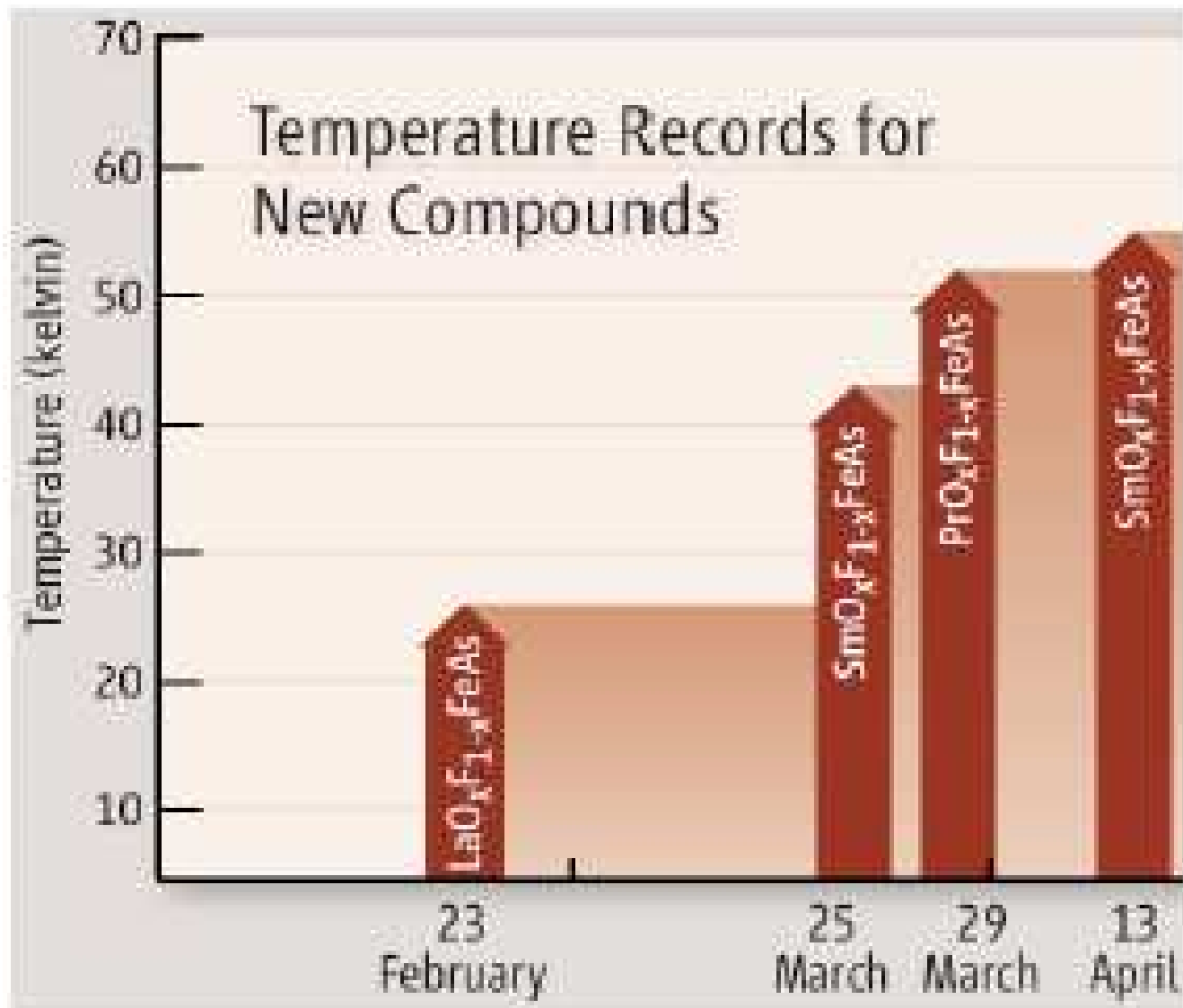
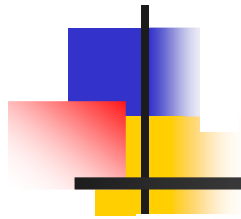


# Новый класс высокотемпературных сверхпроводников типа $\text{LaOFeAs}$

Ю.А.Изюмов

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*







# Открытие сверхпроводимости в ReOFeAs

J|A|C|S  
COMMUNICATIONS

Published on Web 02/23/2008

## Iron-Based Layered Superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ( $x = 0.05\text{--}0.12$ ) with $T_c = 26$ K

Yoichi Kamihara,<sup>\*,†</sup> Takumi Watanabe,<sup>‡</sup> Masahiro Hirano,<sup>†,§</sup> and Hideo Hosono<sup>†,‡,§</sup>

*ERATO-SORST, JST, Frontier Research Center, Tokyo Institute of Technology, Mail Box S2-13, Materials and Structures Laboratory, Tokyo Institute of Technology, Mail Box R3-1, and Frontier Research Center, Tokyo Institute of Technology, Mail Box S2-13, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama 226-8503, Japan*

Received January 9, 2008; E-mail: hosono@msl.titech.ac.jp

## Superconductivity at 55 K in iron-based F-doped layered quaternary compound $\text{Sm}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$

Authors: [Zhi-An Ren](#), [Wei Lu](#), [Jie Yang](#), [Wei Yi](#), [Xiao-Li Shen](#), [Zheng-Cai Li](#), [Guang-Can Che](#),  
[Xiao-Li Dong](#), [Li-Ling Sun](#), [Fang Zhou](#), [Zhong-Xian Zhao](#)

Chin. Phys. Lett. 25, 2215 (2008)

Cite as: [arXiv:0804.2053v2](#) [cond-mat.supr-con] submitted 13 April 2008

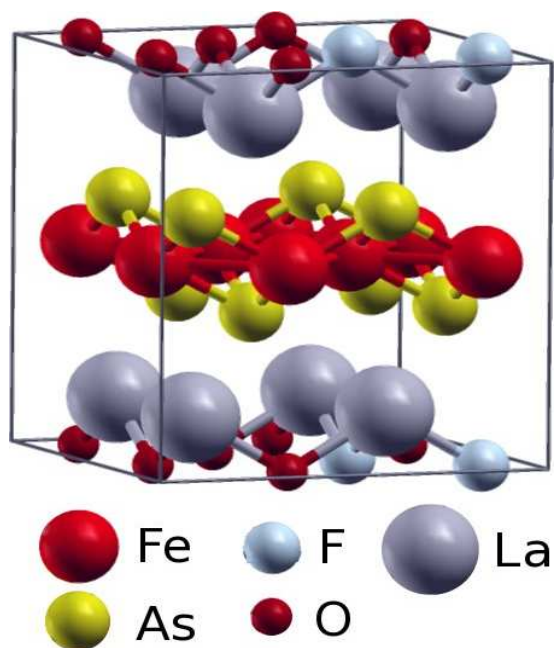
# Температуры сверхпроводящего перехода

Таблица 1. Максимальные температуры сверхпроводящего перехода, полученные при допировании соединений  $REOFeAs$

$RE$	$T_c$ , К	Литература	$a$ , Å*	$b$ , Å*
Y	46,5	[14]		
La	41	[15]	4,035	8,740
Ce	41	[4]	3,996	8,648
Pr	52	[5]	3,925	8,595
Nd	51,9	[16]	3,940	8,496
Sm	55	[6]	3,940	8,496
Gd	53,5	[17]		
Tb	48,5	[14]	3,898	8,404
Dy	52,2	[14]		
Ho	50,3	[14]		

\* Параметры решетки недотированных соединений.

# Кристаллическая структура LaOFeAs



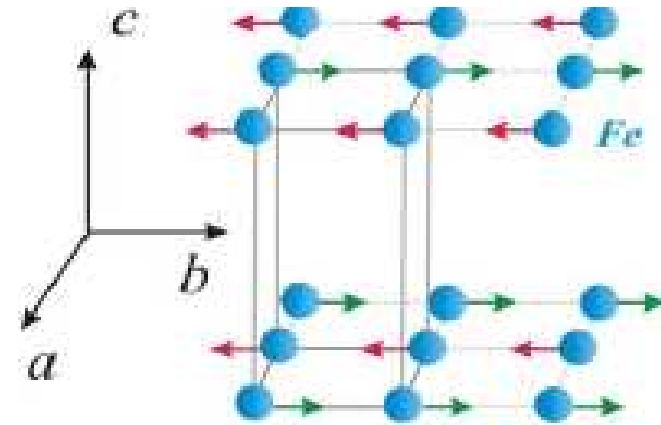
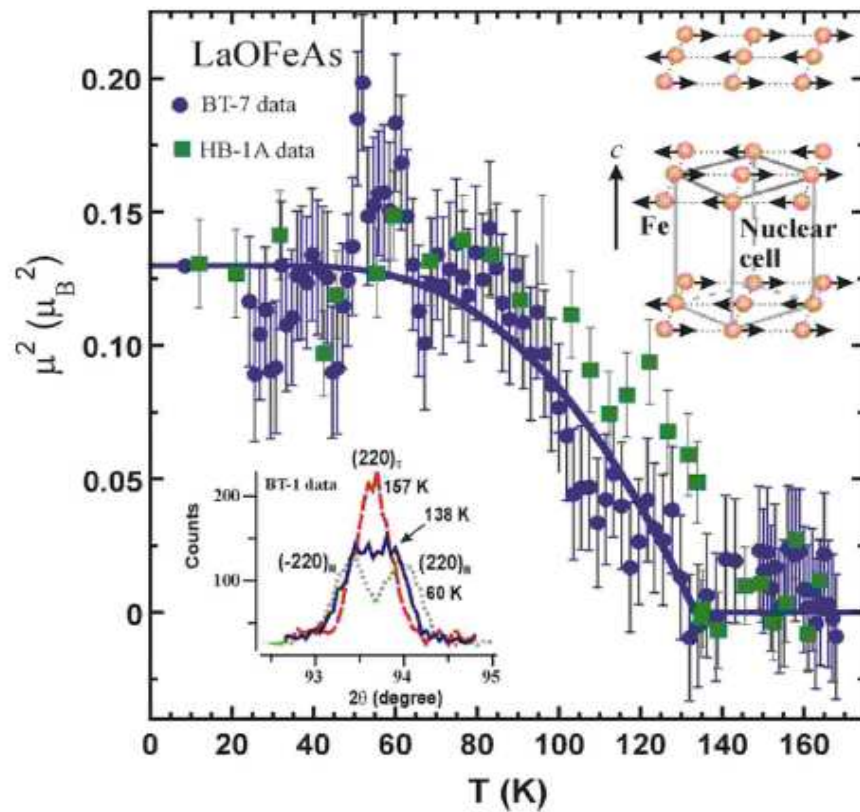
- тетрагональная структура  $P4/nmm$
- слои FeAs разделены слоями LaO
- ионы Fe окружены тетраэдрами As
- с увеличением атомного номера редкой земли постоянные решетки уменьшаются (лантаноидное сжатие)

