

УДК 538.945:537.6

О ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ ФЕРРОПНИКТИДОВ

© 2022 г. А. Е. Каракозов^{а, *}, М. В. Магницкая^{а, **}

^аИнститут физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,
Москва, Троицк, 108840 Россия

*e-mail: chkara@rambler.ru

**e-mail: magnma@yandex.ru

Поступила в редакцию 25.05.2021 г.

После доработки 16.06.2021 г.

Принята к публикации 22.06.2021 г.

Рассмотрен модельный трехзонный сверхпроводник с двумя дырочными зонами, взаимодействующими с электронной зоной посредством спин-флуктуационного межзонного взаимодействия. Для различных заполнений зон и анизотропии спаривания исследована структура сверхпроводящего состояния такого сверхпроводника в зависимости от величины отношения межзонного взаимодействия к внутризонному, рассматриваемому как аналог допинговой зависимости в ферропниктидах. Показано, что такая модель хорошо описывает допинговую эволюцию свойств сверхпроводящих ферропниктидов, в частности, характерную трансформацию электронной теплоемкости при изменении допирования и аномальную температурную зависимость доминирующей сверхпроводящей щели для электронной зоны с наименьшим заполнением и сильной анизотропией внутризонного спаривания. С учетом поправок сильной связи предложенная модель может быть применена для количественной оценки корреляционных эффектов и величины нефононного вклада в сверхпроводимость ферропниктидов.

Ключевые слова: многозонная сверхпроводимость, железосодержащие сверхпроводники, допирование, электронная теплоемкость, корреляционные эффекты, анизотропия спаривания.

DOI: 10.31857/S1028096022010071

ВВЕДЕНИЕ

Коррелированные железосодержащие сверхпроводники (далее ферропниктиды) со спин-флуктуационным взаимодействием электронных (e) зон с центрами в точках $X = (\pi, 0)$ и $Y = (0, \pi)$ и дырочных (h) зон, центрированных в точке Γ , характеризуются универсальной фазовой диаграммой [1]. Область оптимального (с максимальной T_c) допирования $x = x_{\text{opt}}$ примерно совпадает с областью антиферромагнитного перехода и наиболее сильных межзонных антиферромагнитных флуктуаций, взаимодействие с которыми в нефононной теории сверхпроводимости считается доминирующим. Плотность доступных для сверхпроводящего спаривания состояний $\gamma_n(x)$ и связанное с ней внутризонное (фононное) спаривание также достигает максимума при x_{opt} , поэтому роль фононного и нефононного механизмов в увеличении T_c остается неясной. Построение более полной фазовой диаграммы структуры сверхпроводящего состояния ферропниктидов затрудняется большим разбросом данных вследствие того, что в них щели 4, 5 взаимодействующих сверхпроводящих конденсатов заполняют сравнительно не-

большой интервал энергий, сопоставимый с погрешностью большинства экспериментальных методик. По нашему мнению, для построения такой фазовой диаграммы пригодны только три, достоверно установленные универсальные для ферропниктидов, характеристики: а – упомянутая выше допинговая зависимость плотности состояний $\gamma_n(x)$; б – характерная трансформация нормированной электронной теплоемкости $c_s(x, t)$ (увеличение при промежуточных температурах и соответствующее сохранению энтропии уменьшение вблизи T_c по мере удаления от антиферромагнитного перехода [2–4]); в – сильное отклонение зависимости, доминирующей сверхпроводящей щели $\Delta_L(x_{\text{opt}}, t)$, от универсальной зависимости в модели БКШ в оптимально допированных ферропниктидах [5], которое не объясняется эффектами сильной связи [6]. Нами показано, что отмеченные универсальные свойства имеют место в модели двух h -зон, взаимодействующих с e -зоной с наименьшей плотностью состояний γ_e посредством спин-флуктуационного взаимодействия $\lambda_{\text{SF}}(x)$.

