

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

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.gpad.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. Ельцов 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 Хосоном 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 купрата, 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 $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$ 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,

имеются 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 такое 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 фrustrации. 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

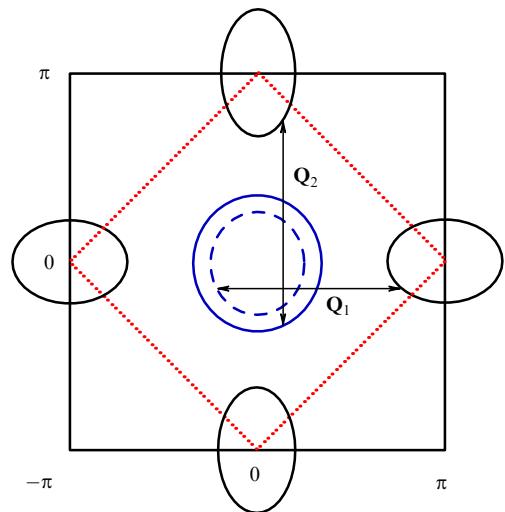


Рис. 1. Схематическая поверхность Ферми ферропниктидов на основе элементарной ячейки с одним атомом Fe и дырочными ферми-пакетами, расположенными около Г-точки зоны Бриллюэна, а также с двумя эллиптическими электронными пакетами, расположенными около точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$ зоны Бриллюэна. Волновые векторы Q_1 и 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 $Q_1 = (\pi, 0)$ или $Q_2 = (0, \pi)$. 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: $Q_1 = (\pi, 0)$ и $Q_2 = (0, \pi)$ — 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, Q_1 и Q_2 , остаётся открытый вопрос о том, каким образом выбирается только один из двух векторов упорядочения, наблюдавшихся 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 Q_i ,

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

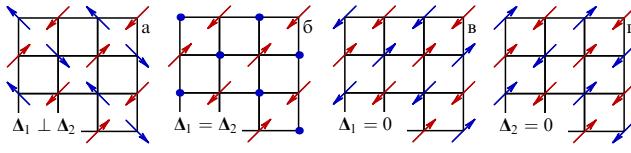


Рис. 2. Возможные конфигурации магнитного упорядочения в ферропниктидах [16].

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-контураторами, центрированными в Г-точке зоны Бриллюэна (зона α) и двумя эллиптическими пакетами вокруг точек $(\pm\pi, 0)$ и $(0, \pm\pi)$ (зона β) (см. рис. 1):

$$H_2 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \left[\varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1} \alpha_{1\mathbf{p}\sigma}^+ \alpha_{1\mathbf{p}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1} \beta_{1\mathbf{p}\sigma}^+ \beta_{1\mathbf{p}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2} \beta_{2\mathbf{p}\sigma}^+ \beta_{2\mathbf{p}\sigma} \right]. \quad (2)$$

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,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\alpha_1} &= -\frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m_1} + \mu, & \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_1} &= \frac{\hbar^2 p_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 p_y^2}{2m_y} - \mu, \\ \varepsilon_{\mathbf{p}}^{\beta_2} &= \frac{\hbar^2 p_x^2}{2m_y} + \frac{\hbar^2 p_y^2}{2m_x} - \mu, \end{aligned}$$

квазимпульсы α -фермионов отчитываются 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:

$$\begin{aligned} H_4 &= U_1 \sum \alpha_{1\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{1\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{2\mathbf{p}_2\sigma'}^- \alpha_{1\mathbf{p}_1\sigma} + \\ &+ \frac{U_3}{2} \sum \left(\beta_{1\mathbf{p}_3\sigma'}^+ \beta_{1\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \alpha_{1\mathbf{p}_2\sigma'}^- \alpha_{1\mathbf{p}_1\sigma} + \text{h.c.} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

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: $\Delta_1 \propto \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{1\mathbf{p}\delta}^+ \sigma_{\delta\gamma} \beta_{1\mathbf{p}\gamma} \rangle$ (где $\sigma_{\delta\gamma}$ — элементы матриц Паули) с волновым вектором $\mathbf{Q}_1 = (\pi, 0)$ и $\Delta_2 \propto \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{1\mathbf{p}\delta}^+ \sigma_{\delta\gamma} \beta_{2\mathbf{p}\gamma} \rangle$ 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 переопредел-