# Магнитная структура ReOFeAs

## Нейтроны

T=155K  
P4/nmm—  
P112/n

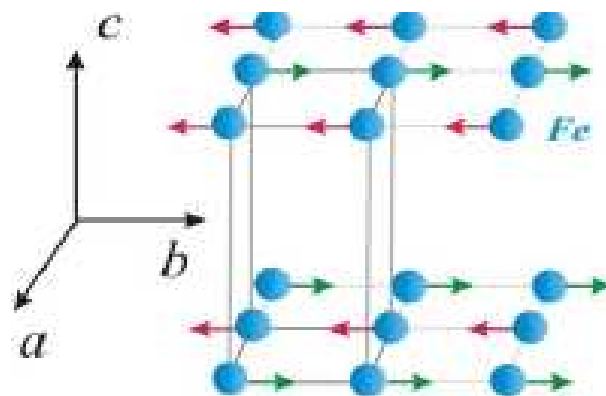
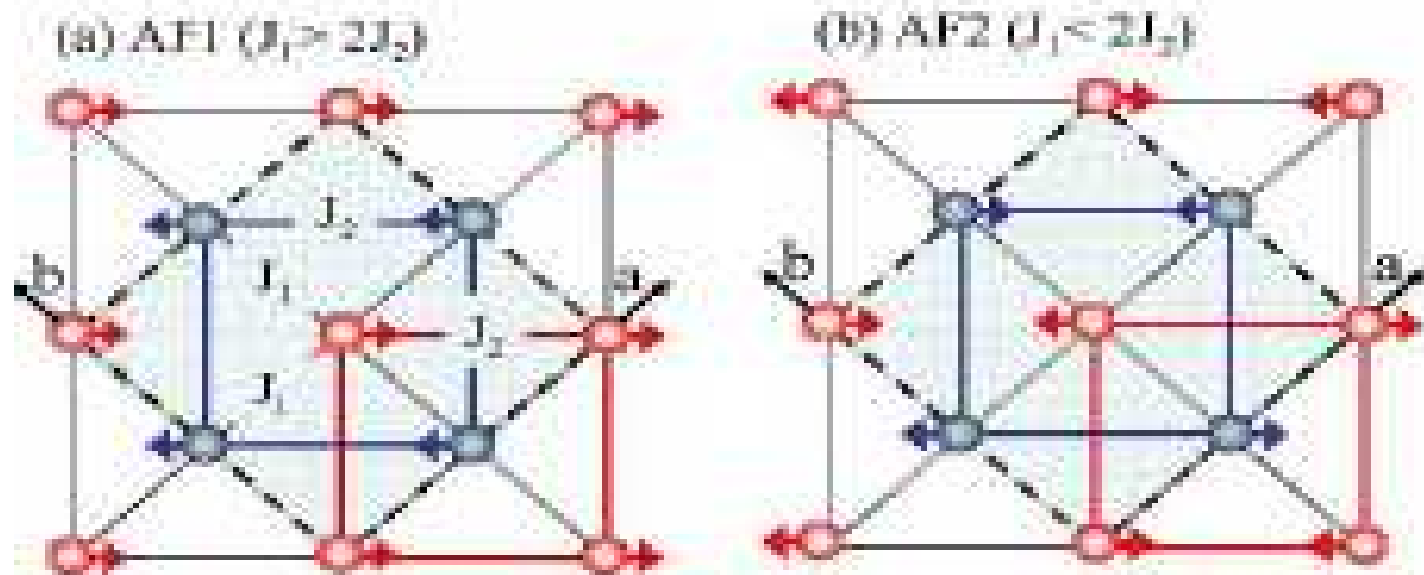
T=137K  
AFM



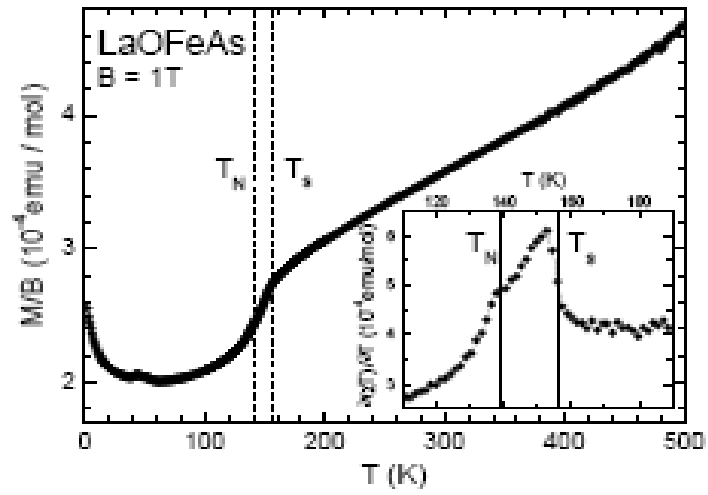
Магнитная структура одинакова для

LaOFeAs 0,36  
NdOFeAs 0,25  
CeOFeAs

# Обоснование SDW структуры

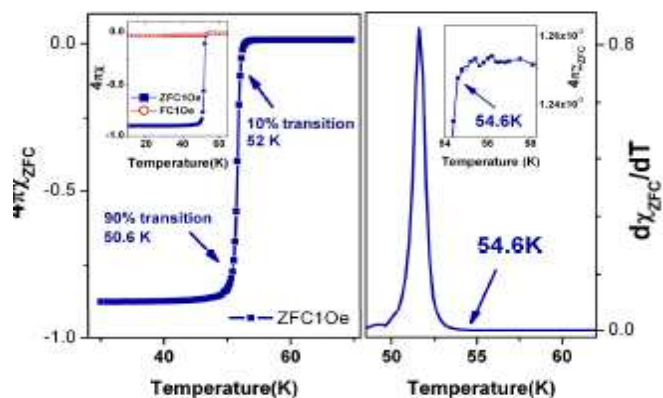
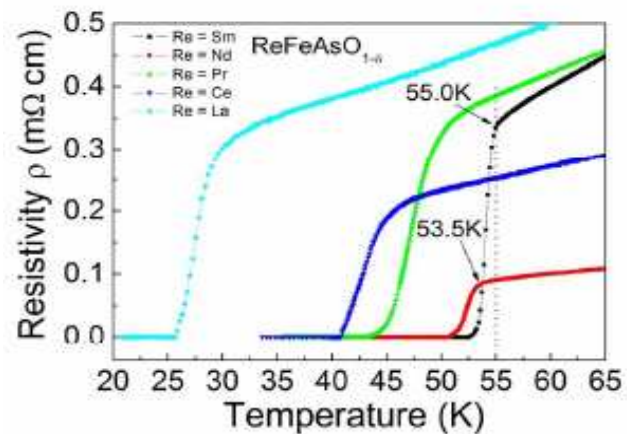
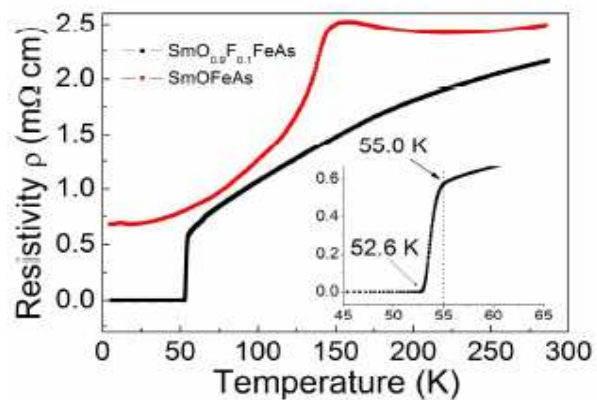


# Магнитная восприимчивость

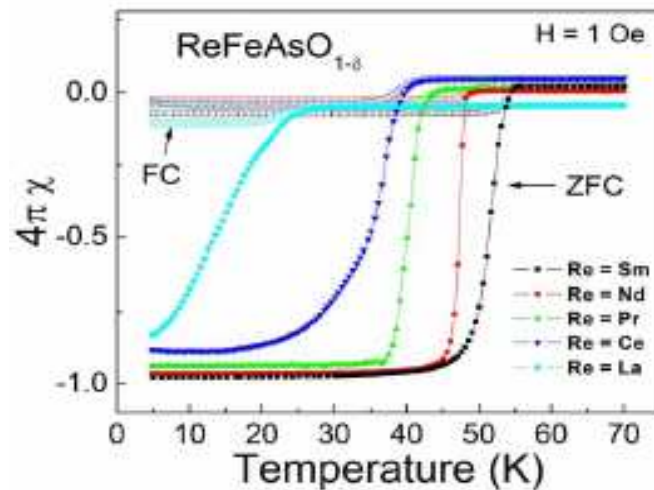




# Сверхпроводимость в системе ReFeAsO



Ren T-13



Ren T-8

# Допинг

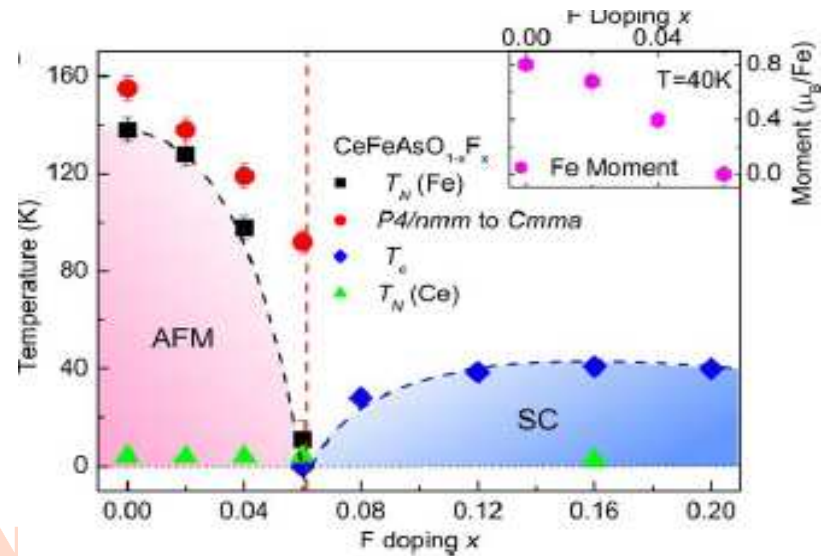
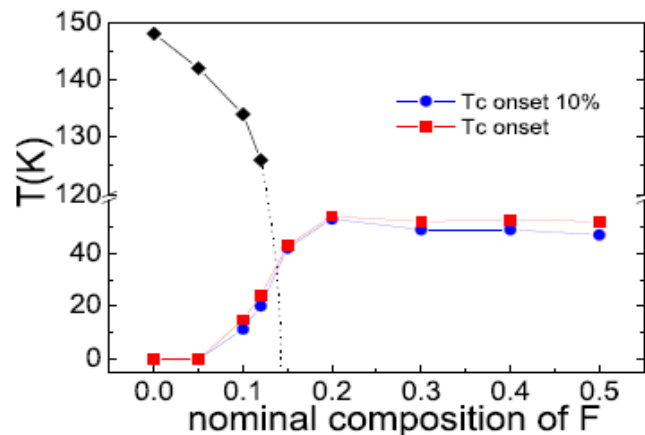
$\text{La}^{3+}\text{O}^{2-}\text{Fe}^{2+}\text{As}^{3-}$

## Электронный допинг

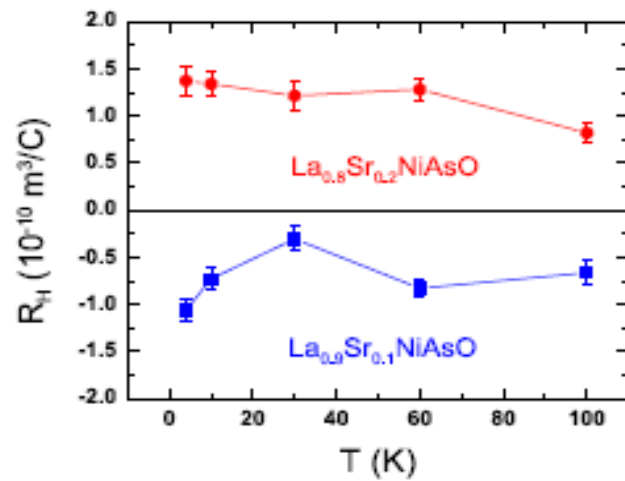
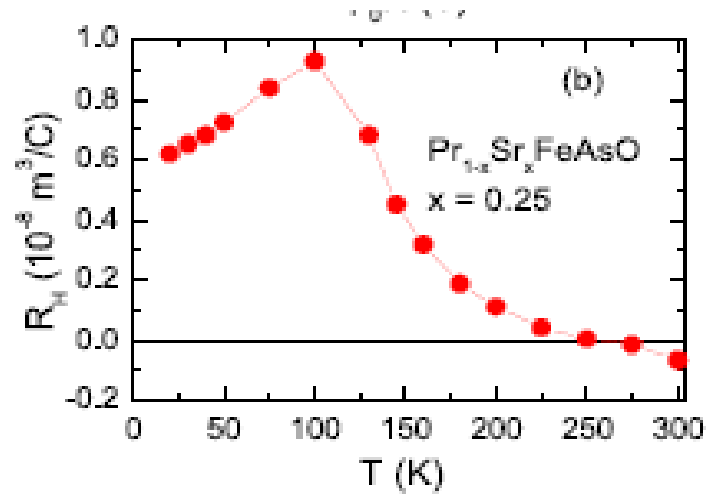
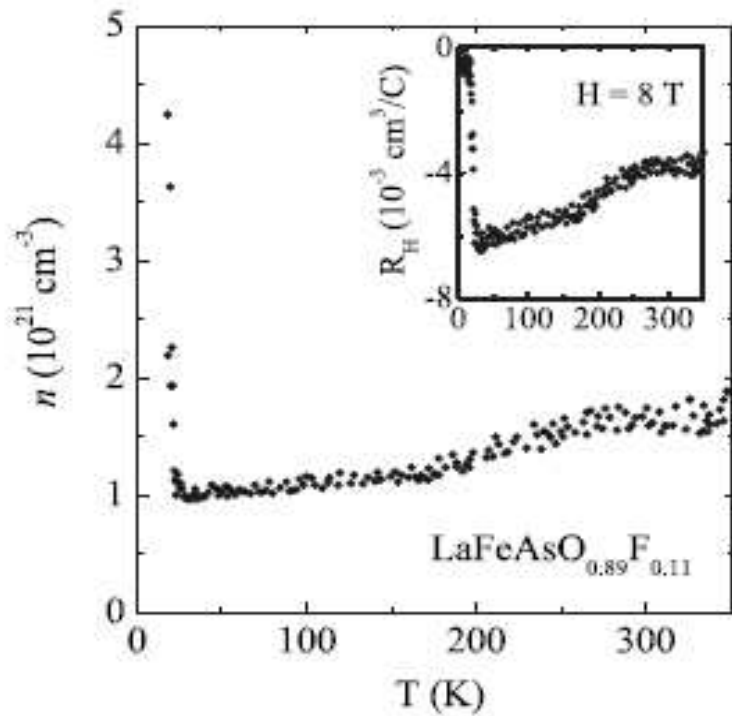
O—F ;	$\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$	$x=0,11$	$T_c=28\text{K}$
Дефицит O ;	$\text{ReO}_{1-y}\text{FeAs}$	Re=Sm	$T_c=55\text{K}$
$\text{Re}^{3+}\text{--Th}^{4+}$ ;	$\text{Gd}_{1-x}\text{Th}_x\text{OFeAs}$	$x=0,11$	$T_c=55\text{K}$