Предложенная нами модель позволяет на основании экспериментальных данных количе-

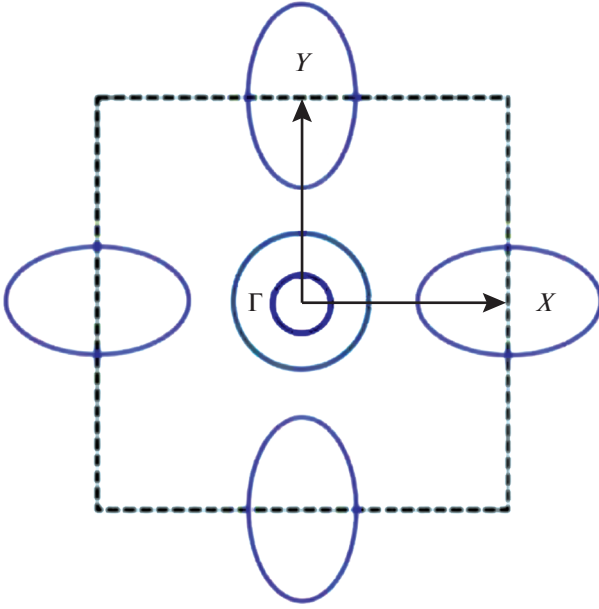


Рис. 1. Схематическая поверхность Ферми ферропниктидов.

ственно оценить величину корреляционных эффектов и их роль в сверхпроводящих ферропниктидах.

МНОГОЗОННЫЕ МОДЕЛИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ ФЕРРОПНИКТИДОВ

Основные методы исследования структуры сверхпроводящего состояния ферропниктидов — теории Бардина—Купера—Шриффера (БКШ) и Элиашберга [7, 8], которые отличаются моделями электрон-бозонного взаимодействия. В модели БКШ “спаривающее” электрон-бозонное взаимодействие $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)$ приближенно считается не зависящим от энергии бозонов ω для ω , меньших характерной бозонной частоты Ω_c , и равным 0 вне этой области. В ферропниктидах с анизотропной поверхностью Ферми (рис. 1) электрон-бозонное взаимодействие $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ в h -зонах считается постоянным, а в e -зоне для X и Y карманов имеет вид:

$$\begin{aligned} V_E(\varphi_{X/Y}, \varphi'_{X/Y}) &= \\ &= V_E(1 \pm d \cos 2\varphi_{X/Y})(1 \pm d \cos 2\varphi'_{X/Y}) = \quad (1) \\ &= V_E u(\varphi_{X/Y}) u(\varphi'_{X/Y}), \end{aligned}$$

где φ и φ' — полярные углы, отсчитываемые от $k_{x/y}$, а d — коэффициент анизотропии. (Средняя затравочная константа внутризонного спаривания в e -зоне определяется как $\lambda_{EE}^0(d) = V_E \gamma_E (1 + d^2/2)$). Межзонное e – h спин-флуктуационное взаимо-

действие считается постоянным: $V_{SF}(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}'_h) \approx V_{SF}$ [9, 10]. В теории Элиашберга электрон-бозонное взаимодействие $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)$ описывается не модельными константами, а зависящей от энергии бозонов ω (запаздывающей) спектральной функцией электрон-бозонного взаимодействия (функцией Элиашберга) $\alpha^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)F(\omega)$, где α^2 — квадрат матричного элемента взаимодействия, а $F(\omega)$ — плотность состояний бозонов [11, 12]. Теория Элиашберга учитывает как “спаривающие”, так и другие процессы рассеяния электронов на бозонах, приводящие к перенормировке затравочного взаимодействия и затуханию электронных возбуждений. При низких температурах это затухание мало, и результаты теории БКШ с учетом перенормировки модельных констант и теории Элиашберга формально совпадают [13].

