

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-контуры, 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 begin<sup>1</sup>.  
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  $\text{FeSe}$  [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  $T_{\text{SDW}}$ . В первом классе соединений железо находится в тетраэдрическом окружении атомов мышьяка или фосфора, во втором — атомов селена, теллура или серы. Пниктиды бывают однослойными: 1111 ( $\text{LaFeAsO}$ ,  $\text{LaFePO}$ ,  $\text{Sr}_2\text{VO}_3\text{FeAs}$  и т.д.) и 111 ( $\text{LiFeAs}$ ,  $\text{LiFeP}$  и др.), а также двухслойными, типа 122, содержащими два слоя  $\text{FeAs}$  на элементарную ячейку ( $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ ,  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  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  $\text{FeSe}$ ) и типа 122 ( $\text{KFe}_2\text{Se}_2$ ). 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-

<sup>1</sup> "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).

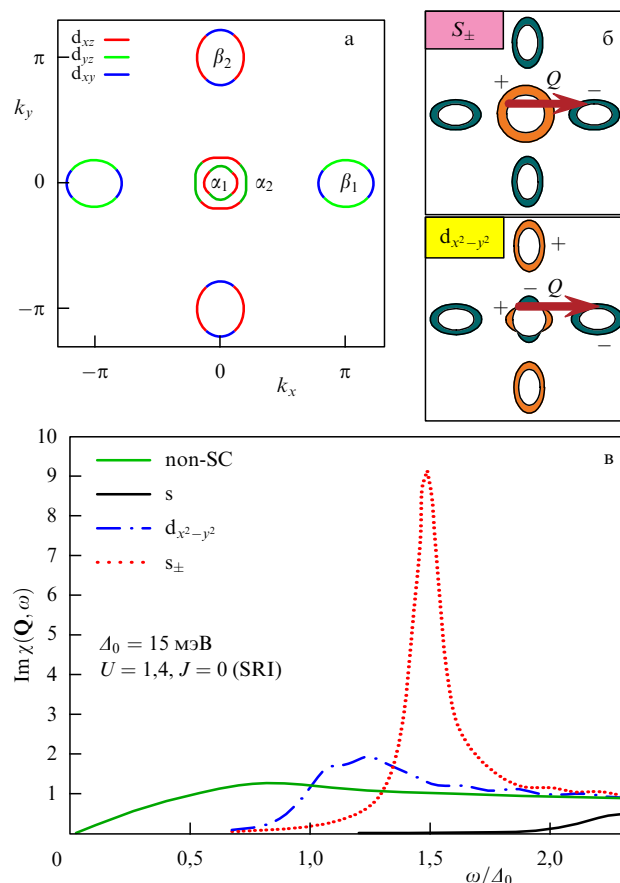
М.М. Коршунов. Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, РФ  
E-mail: mkor@iph.krasn.ru

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  $\mathbf{k}$ -пространстве приводит к возможности возникновения волны спиновой плотности (Spin-Density Wave — SDW) из-за нестинга между дырочной и электронной ферми-поверхностями на волновом векторе  $\mathbf{Q} = (\pi,0)$  или  $\mathbf{Q} = (0,\pi)$ . 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  $s_{\pm}$  и  $d_{x^2-y^2}$ -типа на ферми-поверхности, вектор  $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$  соединяет электронные и дырочные карманы. (в) Вычисленная в модели [23] частотная зависимость  $Im \chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}, \omega)$  в нормальном состоянии (non-SC) и в сверхпроводящем с симметриями  $s$  ( $s_{\pm}$ ),  $d_{x^2-y^2}$  и  $s_{\pm}$ . 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  $K_xFe_{2-y}Se_2$  и монослоям  $FeSe$  [4]. При увеличении концентрации дырок сначала возникает новый дырочный карман вокруг точки  $(\pi, \pi)$ , 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

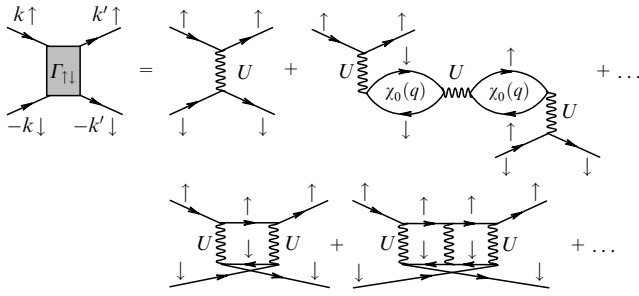


Рис. 2. Куперовская вершина  $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$  для синглетного сверхпроводящего состояния в RPA.