## Дырочный допинг

$\text{Re}^{3+}\text{--Sr}^{2+}$ ;	$\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{OFeAs}$	$x=0,13$	$T_c=25\text{K}$
La--K			



# Знак коэффициента Холла

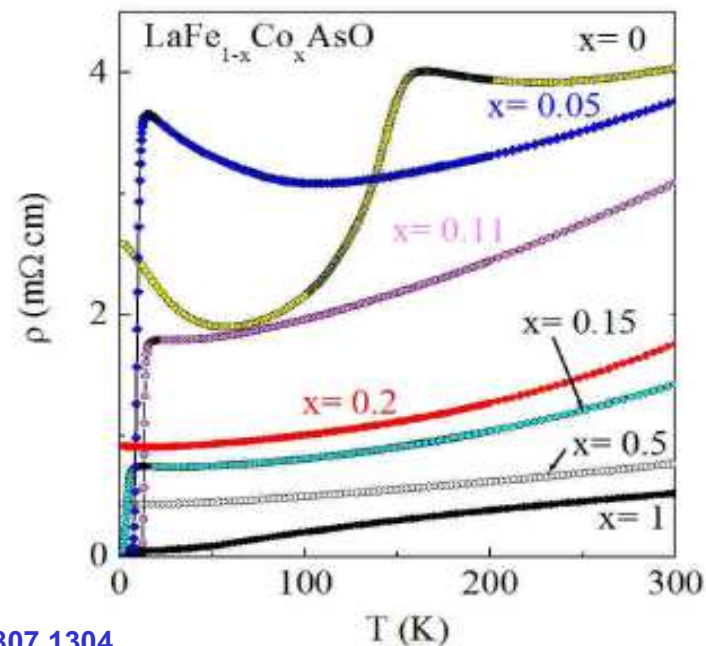
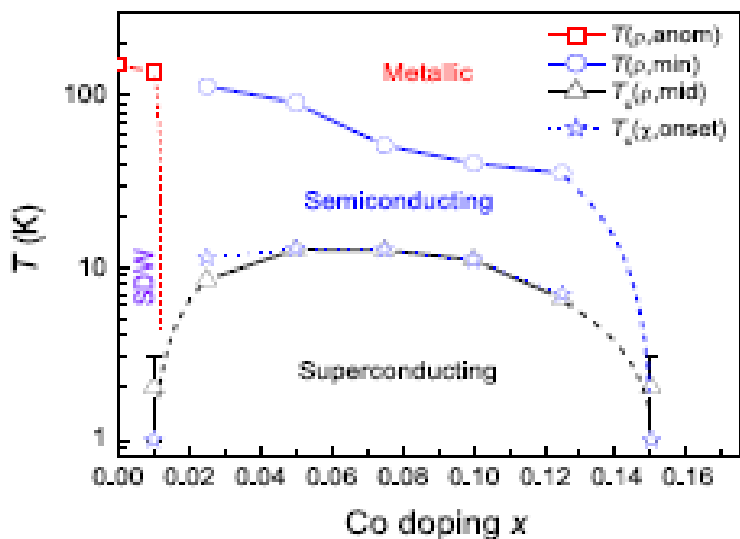


# Допирование атомами Co

Замещение Fe на Co в FeAs-плоскостях не разрушает сверхпроводимость.

В ВТСП купратах замена Cu на переходный элемент в CuO-плоскостях подавляет сверхпроводимость

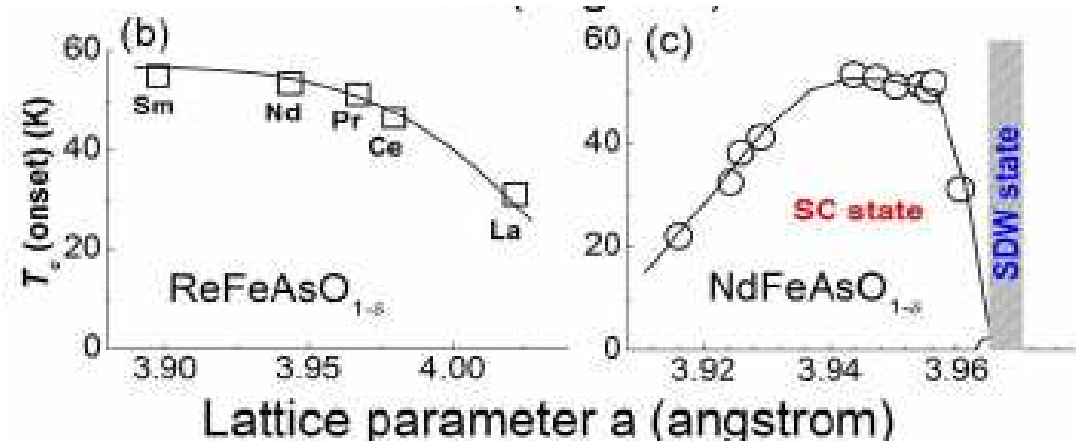
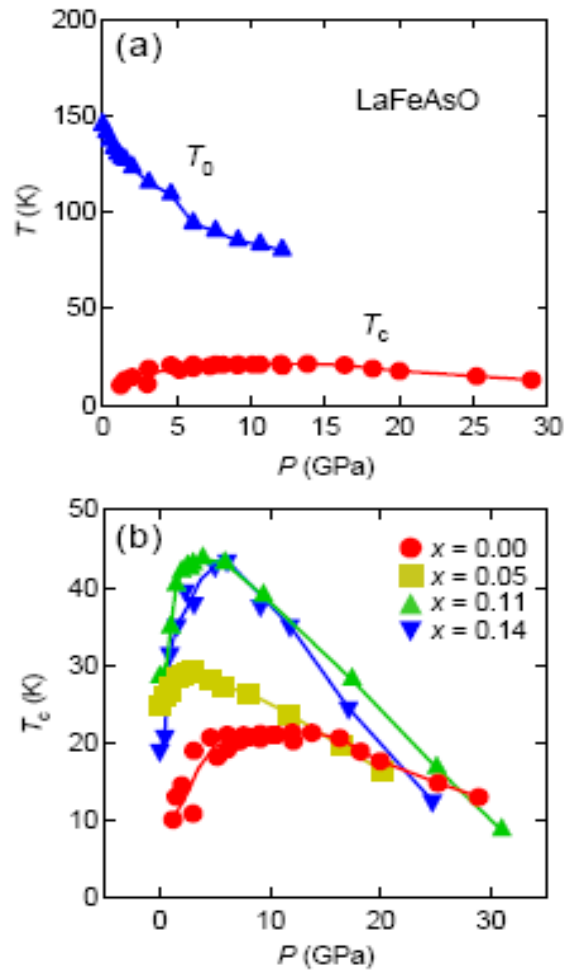
Sefat T-29



Wang arX: 0807.1304

T-30

# Влияние давления на $T_c$



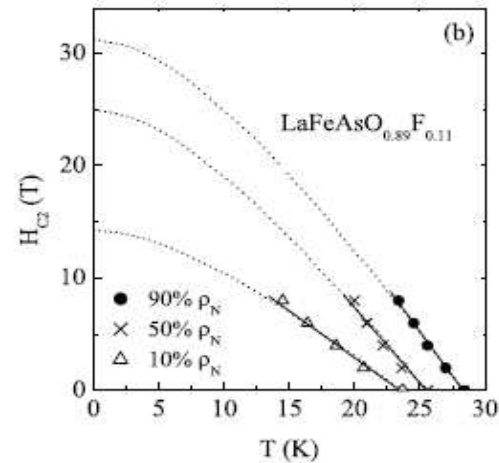
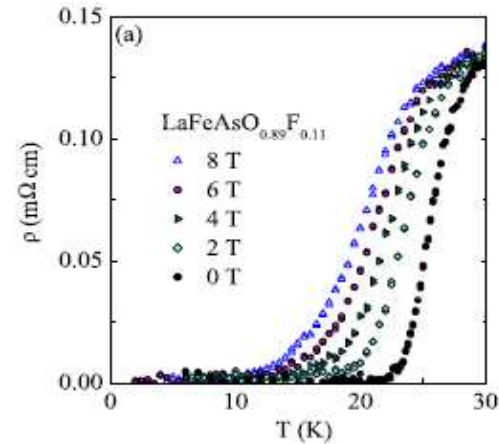
# Критические поля

$$H_{c2}(0) \approx -0.693 T_c \left. \frac{dH_{c2}}{dT} \right|_{T=T_c}$$

Оценки поля  $H_{c2}(0)$  из измерений  $dH_{c2}/dT$  при  $T=T_c$ ;

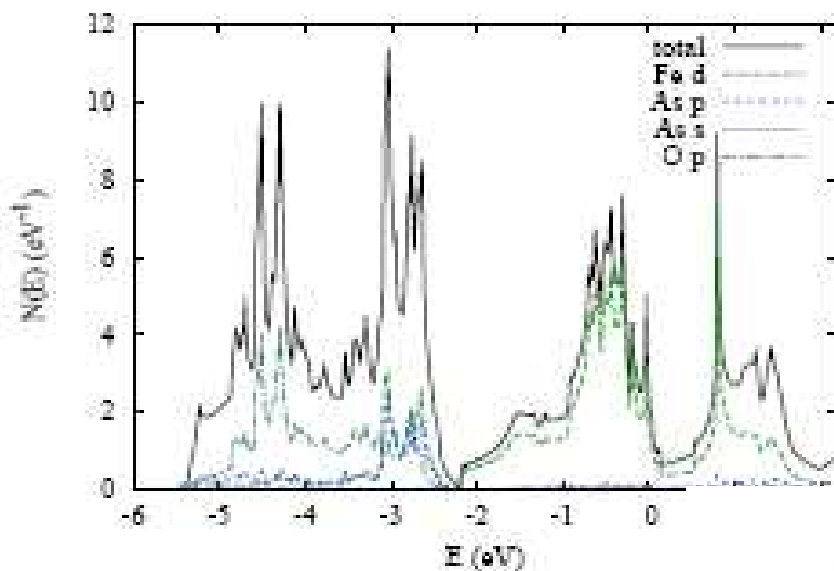
$\text{LaO}_{0,89}\text{F}_{0,11}\text{FeAs}$        $H_{c2}(0)=30$  Тесла  
 $T_c=28\text{K}$

$\text{SmO}_{0,7}\text{F}_{0,3}\text{FeAs}$        $H_{c2}(0)=200$  Тесла  
 $T_c=54,6\text{K}$