Основная трудность исследования структуры сверхпроводящего состояния ферропниктидов заключается в большом количестве параметров теории (функций в теории Элиашберга) и значительном разбросе экспериментальных данных, поэтому возникает необходимость использования упрощенных вариантов теории, позволяющих, тем не менее, описать надежно установленные общие свойства ферропниктидов. В этом смысле преимущество имеют многозонные модели БКШ. Изотропные уравнения БКШ, определяющие сверхпроводящие щели $\Delta_J(T)$, имеют вид [14–16]:

$$\Delta_J(T) = \sum_J \lambda_{JJ} \Delta_J(T) I_J(T), \quad (2)$$

$$I_J(T) = \int_0^{\Omega_c} d\xi \operatorname{th}(E_J(\xi)/2T)/E_J(\xi), \quad (3)$$

$$E_J(\xi) = \sqrt{\xi^2 + \Delta_J^2(T)}, \quad (4)$$

где λ_{JJ} — перенормированные затравочные λ_{ij}^0 константы электрон-бозонного взаимодействия: $\lambda_{ij} = \lambda_{ij}^0/R_{ij}$, $R_{ij} = 1 + \sum_j \lambda_{ij}^0$. Наиболее простая (так называемая “минимальная”) модель учитывает только две взаимодействующие зоны (e и h). В этой модели, считая λ_{ij}^0 независимыми параметрами, удастся описать полученные из туннельных характеристик аномальные температурные зависимости $\Delta_L(x_{\text{opt}}, t) \gg \Delta_S(x_{\text{opt}}, t)$ слабым межзонным взаимодействием $\lambda_{SL}, \lambda_{LS} \ll \lambda_{LL}, \lambda_{SS}$ при условии, что плотность состояний в e -зоне много больше, чем в h -зоне ($\gamma_S \gg \gamma_L$) и $\lambda_{LL} \sim \lambda_{SS}$ [17]. Однако первое соотношение противоречит наблюдаемому в ферропниктидах монотонному уменьшению (несмотря на заполнение e -зоны при увеличении допинга) полной плотности состояний $\gamma_n(x)$ в передопированном режиме $x > x_{\text{opt}}$, указывающему на малость плотности состояний в e -зоне (т.е. $\gamma_S \ll \gamma_L$).

Второе же означает, что взаимодействие внутризонного спаривания в e -зоне, в отличие от h -зоны, очень мало ($V_{SS} \ll V_{LL}$), что довольно необычно. Поэтому, по нашему мнению, формальное применение минимальной модели для определения параметров сверхпроводящего спаривания в ферропниктидах не слишком надежно.

Для этой цели более пригодна модель двух h -зон, взаимодействующих с e -зоной с константами связи в стандартном БКШ-представлении $\lambda_{ij}^0 = V_{ij}N_j$. С учетом анизотропии внутризонного спаривания в e -зоне (1), e -щель в этой модели для $t = T/T_c$ записывается как $\Delta_E(\varphi, t) = \Delta_E(0)\delta_E(t)\beta(\varphi, t)$, $\beta(\varphi, t) = 1 + d_R(t)\cos 2\varphi$. Трехзонные уравнения для этого случая могут быть получены из изотропной системы (2) в виде:

$$D(d)I_1(t) = d_{23}\Delta_1(t) - \lambda_{33}\lambda_{12}\Delta_2(t)\langle u\beta(t) \rangle + \lambda_{12}\lambda_{23}\Delta_3(t), \quad D(d)I_2(t) = \lambda_{11}\lambda_{33}\Delta_2(t)\langle u\beta(t) \rangle - \lambda_{33}\lambda_{21}\Delta_1(t) - \lambda_{11}\lambda_{23}\Delta_3(t), \quad D(d)I_3(t) = d_{12}\Delta_3(t) - \lambda_{11}\lambda_{32}\Delta_2(t)\langle u\beta(t) \rangle + \lambda_{21}\lambda_{32}\Delta_1(t), \quad (5)$$