лить эти параметры как

$$\Delta_1^z = -U_{\text{SDW}} \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{1\mathbf{p}\uparrow}^+ \beta_{1\mathbf{p}\uparrow} \rangle, \quad (4)$$

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

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) диагонализуется тремя последовательными богоюбовскими 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 О(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:

$$\begin{aligned} H_4^{\text{ex}} &= U_6 \sum \beta_{1\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{2\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{2\mathbf{p}_2\sigma'}^- \beta_{1\mathbf{p}_1\sigma} + \\ &+ U_7 \sum \beta_{2\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{1\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{2\mathbf{p}_2\sigma'}^- \beta_{1\mathbf{p}_1\sigma} + \\ &+ \frac{U_8}{2} \sum \left(\beta_{1\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{2\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{2\mathbf{p}_2\sigma'}^- \beta_{1\mathbf{p}_1\sigma} + \text{h.c.} \right) + \\ &+ \frac{U_4}{2} \sum \left(\beta_{1\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{2\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{2\mathbf{p}_2\sigma'}^- \beta_{1\mathbf{p}_1\sigma} + \beta_{2\mathbf{p}_3\sigma}^+ \beta_{1\mathbf{p}_4\sigma'}^+ \beta_{2\mathbf{p}_2\sigma'}^- \beta_{1\mathbf{p}_1\sigma} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

(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:

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

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 учём 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

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

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 $A \ll \mu$ 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

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

где $S(\mathbf{p}) = (1/2) \sum a_{\mathbf{p}, z}^+ \sigma_{z\beta} a_{\mathbf{p} + \mathbf{p}, \beta}$, 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 $\Delta_1^z = -J_{\text{SDW}} \sum \langle \alpha_{1\mathbf{p}}^+ \beta_{1\mathbf{p}} \rangle$ и $\Delta_2^{z(x)} = -J_{\text{SDW}} \sum \langle \alpha_{1\mathbf{p}}^+ \beta_{2\mathbf{p}(1)} \rangle$. 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 $\mathbf{p} = (\pi, \pi)$ перемещивает 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

$$\begin{aligned} U_6^s &= J_1 - 3J_2, \quad U_7^s = -J_1 - 3J_2, \\ U_8^s &= 3(J_1 - J_2), \quad U_4^s = -3(J_1 + J_2). \end{aligned} \quad (11)$$

Подставляя эти коэффициенты в выражение для полной энергии, получаем

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

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 неупорядочена (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 (стрейлевский) 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: $H_{\text{eff}}^{(2)} = H^{\text{kin}} + H_{z_1\beta}^{(2)} + H_{z_2\beta}^{(2)}$, где

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

$$\begin{aligned} H_{z_1\beta}^{(2)} &= - \sum_{\mathbf{p}} [\alpha_{1\mathbf{p}\uparrow}^+ (\Delta_1^z \beta_{1\mathbf{p}\downarrow} + \Delta_1^x \beta_{2\mathbf{p}\downarrow}) - \\ &\quad - \alpha_{1\mathbf{p}\downarrow}^+ (\Delta_1^z \beta_{1\mathbf{p}\downarrow} - \Delta_2^x \beta_{2\mathbf{p}\uparrow})] + \text{h.c.}, \\ H_{z_2\beta}^{(2)} &= - \sum_{\mathbf{p}} [\alpha_{2\mathbf{p}\uparrow}^+ (\Delta_2^z \beta_{1\mathbf{p}\uparrow} + \Delta_2^x \beta_{2\mathbf{p}\downarrow}) - \\ &\quad - \alpha_{2\mathbf{p}\downarrow}^+ (\Delta_2^z \beta_{1\mathbf{p}\downarrow} - \Delta_2^x \beta_{2\mathbf{p}\uparrow})] + \text{h.c.}, \end{aligned} \quad (16)$$

Часть, включающая α_1 -дырки и параметры Δ_1^z и Δ_1^x , может быть диагонализована 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

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

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

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

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 $\Delta_{21}^z = -\Delta_2 \sin \theta$ и $\Delta_2^z = \Delta_2 \cos \theta$. 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 круговых дырочных и электронных пакетов состояние ВСП является диэлектрическим.