# Электронная структура LaOFeAs

## Плотность состояний



## Зонный спектр

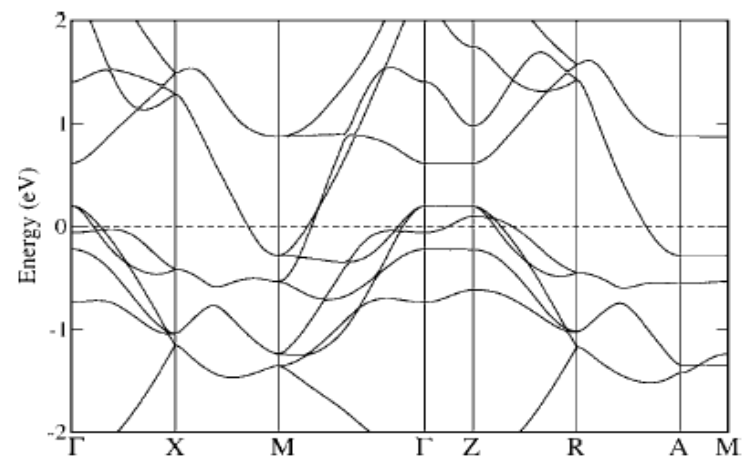
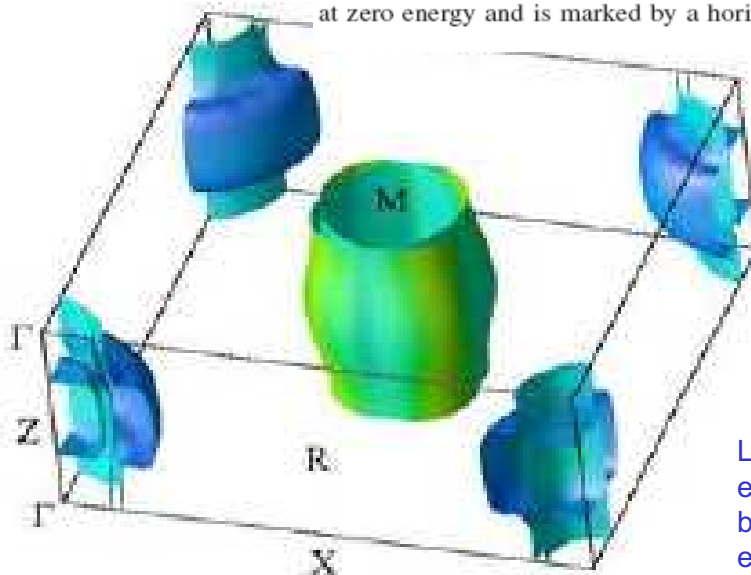


FIG. 5. Calculated band structure of LaOFeP. The Fermi level is at zero energy and is marked by a horizontal dashed line.

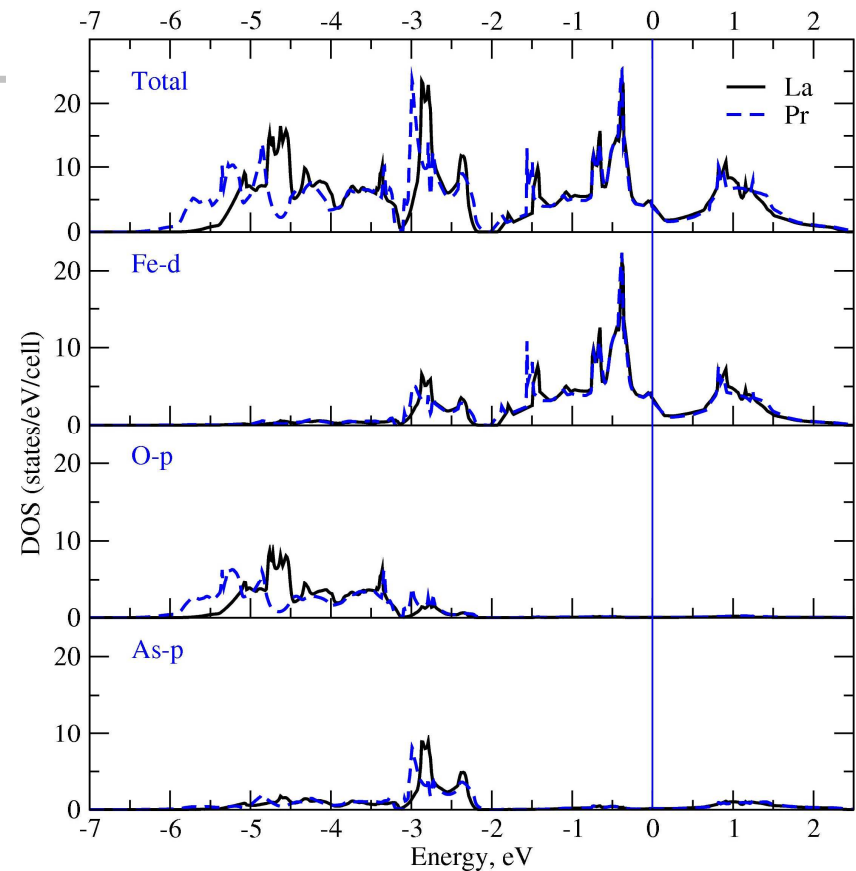
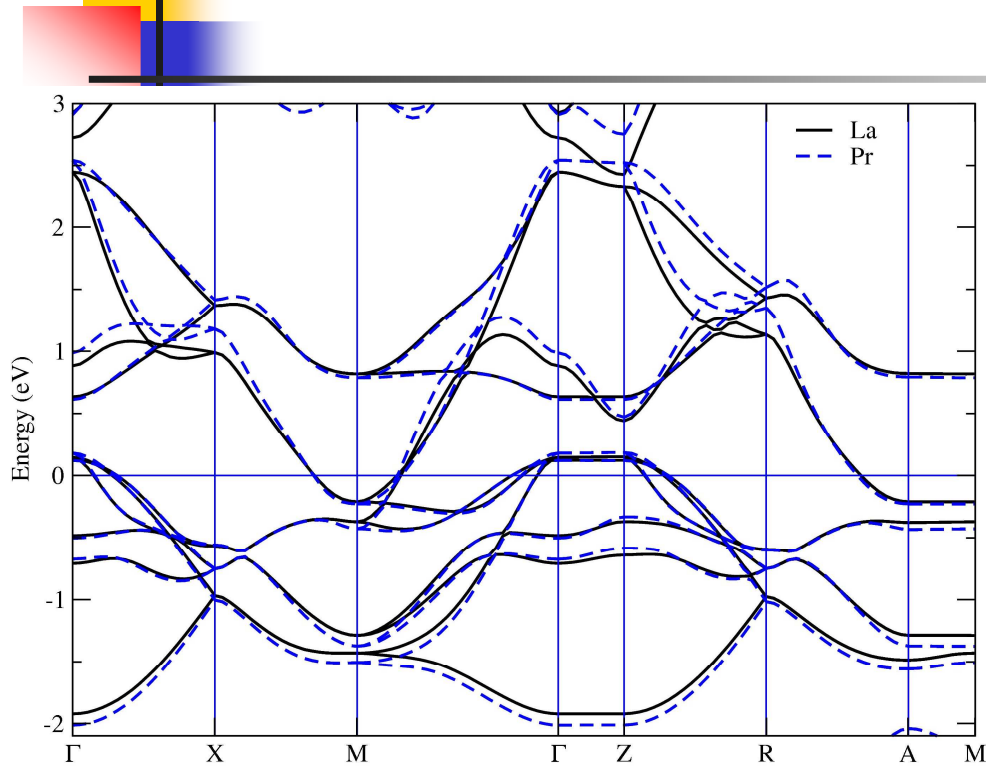
## Поверхность Ферми



L  
e  
b  
e  
g  
u

# Электронная структура соединений $\text{La}(\text{Pr})\text{OFeAs}$

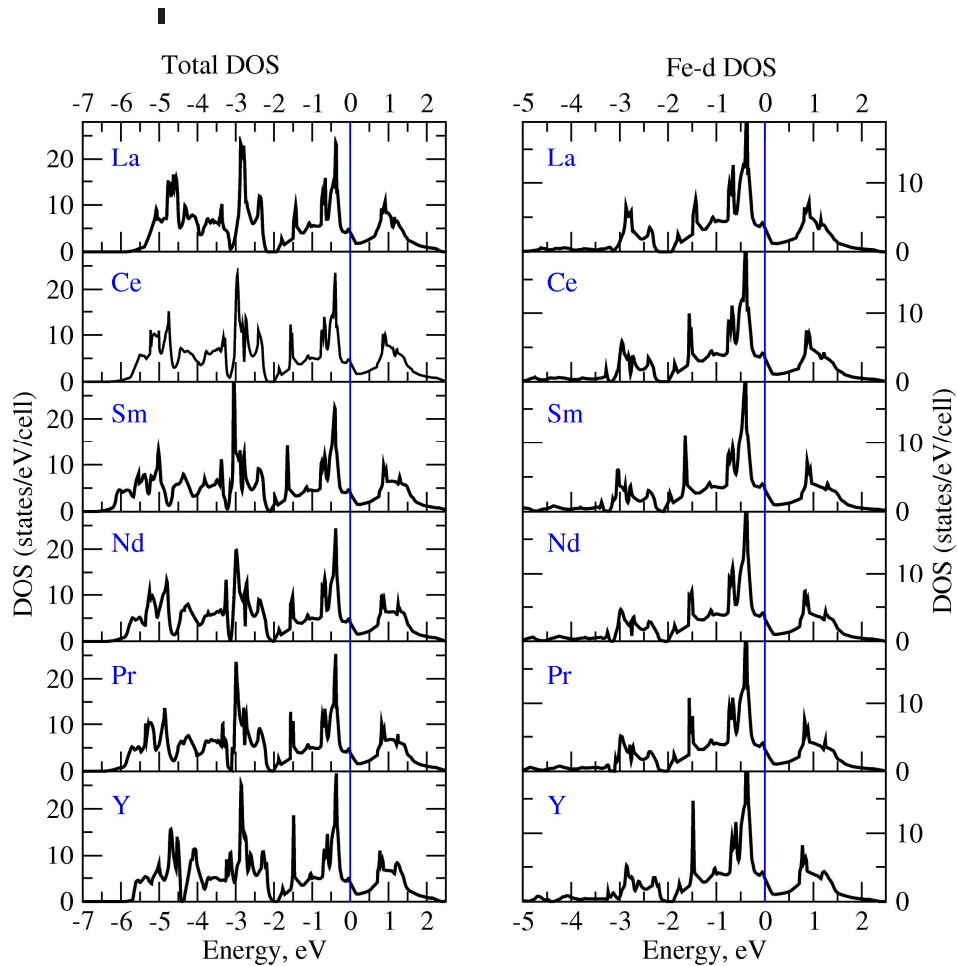
Энергетические зоны (слева) и парциальные плотности состояний (справа) для  $\text{La}(\text{Pr})\text{OFeAs}$ , полученные в приближении LDA



При замене редкой земли меняется ширина зоны и величина расщепления в тетраэдрическом кристаллическом поле (из-за сжатия решетки)



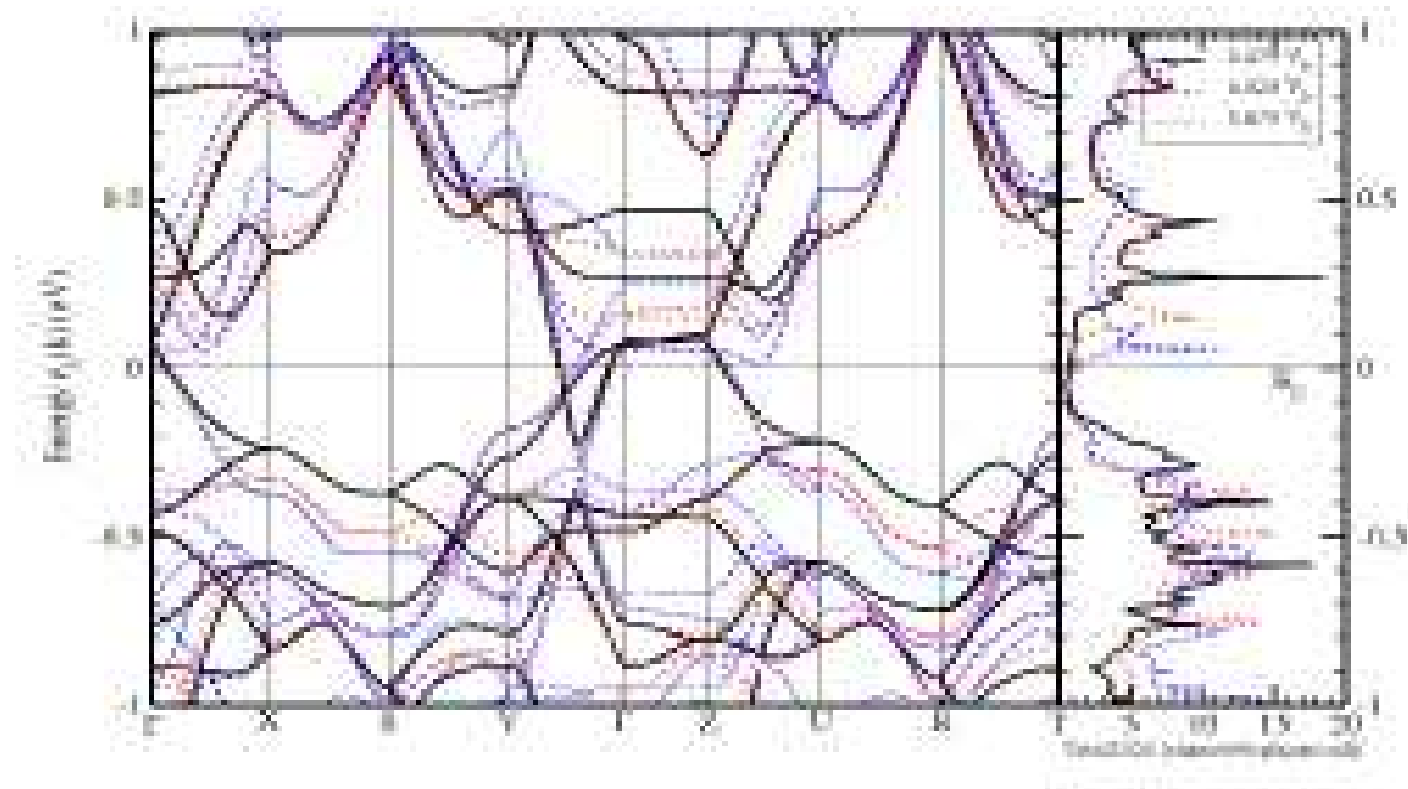
# Электронная структура соединений REOFeAs