где индексы 1 и 3 обозначают h -зоны с большей и меньшей плотностями состояний ($\gamma_1 > \gamma_3$), а индекс 2 относится к параметрам e -зоны. $D(d)$ – детерминант системы (2) с заменой λ_{22} на $\lambda_{22}(d) = \lambda_{22}(1 + d^2/2)$, d_{12} и d_{23} – детерминанты подсистем 12 и 23, $\langle u\beta \rangle = (1 + dd_R(t)/2)$. Коэффициент анизотропии e -щели $d_R(t) = d\lambda_{11}\lambda_{22}(0)\lambda_{33}R(t)$, где $R(t)$ определяется выражением

$$R(t) = \left\{ 1 - (\lambda_{21}/\lambda_{11})\Delta_1(t)/\Delta_2(t) - (\lambda_{23}/\lambda_{33})\Delta_3(t)/\Delta_2(t) \right\} / D(0) \quad (6)$$

и из-за перенормировки межзонными взаимодействиями отличается от анизотропии электрон-бозонного взаимодействия d (уменьшается и зависит от температуры). Здесь

$$I_2(t) = \left\langle \int_0^{\Omega_c} d\xi u(\varphi)\beta(\varphi, t)\langle u\beta \rangle^{-1} \times \right. \quad (7)$$

$$\left. \times \text{th} \left(E_2(\xi, \varphi, t)/2t \right) / E_2(\xi, \varphi, t) \right\rangle,$$

$$E_2(\xi, \varphi, t) = \sqrt{\xi^2 + \delta_2^2(t)\beta^2(\varphi, t)}, \quad (8)$$

$$\langle F \rangle \Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(\varphi) d\varphi. \quad (9)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Трехзонная система уравнений (5) позволяет рассматривать возможные сценарии фазовой диаграммы, дополнять и уточнять их на основе экспериментальных данных [1] и модели нефононной сверхпроводимости [18]. А также, с уче-

том поправок сильной связи по предложенному нами способу [19], трехзонная система уравнений (5) может быть применена для анализа экспериментальных характеристик ферропниктидов. Допинговая зависимость $\Delta_j(x)$ и $T_c(x)$ в ферропниктидах связана с изменением внутризонного $\lambda_{ii}^0 \approx V(q \ll Q)\gamma_i(x)$ и межзонного спин-флуктуационного спаривания $\lambda_{i \neq j}^0 \approx V(Q, x)\gamma_j(x)$ на антиферромагнитных векторах $\mathbf{Q} = (\pi, 0), (0, \pi)$.

В ферропниктидах это электрон-фононное $V(q \ll Q) \approx u$ и спин-флуктуационное $V(Q, x) \approx g$ взаимодействия, одинаковые для всех зон. Для исследования основных особенностей фазовой диаграммы достаточно рассмотреть зависимость структуры сверхпроводящего состояния от величины $x = g/u$ – отношения межзонного взаимодействия g к внутризонному u , рассматриваемому как аналог допинговой зависимости в ферропниктидах, и различных заполнений зон и анизотропии спаривания. В этом случае в системе (5) достаточно ограничиться минимальным набором

параметров: $\lambda_{11}^0, \gamma_2/\gamma_1, \gamma_3/\gamma_1, d$, позволяющим вычислять нормированные физические величины, например, $c_s(x, t)$. Качественные особенности допинговой эволюции структуры сверхпроводящего состояния показаны на рис. 2–4. Согласно рис. 2, увеличение спин-флуктуационного взаимодействия увеличивает сверхпроводящей щели и приводит к сближению щелей $\Delta_1(0)$ и $\Delta_2(0)$, влияя главным образом на e -щель, как этого можно было ожидать непосредственно из вида системы (5). Анизотропия e -щели d_R при увеличении спин-флуктуационного взаимодействия уменьшается (рис. 3). Оба эти обстоятельства (сближе-