отталкивание (хаббардовское),  $n_{f\sigma}$  — оператор числа частиц на узле  $f$  со спином  $\sigma$ . 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  $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ ,  $\omega_n$  — 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  $\chi_s$  и  $\chi_c$  — 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  $\chi_s$  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,

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

где  $\bar{\sigma} = -\sigma$ ,  $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  — оператор рождения электрона с импульсом  $\mathbf{k}$  и спином  $\sigma$ , 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  $\Omega$  — мацубаровская частота,  $S_{ll'}^s(\mathbf{q}, \tau)$  —  $s$ -я компонента вектора спинового оператора с мацубаровским временем  $\tau$ ,

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

где  $\hat{\sigma}$  — вектор, составленный из матриц Паули  $\hat{\sigma}$ ,  $a_{\mathbf{p}l\alpha}^\dagger$  — оператор рождения электрона на орбитали  $l$  с импульсом  $\mathbf{p}$  и спином  $\alpha$ . 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  $\omega_n$  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  $\mu$ , 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 одноузловым 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  $n_{\text{orb}}$  — 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  $\Delta_0$  на угловую часть  $g_{\mathbf{k}}$ , то можно определить безразмерный параметр связи  $\lambda$  как результат решения задачи для собственных значений ( $\lambda$ ) и собственных векторов ( $g_{\mathbf{k}}$ ) [23]:

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

где  $v_{\text{Fk}}$  — скорость Ферми, контурный интеграл берётся по  $\mathbf{k}'_{\parallel}$ , принадлежащему  $\mathbf{v}$ -й поверхности Ферми, а зонный индекс  $\mu$  однозначно определяется тем, на какой поверхности Ферми лежит импульс  $\mathbf{k}$ . Положительные  $\lambda$  соответствуют притяжению, наибольшему из них будет отвечать максимальное значение  $T_c$ , т.е. наиболее выгодная симметрия спаривания и щели, определяемая  $g_{\mathbf{k}}$ . Выстроив  $\lambda$  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  $\eta$  соответствует группе симметрии параметра порядка,  $C_{mn}^{\eta}$  — коэффициенты, а функции  $\Psi$  представляют собой разложение по угловым гармоникам. Разложения, в зависимости от  $\eta$ , 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  $\Psi_m^{B_{1g}}(\mathbf{k}) = a_m^* \cos(2\phi_{\mathbf{k}}) + b_m^* \cos(6\phi_{\mathbf{k}}) + c_m^* \cos(10\phi_{\mathbf{k}}) + \dots$

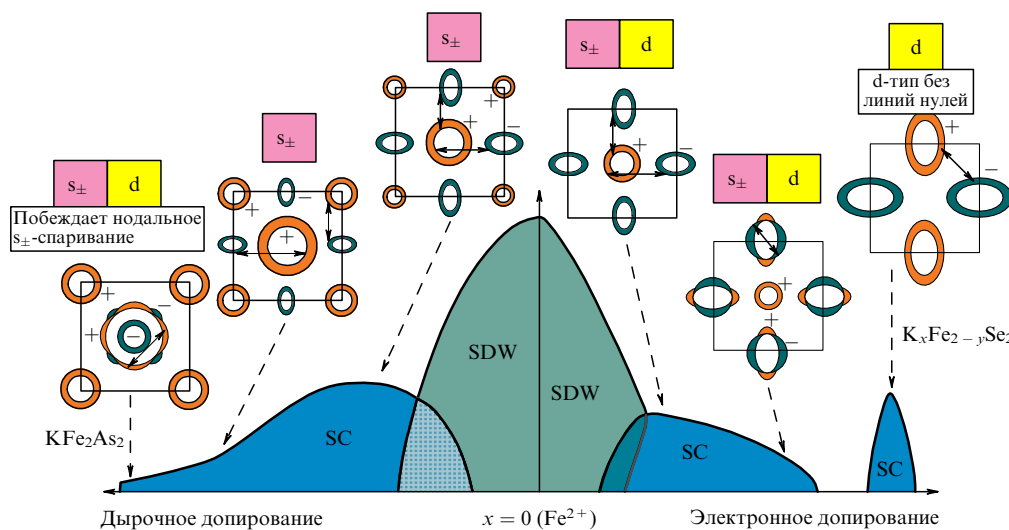
Теперь задачу можно свести к нахождению функции  $\tilde{\Gamma}_{ab}^{\eta}$ , где  $a$  и  $b$  соответствуют номерам ферми-поверхностей. Так, на рис. 1 это дырочные,  $\alpha_{1,2}$ , и электронные,  $\beta_{1,2}$ , карманы. Например, для расширенных  $s$ - и  $d_{x^2-y^2}$ -компонент можно записать

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

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,  $\phi_i$  и  $\theta_i$  — углы на дырочных и электронных ферми-поверхностях, отмеренные от оси  $k_x$ . Уравнение для параметра порядка тогда сводится к матричному уравнению  $4 \times 4$ , которое легко решить. Коэффициенты  $C_{mn}^{\eta}$  и все  $a$ ,  $b$  и т.д., входящие в разложение  $\Psi$ , 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  $\gamma$  вблизи точки  $(\pi, \pi)$  стабилизируется  $s_{\pm}$ -состояние без нулей на ферми-поверхности. В эту картину вносит вклад орбитальный характер зон. Так как карман  $\gamma$  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  $\alpha_2$  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  $\Omega_c$ , 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  $\chi_0$  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  $\Omega_c$ , 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  $\Omega_c$  [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.Г. 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 *ФНТ* **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  $\text{LnOFePn}$  (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  $\text{CuO}_2$ -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