**Электронная структура ReOFeAs соединений практически не зависит от сорта редко-земельного элемента**

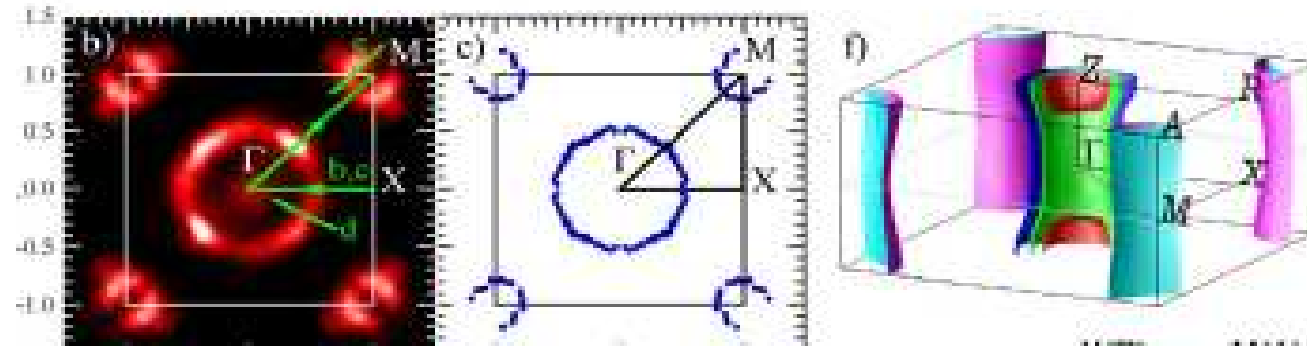
- Состояния ReO слоев располагаются далеко от уровня Ферми
- Гибридизация Fe-d и O-p состояний мала
- Сильная гибридизация внутри слоя FeAs между состояниями Fe-d и As-p
- ReOFeAs системы можно рассматривать как *квазидвумерные*

# Изменение электронной структуры с давлением

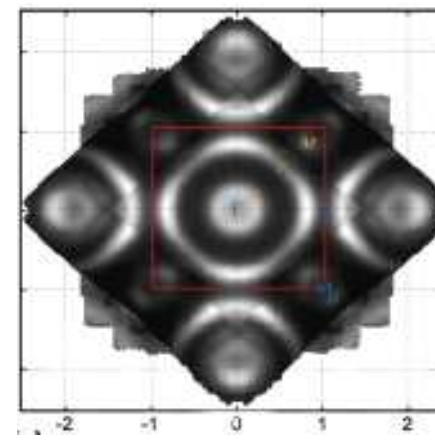
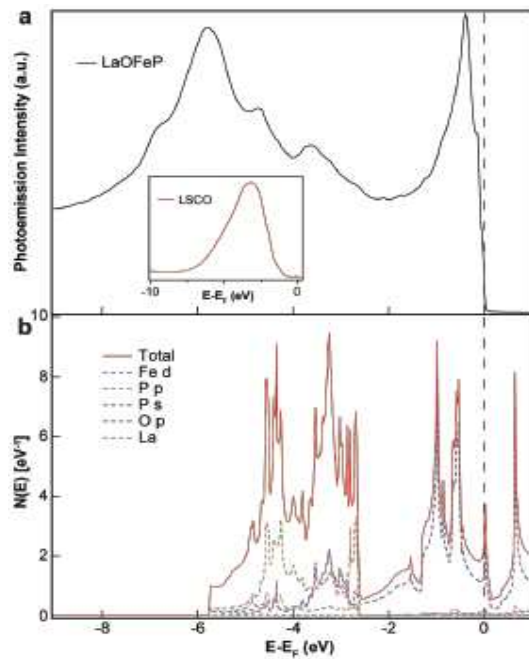


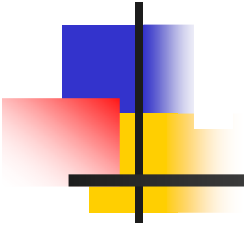
# ARPES исследование электронной структуры

NdOFeAs (Liu)



LaOFeP (Lu)





## Методы исследования симметрии сверхпроводящего параметра порядка

---

**NMR** БКШ :  $1/T_1 \sim e^{-\Delta/T}$

НУЛИ ПП:  $1/T_1 \sim T^3$

**PCAR** Свидетельство о нулях ПП: ZBP (пики при  $V=0$ )

**ARPES** фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением

**JTC** джозефсоновские туннельные контакты

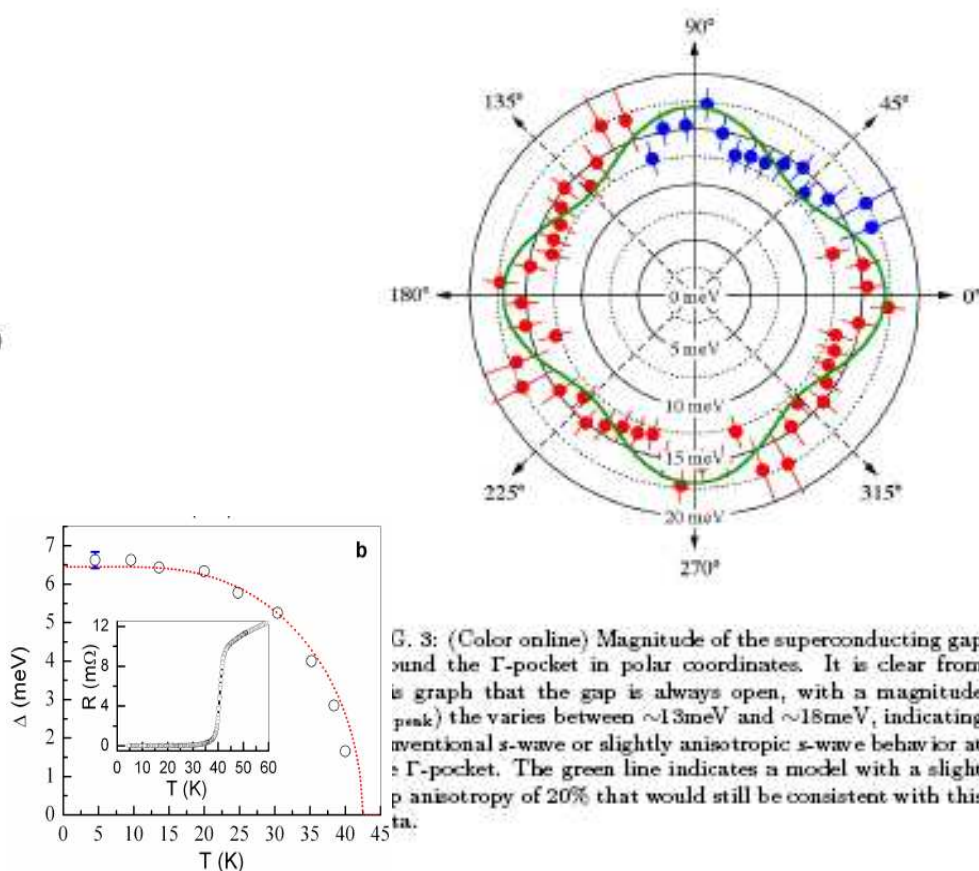
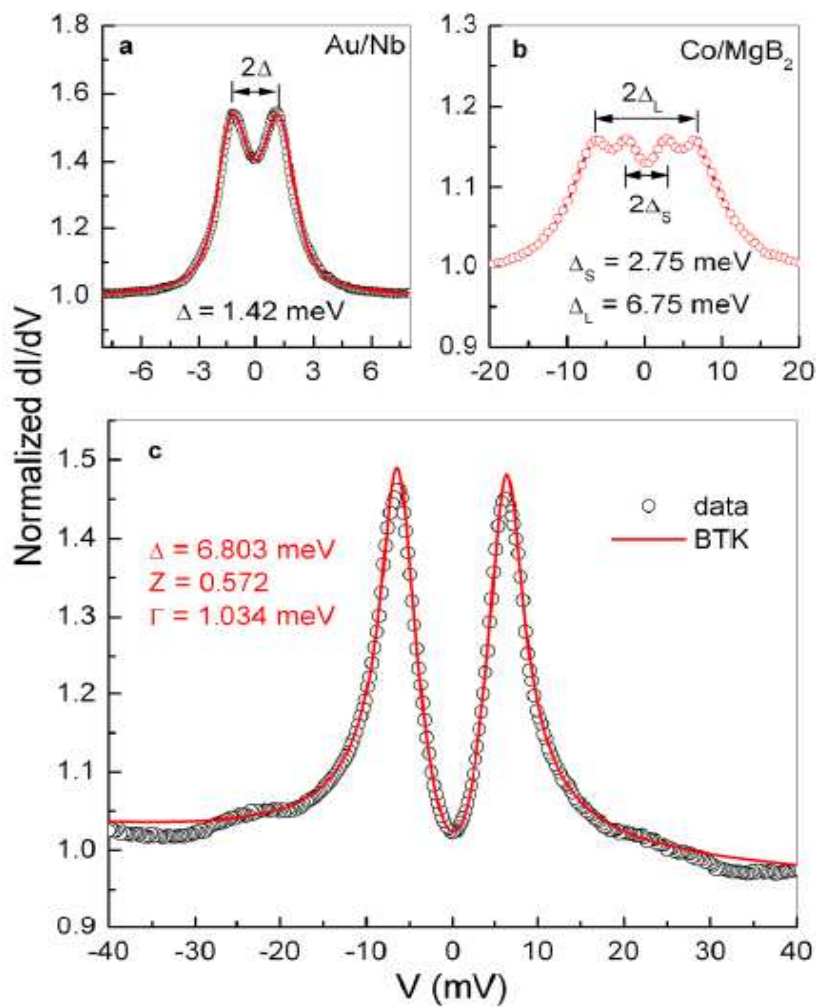
**L(T)** температурная зависимость глубины проникновения

**$C_V(T)$**  при нулях ПП  $C_V(T) \sim T^n$

# Симметрия сверхпроводящего параметра порядка

SmFeAsO (PTS)

NdFeAsO<sub>0.9</sub>F<sub>0.1</sub> (ARPES)



G. 3: (Color online) Magnitude of the superconducting gap around the  $\Gamma$ -pocket in polar coordinates. It is clear from this graph that the gap is always open, with a magnitude (peak) that varies between  $\sim 13 \text{ meV}$  and  $\sim 18 \text{ meV}$ , indicating conventional  $s$ -wave or slightly anisotropic  $s$ -wave behavior at the  $\Gamma$ -pocket. The green line indicates a model with a slight  $p$  anisotropy of 20% that would still be consistent with this data.