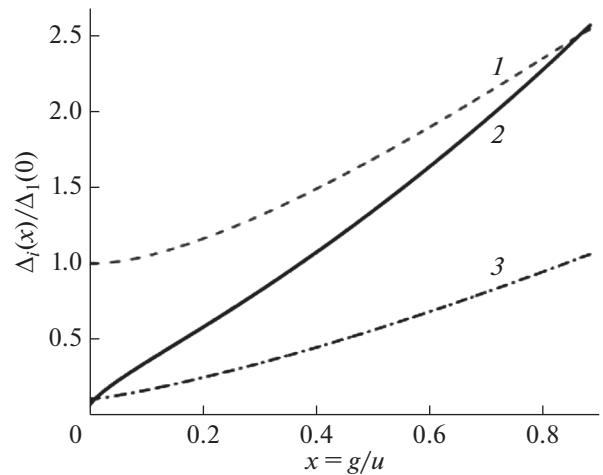


Рис. 2. Зависимость сверхпроводящих щелей Δ_i (кривые 1, 2, 3), нормированных на максимальную щель в отсутствие межзонного взаимодействия $\Delta_1(0)$, от отношения межзонного взаимодействия g к внутризонному u , $x = g/u$, при нулевой температуре.

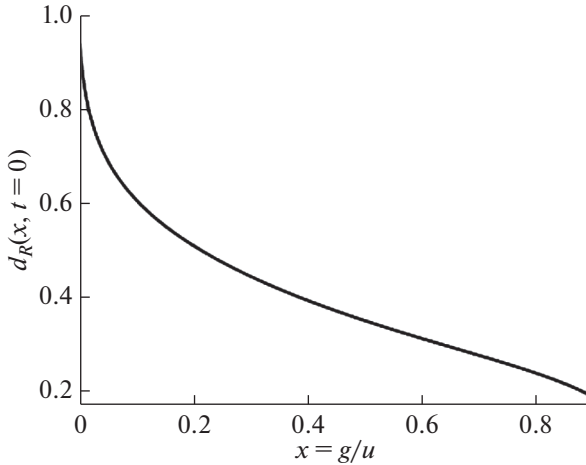


Рис. 3. Зависимость коэффициента анизотропии электронной щели $d_R(x)$ от отношения межзонного взаимодействия g к внутризонному u ($x = g/u$) при нулевой температуре.

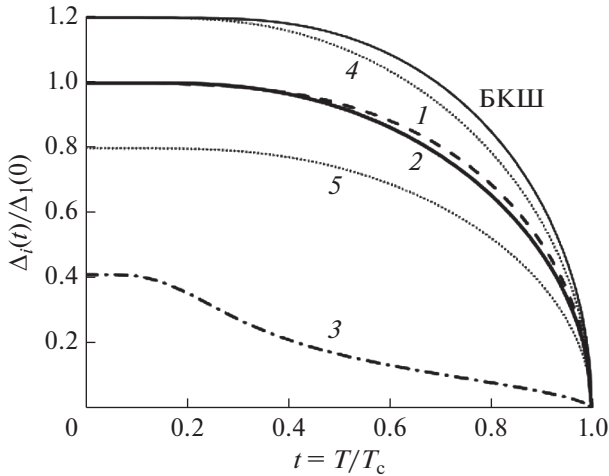


Рис. 4. Температурная зависимость нормированных сверхпроводящих щелей $\Delta_i(t)/\Delta_1(0)$ (кривые 1, 2, 3) и максимальной и минимальной электронной щелей $\Delta_{2\pm}(t) = \Delta_2(t)(1 \pm d_R(t))$ (кривые 4 и 5).

ние щелей Δ_1 и Δ_2 и уменьшение анизотропии) приводят к упомянутой во введении характерной трансформации вида $c_s(x, t)$ при изменении допирования (как это показано в работе [20]).

