

УДК 538.945  
ББК 22.368.2  
И 398

Интернет-магазин

MAHES

<http://shop.rcd.ru>

- физика
- математика
- биология
- нефтегазовые технологии



Издание осуществлено при финансовой поддержке  
Российского фонда фундаментальных исследований  
по проекту № 10-02-07030.

**Изюмов Ю. А., Курмаев Э. З.**

Высокотемпературные сверхпроводники на основе FeAs-соединений. — 2-е изд., испр. и доп. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2010. — 336 с.

Анализируются физические свойства и электронные модели нового класса высокотемпературных сверхпроводников в слоистых соединениях на основе железа. Несмотря на различный химический состав и различие в кристаллической структуре, они имеют похожие физические свойства, обусловленные электронными носителями в FeAs-слоях и их взаимодействием с флуктуациями магнитного порядка. Исключительный интерес к ним объясняется перспективами практического применения. В монографии дается полная картина формирования их физических свойств на основе теоретических моделей и электронной структуры.

Книга рассчитана на широкий круг читателей: физиков, изучающих электронные свойства FeAs-соединений, химиков, синтезирующих эти соединения, и специалистов, занимающихся расчетами электронной структуры твердых тел. Она будет полезна не только исследователям, работающим в области сверхпроводимости и магнетизма, но также студентам, аспирантам и всем тем, кто хочет ознакомиться с этой актуальной областью физического материаловедения.

**ISBN 978-5-93972-805-8**

**ББК 22.368.2**

© Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, 2010

© НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010

<http://shop.rcd.ru>

<http://ics.org.ru>

# Оглавление

Список сокращений . . . . .	7
Предисловие . . . . .	8
Введение . . . . .	10
ГЛАВА 1. Соединения типа <b><i>ReOFeAs</i></b> . . . . .	13
1.1. Кристаллохимия и основные физические свойства допированных соединений . . . . .	13
1.1.1. Кристаллическая структура . . . . .	13
1.1.2. Электронный допинг . . . . .	14
1.1.3. Дырочное допирование . . . . .	16
1.1.4. Замещения в подрешетке Fe . . . . .	18
1.1.5. Температура сверхпроводящего перехода . . . . .	20
1.1.6. Критические поля . . . . .	21
1.1.7. Влияние давления на $T_c$ . . . . .	24
1.2. Магнитные свойства . . . . .	28
1.2.1. Магнитная структура . . . . .	28
1.2.2. Теоретическое объяснение магнитного дальнего порядка в <i>ReOFeAs</i> . . . . .	31
1.2.3. Фазовые диаграммы . . . . .	36
1.2.4. Магнитные флуктуации . . . . .	39
1.3. Электронная структура . . . . .	40
1.3.1. Соединения стехиометрического состава . . . . .	40
1.3.2. Роль магнитного упорядочения и допинга . . . . .	46
1.3.3. Экспериментальное исследование поверхности Ферми . . . . .	51
1.4. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка . . . . .	55
1.4.1. Экспериментальные методы определения параметра порядка . . . . .	55
1.4.2. Ядерный магнитный резонанс . . . . .	56
1.4.3. Андреевское отражение в точечном контакте . . . . .	60
1.4.4. Туннельная и фотоэмиссионная спектроскопия ( <i>STS</i> , <i>PES</i> , <i>ARPES</i> ) . . . . .	68

ГЛАВА 2. Соединения типа $AFe_2As_2$ ( $A = Ba, Sr, Ca$ ) . . . . .	71
2.1. Кристаллическая и электронная структура . . . . .	71
2.1.1. Кристаллическая структура . . . . .	71
2.1.2. <i>LDA</i> -расчеты электронной структуры . . . . .	72
2.1.3. Экспериментальные исследования поверхности Ферми . . . . .	78
2.1.4. Соединение $(Sr_3Sc_2O_5)Fe_2As_2$ и другие . . . . .	85
2.2. Сверхпроводимость . . . . .	89
2.2.1. Допирование . . . . .	89
2.2.2. Сосуществование сверхпроводимости и магнетизма . . . . .	95
2.2.3. Давление . . . . .	97
2.2.4. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка . . . . .	108
2.2.5. Измерения на джозефсоновских контактах . . . . .	115
2.2.6. Критические поля . . . . .	117
2.3. Магнетизм . . . . .	120
2.3.1. Стехиометрические соединения . . . . .	120
2.3.2. Допированные соединения . . . . .	124
2.3.3. Магнитные возбуждения . . . . .	127
ГЛАВА 3. Другие $FeAs$ -соединения . . . . .	132
3.1. Соединения типа $FeSe$ , $FeTe$ . . . . .	132
3.1.1. Сверхпроводящие свойства . . . . .	132
3.1.2. Необыкновенные магнитные свойства . . . . .	135
3.1.3. Электронная структура стехиометрических соединений . . . . .	139
3.1.4. Электронная структура допированных соединений . . . . .	143
3.1.5. Магнитная структура $FeTe$ . . . . .	145
3.2. Соединения типа $LiFeAs$ . . . . .	147
3.2.1. Сверхпроводимость . . . . .	147
3.2.2. Электронная структура . . . . .	149
3.3. Соединения типа $AFFeAs$ ( $A = Sr, Ca$ ) . . . . .	151
3.3.1. Основные экспериментальные факты . . . . .	151
3.3.2. Электронная структура . . . . .	154
ГЛАВА 4. Теоретические модели . . . . .	156
4.1. Общие свойства соединений разных классов $FeAs$ -систем и задачи теории . . . . .	156
4.1.1. Кристаллическая и магнитная структура . . . . .	156
4.1.2. Особенности электронной структуры . . . . .	159
4.1.3. Асимметрия электрон-дырочного допирования . . . . .	160
4.1.4. Проблемы симметрии сверхпроводящего параметра порядка . . . . .	163
4.1.5. Изотопический эффект . . . . .	165