# PCAR андреевское отражение

**SmO<sub>0,85</sub>FeAs**

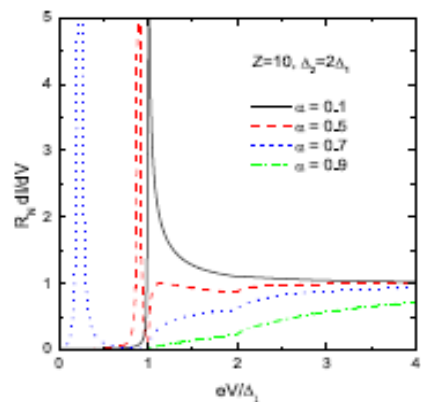
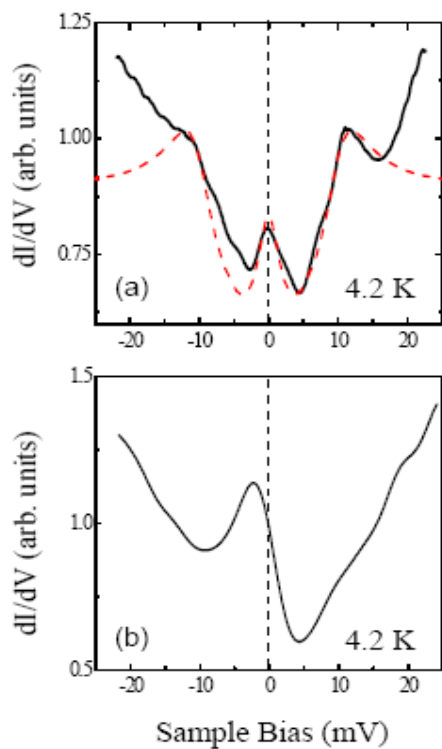


FIG. 2: (Color online) Conductance in the low transparency regime,  $Z = 10$ , in the  $s_+$  model.

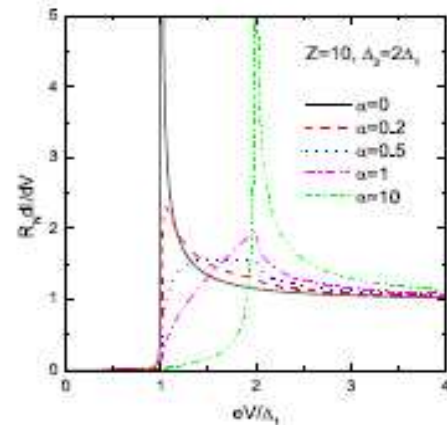
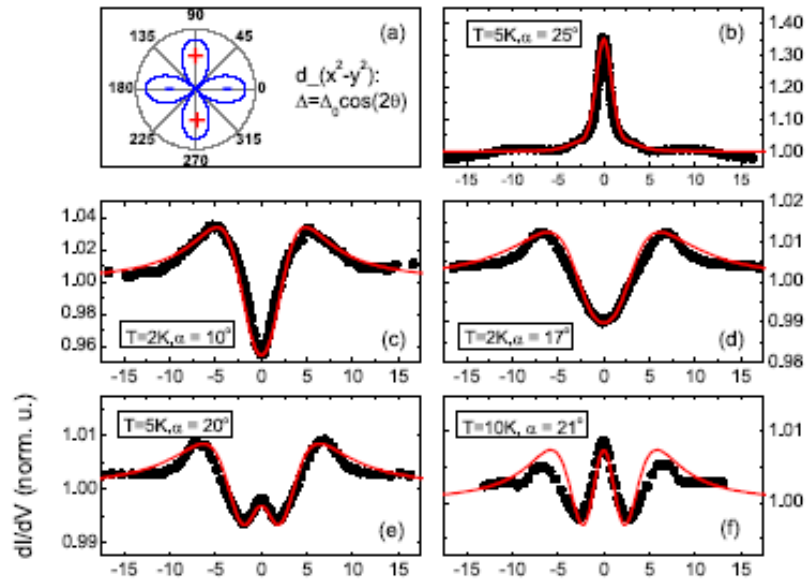


FIG. 4: (Color online) Conductance in the low transparency regime,  $Z = 10$ , in the  $s_{++}$  model.

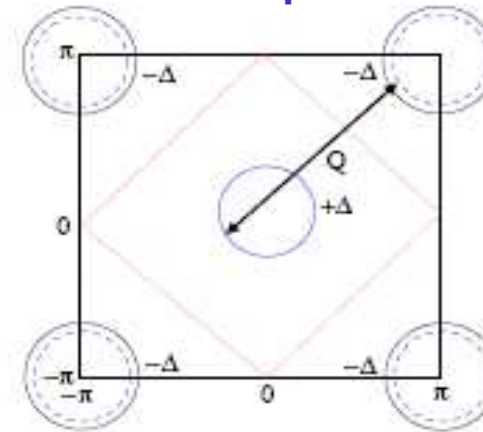
# Сверхпроводящий ПП с нулями на поверхности Ферми

PCAR : Точечный контакт с андреевским отражением

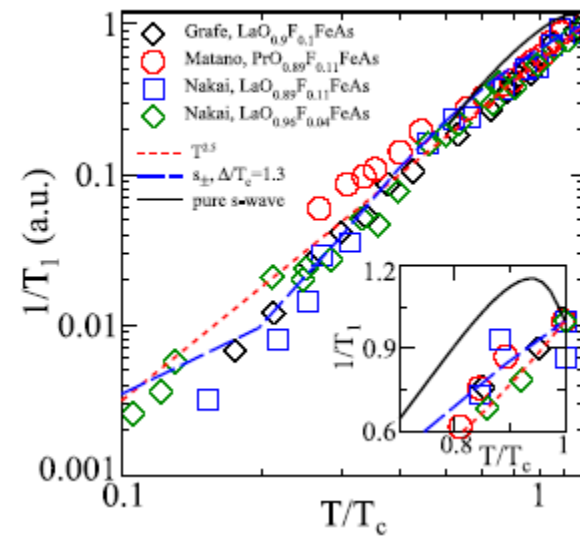


ZBP ; zero bias peak

## $S^*$ -симметрия ПП



В случае  $d$ -симметрии  $1/T_1 \sim T^3$  и в случае  $S^*$ -симметрии тоже



# Открытие системы BaFeAs<sub>2</sub>

2 2

## Superconductivity at 38 K in the iron arsenide (Ba<sub>1-x</sub>K<sub>x</sub>)Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>

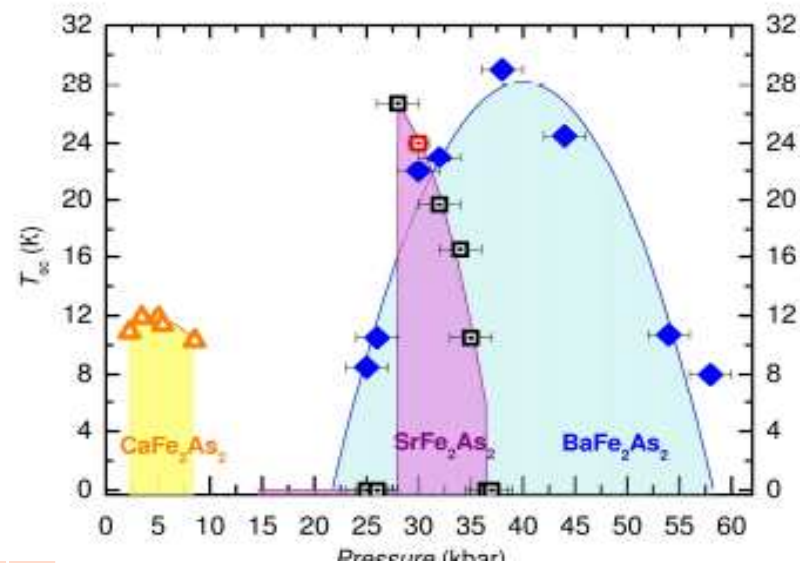
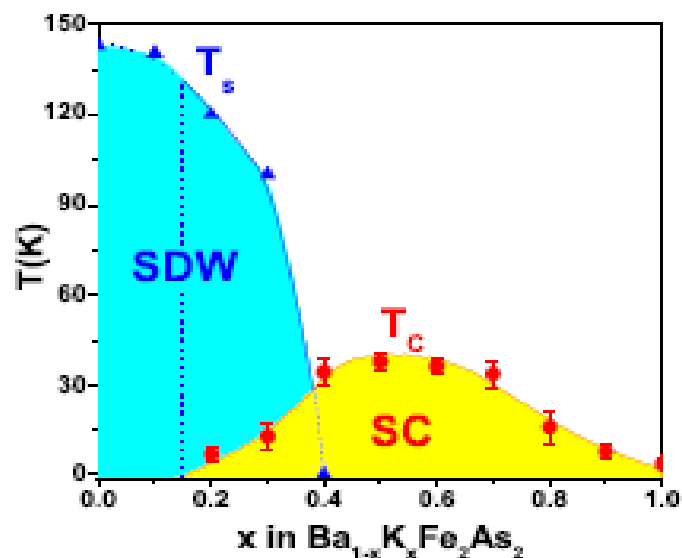
Marianne Rotter, Marcus Tegel and Dirk Johrendt\*

*Department Chemie und Biochemie, Ludwig-Maximilians-Universität München,*

*Butenandtstrasse 5-13 (Haus D), 81337 München, Germany*

(Dated: June 2, 2008)

The ternary iron arsenide BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> becomes superconducting by hole doping, which was achieved by partial substitution of the barium site with potassium. We have found bulk superconductivity up to  $T_C = 38$  K in (Ba<sub>1-x</sub>K<sub>x</sub>)Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> with  $x = 0.4$ . The parent compounds BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> and KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> both form the tetragonal ThCr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>-type structure, which consists of (FeAs)<sup>δ-</sup> iron ar-





# Замещение Fe кобальтом и никелем

## Допирование Ni

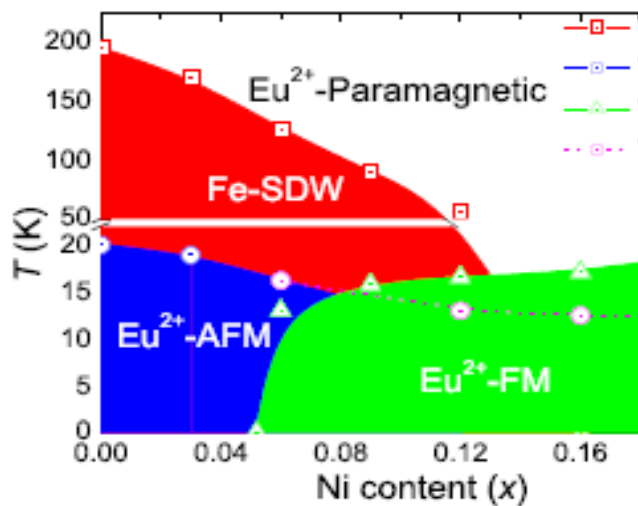


FIG. 5: (color online) Magnetic phase diagram for  $\text{EuFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$  system ( $0 \leq x \leq 0.2$ ).