На рис. 4 представлена температурная зависимость сверхпроводящей щелей 1, 2, 3 при $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = 0.2$, $\gamma_3 = 0.3$ и достаточно сильном межзонном взаимодействии ($x \approx 0.9$, $\Delta_1(0) = \Delta_2(0)$, также рис. 2) и максимальная и минимальная e -щели $\Delta_{2\pm}(t) = \Delta_2(t)(1 \pm d_R(t))$ (кривые 4, 5). Отметим, что в трехзонном сверхпроводнике при конечных температурах зависимости обеих “больших” щелей $\Delta_1(t)$ и $\Delta_2(t)$ расположены ниже кривой $\Delta_{\text{БКШ}}(t)$ причем, как и можно было ожидать, из-за анизо-

тропии e -щели $d_R(t) \approx 20\%$ при конечных температурах $\Delta_2(t > 0) < \Delta_1(t > 0)$. В этой работе мы не ставили своей целью количественный анализ экспериментальных данных, так как для этого необходимо несколько другой подход [20]. Тем не менее, сравнивая зависимости, показанные на рис. 4, с данными анализа туннельных спектров ферропниктидов (рис. 7 в [17]), можно убедиться, что найденные из эксперимента “аномальные” температурные зависимости сверхпроводящих щелей (с сильным межзонным взаимодействием в зоне с доминирующей щелью и слабым в зоне с малой щелью) могут быть получены в трехзонной модели с реалистичным малым заполнением e -зоны, сильным межзонным спин-флуктуационным взаимодействием, анизотропным спариванием в e -зоне и внутризонными взаимодействиями $V(q \ll Q) \approx u$, одинаковыми для всех зон, как это обычно и предполагается.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для теоретического исследования фазовой диаграммы ферропниктидов предложена модель сверхпроводника с двумя дырочными зонами, взаимодействующими с электронной зоной с анизотропным спариванием посредством спин-флуктуационного межзонного взаимодействия. Показано, что такая модель с минимальным набором параметров качественно воспроизводит допинговую эволюцию свойств сверхпроводящих ферропниктидов. В частности, она описывает характерную трансформацию электронной теплоемкости $c_s(x, t)$ при изменении допинга и аномальную температурную зависимость доминирующей сверхпроводящей щели в случае электронной зоны с наименьшим заполнением и сильной анизотропией внутризонного спаривания. С учетом поправок сильной связи предложенная модель может быть применена для количественной оценки корреляционных эффектов, величины нефононного вклада и анализа механизма сверхпроводимости ферропниктидов.

Конфликт интересов: Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарны А.А. Михайловскому за ценные консультации. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 19-02-00509-а). М.В. Магницкая благодарна за поддержку численной обработки результатов Российскому научному фонду (грант РНФ 18-12-00438). Численные расчеты выполнены с использованием оборудования центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт” (<http://ckp.nrcki.ru/>),

вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН) и суперкомпьютера “Говорун” Многофункционального информационно-вычислительного комплекса ЛИТ ОИЯИ (Дубна).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lester C., Chu J.-H., Analytis J.G., Capelli S.C., Erickson A.S., Condon C.L., Toney M.F., Fisher I.R., Hayden S.M.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. № 14. P. 144523. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.144523>
2. *Hardy F., Burger P., Wolf T., Fisher R.A., Schweiss P., Adelman P., Heid R., Fromknecht R., Eder R., Ernst D., Löhneysen H.v., Meingast C.* // EPL. 2010. V. 91. № 4. P. 47008. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/91/47008>
3. *Tan G.T., Zheng P., Wang X.C., Chen Y., Zhang X., Luo J., Netherton T., Song Y., Dai P., Zhang C., Li S.* // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. № 14. P. 144512. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.144512>
4. *Campanini D., Diao Z., Fang L., Kwok W.-K., Welp U., Rydh A.* // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. № 24. P. 245142. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.245142>
5. *Кузьмичева Т.Е., Муратов А.В., Кузьмичев С.А., Садаков А.В., Алещенко Ю.А., Власенко В.А., Мартовичкий В.П., Перваков К.С., Ельцев Ю.Ф., Пудалов В.М.* // УФН. 2017. Т. 187. № 4. С. 450. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2016.10.038002>
6. *Adrian S.D., Wolf S.A., Dolgov O., Shulga S., Kresin V.Z.* // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. № 13. P. 7878. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.56.7878>
7. *Элиашберг Г.М.* // ЖЭТФ. 1960. Т. 38. № 3. С. 696. http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_011_03_0696.pdf
8. *Элиашберг Г.М.* // ЖЭТФ. 1961. Т. 39. № 5. С. 1437. http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_012_05_1000.pdf
9. *Morel P., Anderson P.W.* // Phys. Rev. 1962. V. 125. № 4. P. 1263. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.125.1263>
10. *McMillan W.L.* // Phys. Rev. 1968. V. 167. № 2. P. 331. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.167.331>
11. *Chubukov A.* // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2012. V. 3. № 1. P. 55. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-020911-125055>
12. *Hirschfeld P.J.* // C. R. Phys. 2016. V. 17. Iss. 1–2. P. 197. <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2015.10.002>
13. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости / Ред. Гинзбург В.Л., Киржниц Д.А. М.: Наука, 1977.
14. *Москаленко В.А.* // ФММ. 1959. Т. 8. № 4. С. 503.
15. *Suhl H., Matthias B.T., Walker L.R.* // Phys. Rev. Lett. 1959. V. 3. № 12. P. 552. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.3.552>
16. *Москаленко В.А., Палистрант М.Е., Вакалюк В.М.* // УФН. 1991. Т. 161. № 8. С. 155. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0161.199108f.0155>
17. *Кузьмичева Т.Е., Кузьмичев С.А., Михеев М.Г., Пономарёв Я.Г., Чесноков С.Н., Пудалов В.М., Хлыбов Е.П., Жигадло Н.Д.* // УФН. 2014. Т. 184. № 8. С. 888. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0184.201408i.0888>
18. *Коршунов М.М.* // УФН. 2014. Т. 184. № 8. С. 882. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0184.201408h.0882>
19. *Karakozov A.E., Zapf S., Gorshunov B., Ponomarev Ya.G., Magnitskaya M.V., Zhukova E., Prokhorov A.S., Anzin V.B., Haindl S.* // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. № 1. P. 014506. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.014506>
20. *Karakozov A.E., Magnitskaya M.V., Kadyrov L.S., Gorshunov B.P.* // Phys. Rev. B. 2019. V. 99. № 5. P. 054504 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.054504>

About the Phase Diagram of Ferropnictides

A. E. Karakozov^{1, *}, M. V. Magnitskaya^{1, **}¹Vereshchagin Institute of High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Troitsk, 108840 Russia*e-mail: chkara@rambler.ru**e-mail: magnma@yandex.ru

A model three-band superconductor is considered, in which two hole bands interact with an electron band through spin-fluctuation interband interaction. For different band fillings and pairing anisotropy, the structure of the superconducting state of such a superconductor is investigated as a function of the ratio of the interband to intraband interaction, considered as an analogue of the doping dependence in ferropnictides. Such a model is shown to describe well the doping evolution of the properties of superconducting ferropnictides, in particular, the characteristic transformation of the electronic specific heat with a change in doping and the anomalous temperature dependence of the dominant superconducting gap for the electron band with the lowest filling and strong anisotropy of intraband pairing. Taking into account the strong coupling corrections, the proposed model can be applied to quantitatively estimate the correlation effects and the magnitude of the non-phonon contribution to the superconductivity of ferropnictides.

Keywords: multiband superconductivity, iron-containing superconductors, doping, electronic specific heat, correlation effects, pairing anisotropy.