4.2.	Роль электронных корреляций . . . . .	167
4.2.1.	Метод динамического среднего поля ( <i>DMFT</i> ) . . . . .	167
4.2.2.	<i>LDA + DMFT</i> -расчет для соединений <i>ReOFeAs</i> . . . . .	171
4.2.3.	<i>LDA + DMFT</i> -расчет в расширенном базисе . . . . .	175
4.2.4.	Сравнение с экспериментом . . . . .	180
4.3.	Минимальная двухорбитальная модель . . . . .	187
4.3.1.	Формулировка модели . . . . .	187
4.3.2.	Зонная структура спектра . . . . .	191
4.3.3.	Приближение среднего поля . . . . .	193
4.3.4.	Численный расчет малых кластеров . . . . .	196
4.4.	Мультиорбитальная модель . . . . .	199
4.4.1.	Формулировка модели . . . . .	199
4.4.2.	Уравнения для сверхпроводника в приближении обменных флуктуаций ( <i>FLEX</i> ) . . . . .	200
4.4.3.	Свойства сверхпроводников с $s^{\pm}$ -симметрией параметра порядка . . . . .	204
4.4.4.	Трехорбитальная модель . . . . .	209
4.5.	Детальный анализ 5-орбитальной модели . . . . .	213
4.5.1.	Гамильтониан модели . . . . .	213
4.5.2.	Спиновая и зарядовая восприимчивости . . . . .	215
4.5.3.	Спаривание электронов через спиновые флуктуации . . . . .	219
4.5.4.	Возможные симметрии сверхпроводящего параметра порядка . . . . .	222
4.6.	Предел слабого кулоновского взаимодействия . . . . .	227
4.6.1.	Ренорм-групповой анализ . . . . .	227
4.6.2.	Уравнения для сверхпроводящих и магнитных параметров порядка . . . . .	236
4.6.3.	Фазовая диаграмма модели . . . . .	240
4.6.4.	Особенности $s^{\pm}$ -сверхпроводящего состояния . . . . .	242
4.7.	Предел сильного кулоновского взаимодействия . . . . .	245
4.7.1.	$t$ - $J_1$ - $J_2$ -модель . . . . .	245
4.7.2.	Сверхпроводимость с различными параметрами порядка . . . . .	247
4.7.3.	Плотность состояний и дифференциальная туннельная проводимость . . . . .	250
4.7.4.	Модель Хаббарда с хундовским обменом . . . . .	253
4.8.	Магнитный дальний порядок и его флуктуации . . . . .	257
4.8.1.	Два подхода к проблеме . . . . .	257
4.8.2.	Коллективизированная модель . . . . .	260
4.8.3.	Локализованная модель. Спиновые волны . . . . .	265

---

4.8.4. Резонансная мода . . . . .	270
4.8.5. Объединенные модели . . . . .	278
4.8.6. FeAs-соединения — системы с умеренными электрон- ными корреляциями . . . . .	283
4.9. Орбитальное упорядочение . . . . .	286
4.9.1. Спин-орбитальная модель . . . . .	286
4.9.2. Фазовые диаграммы со спиновым и орбитальным упорядочением . . . . .	289
4.9.3. Спектр магнитных возбуждений . . . . .	291
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>294</b>
<b>Таблицы . . . . .</b>	<b>298</b>
<b>Литература . . . . .</b>	<b>303</b>