## Допирование Co

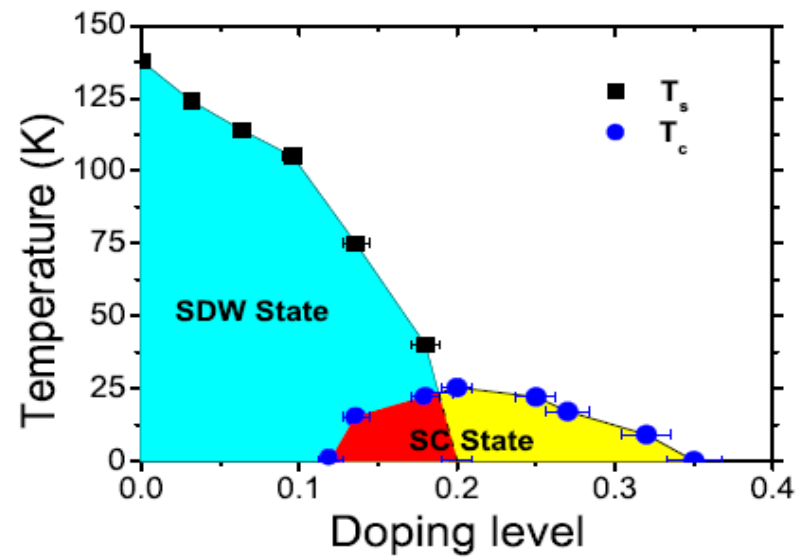
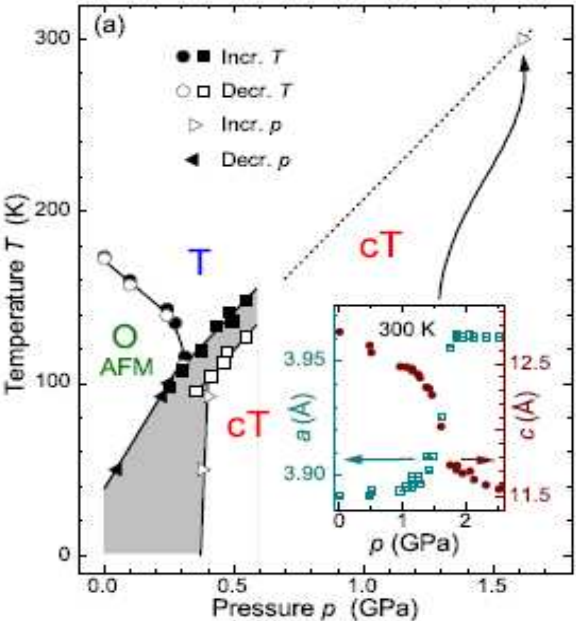
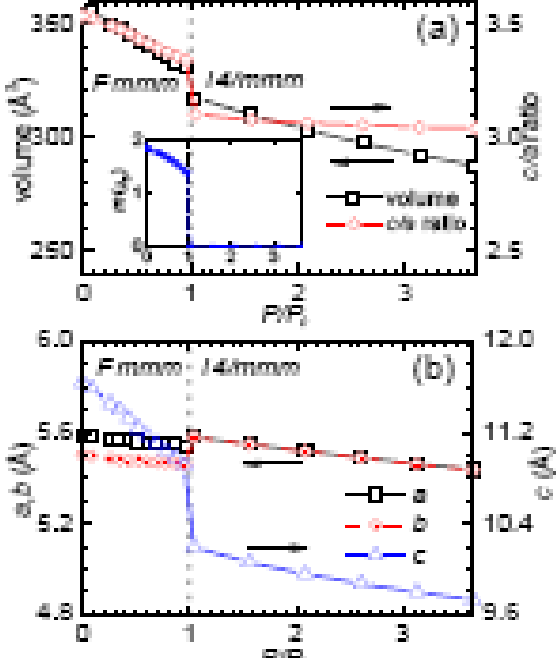


FIG. 8: Phase diagram of  $\text{BaFe}_{2-x}\text{Co}_x\text{As}_2$  within the range  $0 \leq x \leq 0.40$ . Both  $T_s$  and  $T_c$  are determined by resistivity.

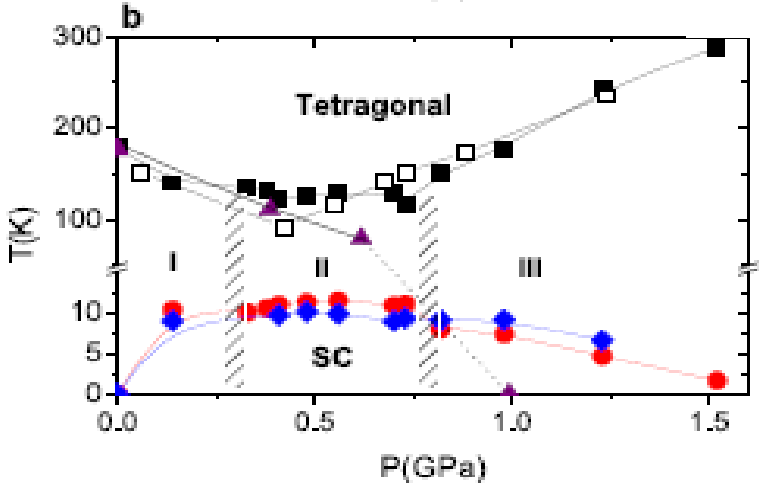
# Структурная аномалия в $\text{CaFe}_2\text{As}_2$



(V,P)-  
фазовая  
диаграмма



(T,P)- фазовая  
диаграмма



# Сравнение систем LaOFeAs и BaFeAs<sub>2</sub>

2 2

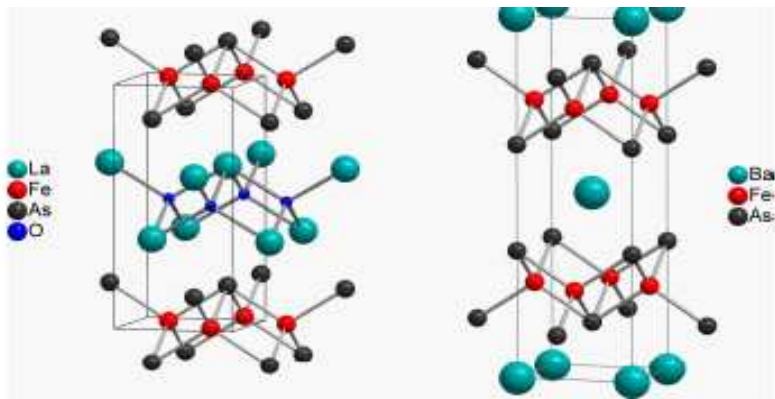


Figure 1. (Color online) Crystal structures of LaFeAsO and BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>.

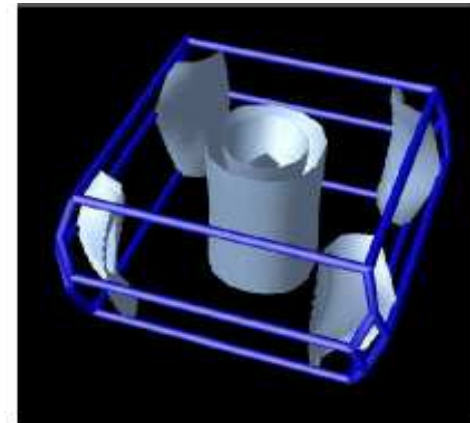
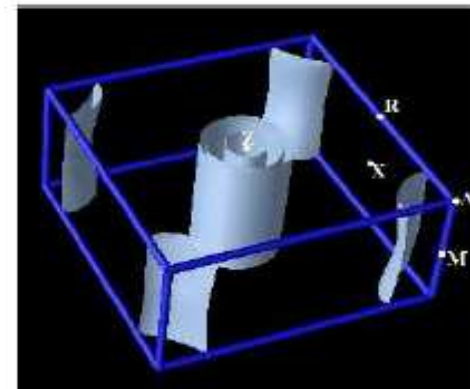
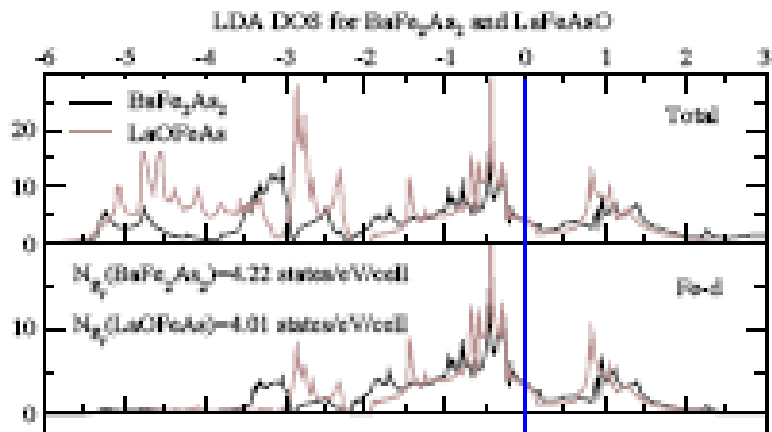


Fig. 6. Fermi surface of BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>.



# Поверхность Ферми $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ и $(\text{Ba,K})\text{Fe}_2\text{As}_2$

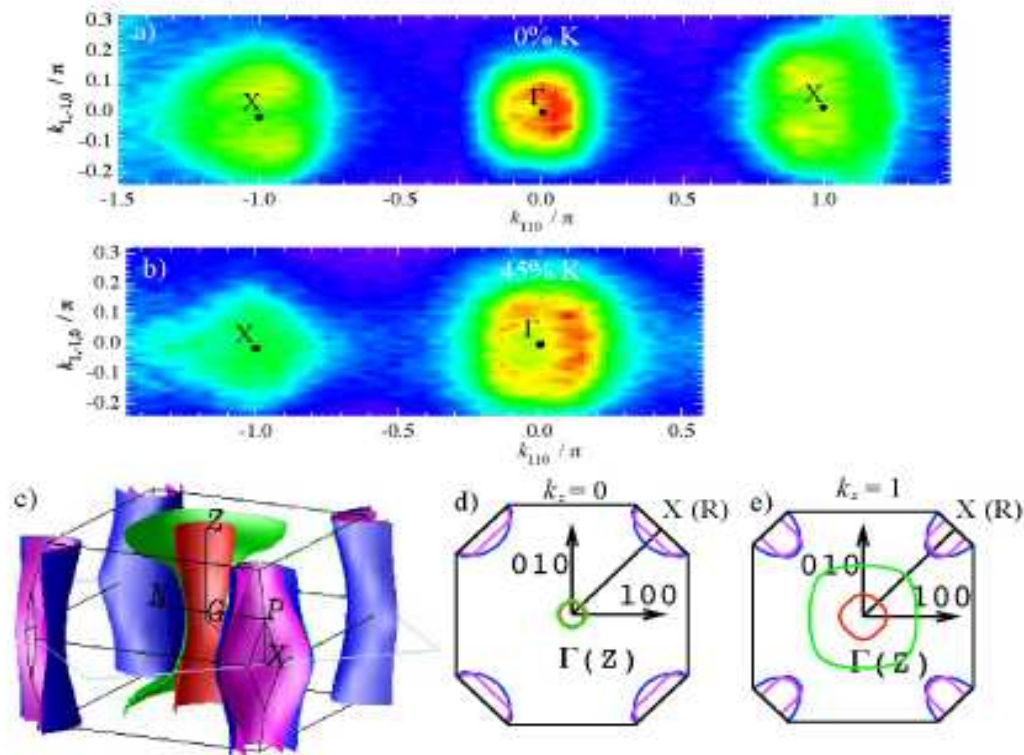
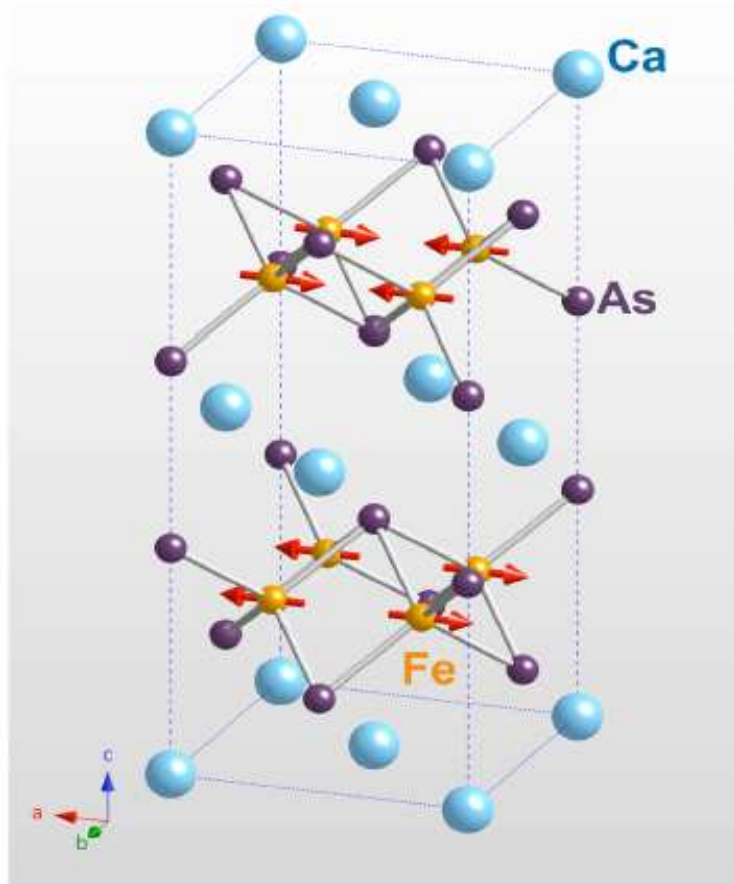


FIG. 1: (color online) Measured Fermi surface (FS) of  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  and  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  and calculated FS for undoped case. a) FS map of  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  - intensity of the photoelectrons integrated over 20 meV about the chemical potential obtained with 40.8 eV photons. Experiment was done at  $T = 100\text{K}$ . Areas of bright color mark the locations of the FS. b) FS map of  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  with nominal  $x = 0.45$  measured under the same conditions as (a). c) 3-dimensional FS of  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  obtained from FLAPW calculations. d) FS cross-section for  $k_z = 0$  ( $X$ - $\Gamma$  plane) obtained by FLAPW calculations. e) same as (d) but for  $k_z = 1$  ( $R$ - $Z$  plane).