Выясним 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:

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

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 $E_{\text{gr}}(\theta) = E_0 + E_1 \sin^2(\theta)$. Минимум реализовался при значениях θ , равных нулю или $\pi/2$. Для того чтобы проверить, что произойдёт в четырёхзонной модели, мы распространяли 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 $\theta = 0$,

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

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:

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

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

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 $U_{\text{SDW}}^{(2)} > U_{\text{cr}}^{(1)}$. Если это происходит, то возникает ВСП с \mathbf{Q}_1 - и \mathbf{Q}_2 -компонентами. Эта ситуация иллюстрируется на рис. 3а, б. Согласующийся 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

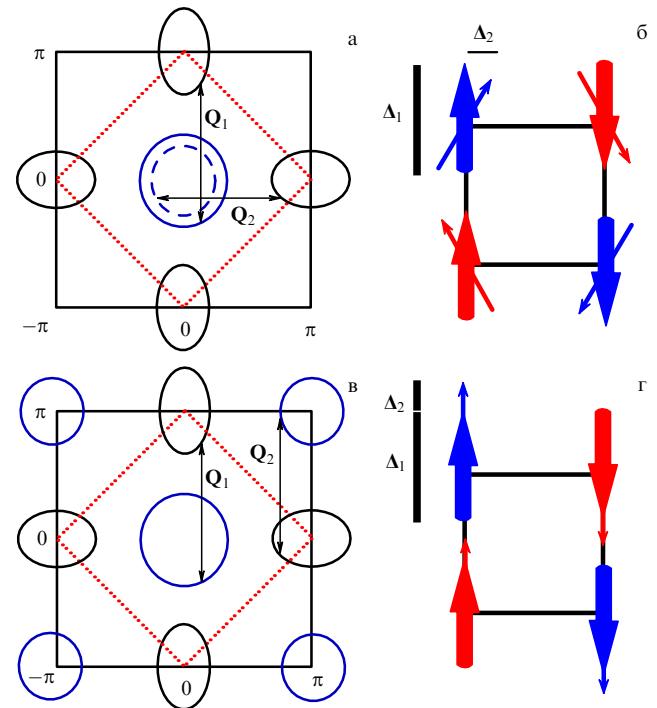


Рис. 3. Ферми-контуры и изменения в магнитной структуре, связанные с возникновением относительно малого Δ_2 (а, б) для пинктидов и (в, г) для $t-t'$ -модели с $t \ll t'$.

$\mathbf{Q}_1 = (0, \pi)$ (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 перемещиваться, 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 $\epsilon_p = 2t(\cos p_x + \cos p_y) + 4t' \cos p_x \cos p_y - \mu$ 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:

$$\Delta_1 = -\frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}, z}^+ \sigma_{z\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1, \beta} \rangle$$

с волновым вектором \mathbf{Q}_1 и

$$\Delta_2 = -\frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}, z}^+ \sigma_{z\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_2, \beta} \rangle$$

с вектором \mathbf{Q}_2 . Далее введём четыре типа фермионных операторов с квазипульсами 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 диагонализуется, как и ранее. Энергия основного состояния зависит только от суммы $\Delta_1^2 + \Delta_2^2$, т.е. имеется вырождение.

Рассмотрим теперь эффект взаимодействия между электронными зонами. Есть четыре типа электронно-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 привносит 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 пникидах, на основе работы [16]. Рассмотрена модель коллективизированных электронов с двумя дырочными ферми-поверхностями, центризованными около Г-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 перемешивается с электронными зонами при образовании состояния ВСП. При этом вторая дырочная зона остаётся бесщелевой, что и объясняет металлическое состояние пникидов 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-контуры, а также дисперсия зон вблизи уровня Ферми соответствуют экспериментальным данным.

Я выражают 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, Копаев Ю В *ФТТ* **6** 2791 (1964); Keldysh L V, Kopaev 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: пникиды 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. Пникиды 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