля). Скейлинг кривых $f_p(h)$ обнаружен в широком температурном диапазоне, 2–17 K, при этом кривая скейлинга хорошо описывается выражением $f_p(h) \sim h(1-h)^2$ с позицией пика $h_{\max} \approx 0,3-0,4$, что, в соответствии с моделью Дью-Хьюза [27], говорит о пиннинге на нормальных точечных дефектах. Наше наблюдение пиков при $h_{\max} = 0,3-0,4$ хорошо согласуется с другими экспериментами на кристаллах семейства 122 с дырочным и электронным допированием, в которых сообщалось о пиках со значениями h_{\max} 0,32, 0,37 и 0,43 [13, 24, 25]. Как видно из рис. 6, разительный контраст демонстрируют кривые $f_p(h)$, измеренные при $H \parallel ab$. В этом случае кривые $f_p(h)$ достигают максимума h_{\max} в разных точках, демонстрируя отсутствие скейлинга. Этот результат не выглядит удивительным, так как экранирующий ток при ориентации магнитного поля в плоскости ab состоит из двух компонентов: тока, текущего по направлению, параллельному плоскостям ab , и тока, направленного параллельно оси c . Эти два токовых компонента могут быть связаны с разными механизмами пиннинга с разной полевой и температурной зависимостью, что может объяснить отсутствие скейлинга.

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 13-02-01180). Авторы выражают благодарность В.П. Мартовицкому за проведение рентгенофазового анализа кристаллов $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ и $\text{BaFe}_{1.86}\text{Ni}_{0.14}\text{As}_2$. Измерения магнитных и транспортных свойств кристаллов железосодержа-

щих образцов семейства 122 были проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (ЦКП ФИАН) "Исследования сильнокоррелированных систем" (Москва) и Международной лаборатории сильных магнитных полей и низких температур (Вроцлав, Польша).

Список литературы

1. Kamihara Y et al. *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296 (2008)
2. Takahashi H et al. *Nature* **453** 376 (2008)
3. Zhi-An R et al. *Chinese Phys. Lett.* **25** 2215 (2008)
4. Rotter M, Tegel M, Johrendt D *Phys. Rev. Lett.* **101** 107006 (2008)
5. Wang X C et al. *Solid State Commun.* **148** 538 (2008)
6. Johnston D C *Adv. Phys.* **59** 803 (2010)
7. Paglione J, Greene R L *Nature Phys.* **6** 645 (2010)
8. U.S. Congress, Office of Technology Assessment, High-Temperature Superconductivity in Perspective, OTA-E-440 (Washington, DC: U.S. Government Printing Office, April 1990); <http://ota.fas.org/reports/9024.pdf>
9. Wang C et al. *Europhys. Lett.* **83** 67006 (2008)
10. Gurevich A *Rep. Prog. Phys.* **74** 124501 (2011)
11. Pervakov K S et al. *Supercond. Sci. Technol.* **26** 015008 (2013)
12. Pramanik A K et al. *J. Phys. Condens. Matter* **25** 495701 (2013)
13. Sun D L, Liu Y, Lin C T *Phys. Rev. B* **80** 144515 (2009)
14. Weiss J D et al. *Nature Mater.* **11** 682 (2012)
15. Nizhankovskii V I, Lugansky L B *Meas. Sci. Technol.* **18** 1533 (2007)
16. Fisher D S, Fisher M P A, Huse D A *Phys. Rev. B* **43** 130 (1991)
17. Bean C P *Phys. Rev. Lett.* **8** 250 (1962)
18. Bean C P *Rev. Mod. Phys.* **36** 31 (1964)
19. Fang L et al. *Phys. Rev. B* **84** 140504(R) (2011)
20. Shen B et al. *Phys. Rev. B* **81** 014503 (2010)
21. Haberkorn N et al. *Phys. Rev. B* **84** 094522 (2011)
22. Prozorov R et al. *Phys. Rev. B* **78** 224506 (2008)
23. Nakajima Y, Taen T, Tamegai T J. *Phys. Soc. Jpn.* **78** 023702 (2009)
24. Yamamoto A et al. *Appl. Phys. Lett.* **94** 062511 (2009)
25. Shahbazi M et al. *J. Appl. Phys.* **109** 07E151 (2011)
26. Wang X-L et al. *Phys. Rev. B* **82** 024525 (2010)
27. Dew-Hughes D *Philos. Mag.* **30** 293 (1974)
28. Kramer E J *J. Appl. Phys.* **44** 1360 (1973)