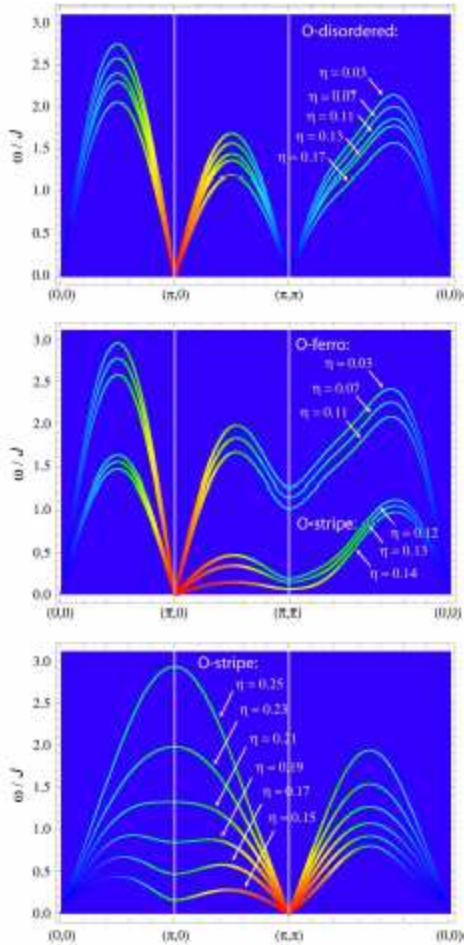
# Магнетизм в системе $AFe_2As_2$ , $A=Ba, Ca$



Та же самая магнитная структура  
что и в соединениях  $ReOFeAs$

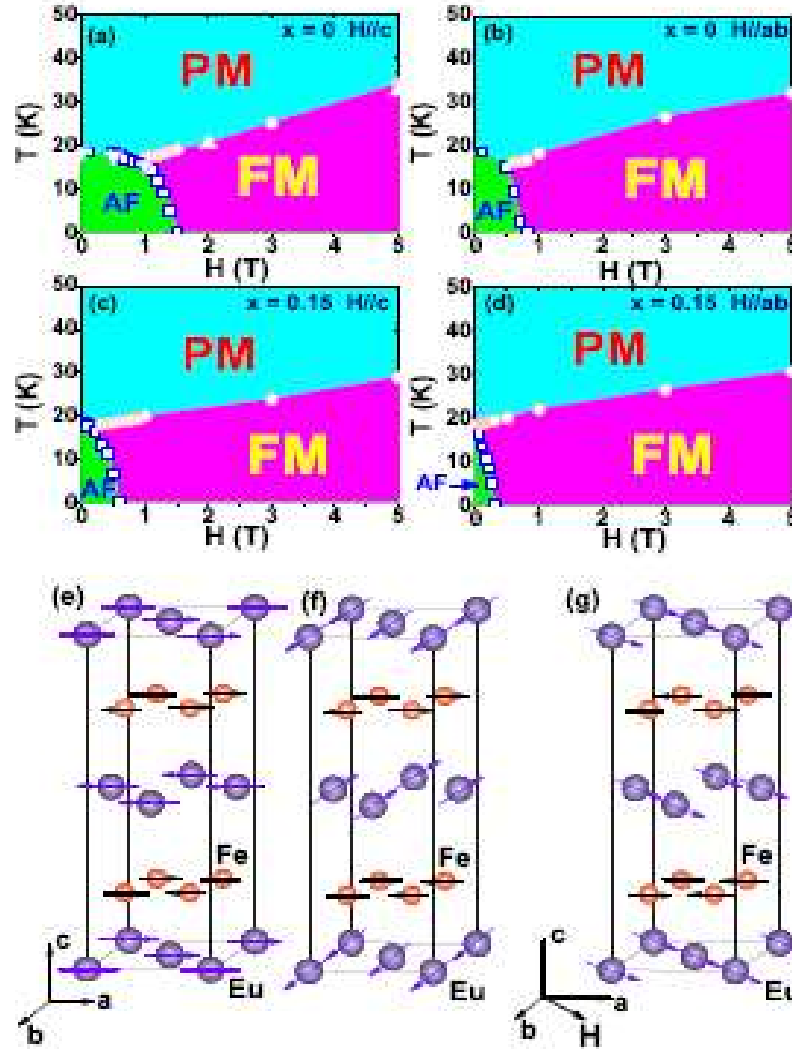
**Figure 3.** Illustration of the antiferromagnetic structure of  $CaFe_2As_2$  below  $T_S$ . The magnetic unit cell is the same as the orthorhombic chemical unit cell. Fe moments are oriented along the orthorhombic  $a$ -axis.

# Магнитное упорядочение в $\text{Eu}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$



Графы  
опингах

Магнитное упорядочение  
в подрешетке Fe и Eu

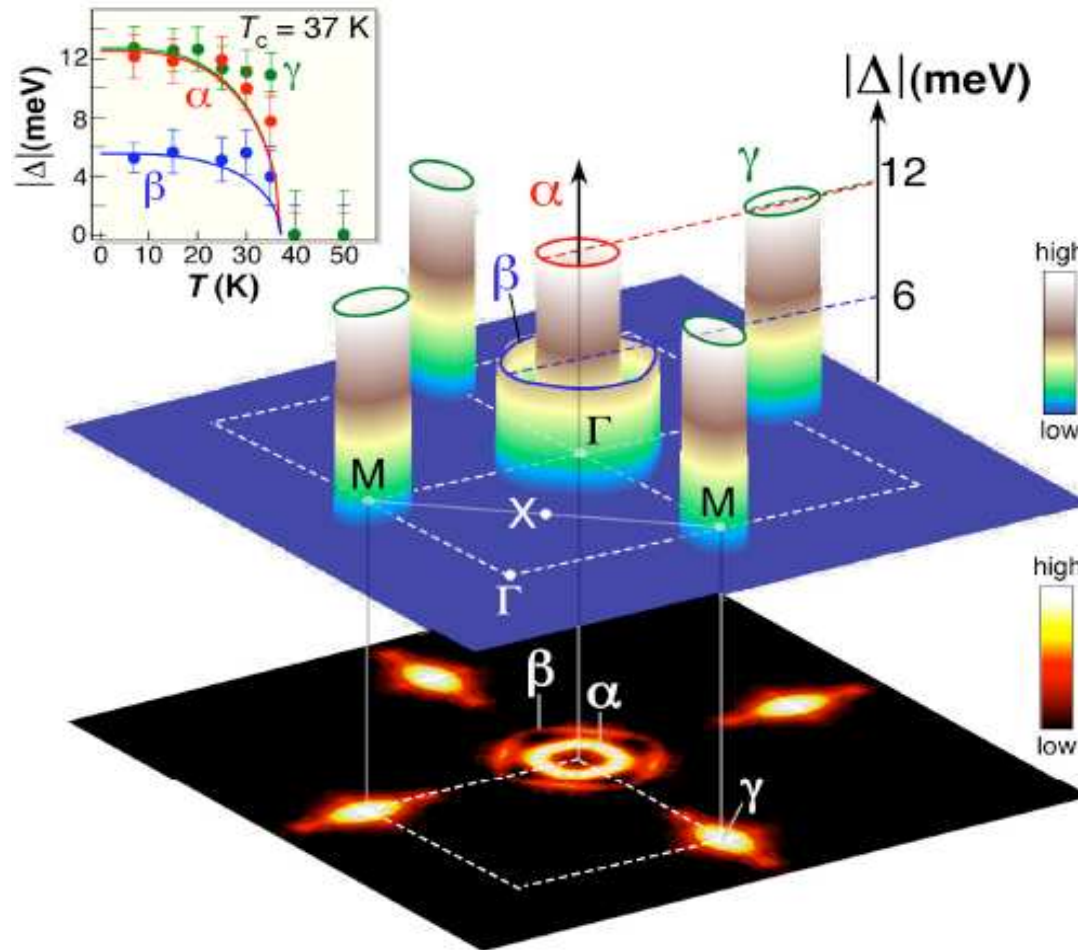


## Магнетизм в различных FeAs-соединениях

Соединение	$T_c$	$T_N(Fe)$	$\mu_{Fe}$	$g_{Fe}$	Спин	$T_N(R)$	$\mu_R$	$g_R$	Спин
$LaOFeAs$	155	137	0.36	101	$\sim a$	-			
$CeOFeAs$	158	140	0.8	100	$a$	4.0	0.94	101	$a, b, c$
$PrOFeAs$	153	127	0.48	100	$a$	14	0.84	100	$c$
$NdOFeAs$	150	141	0.25	101	$\sim a$	1.96	1.55	100	$a, c$
$CaFe_2As_2$	173	173	0.8	101	$a$	-			
$SrFe_2As_2$	220	220	0.94	101	$a$	-			
$BaFe_2As_2$	142	143	0.87	101	$a$	-			
$Fe_{1.008}Te$	67	67	2.25	100	$b$	-			

**R** редкоземельный элемент

# ARPES для $(\text{Ba,K})\text{FeAs}_2$





# Джозефсоновская туннельная спектроскопия угловой контакт

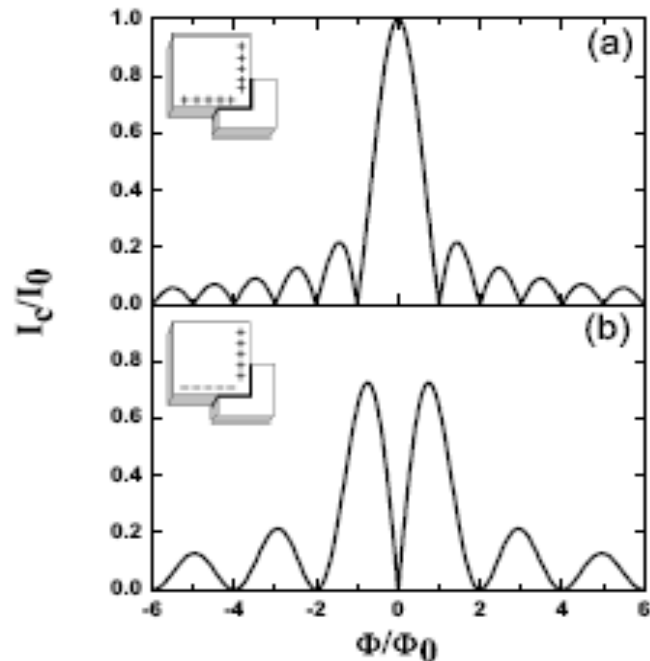


FIG. 1: The schematic map of the diffraction pattern on a corner junction: (a) with zero phase shift; (b) with  $\pi$  phase shift.

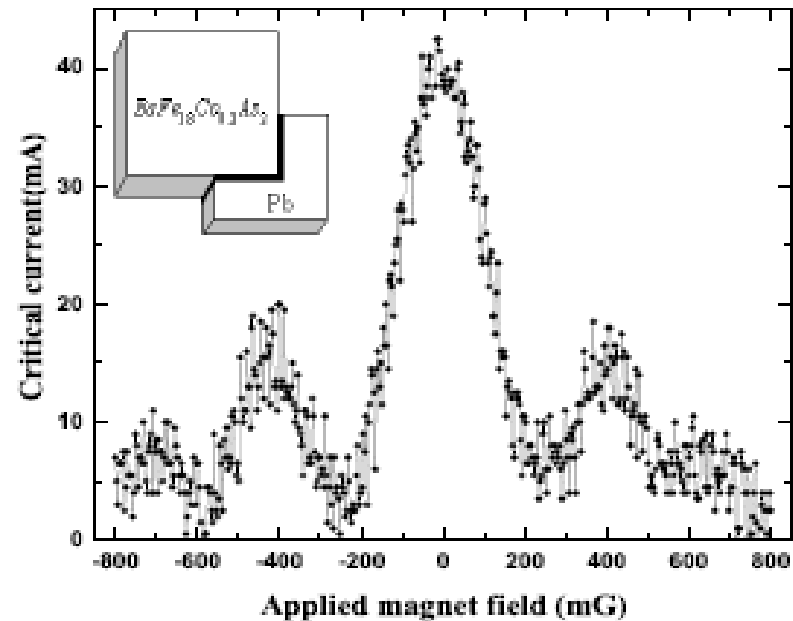
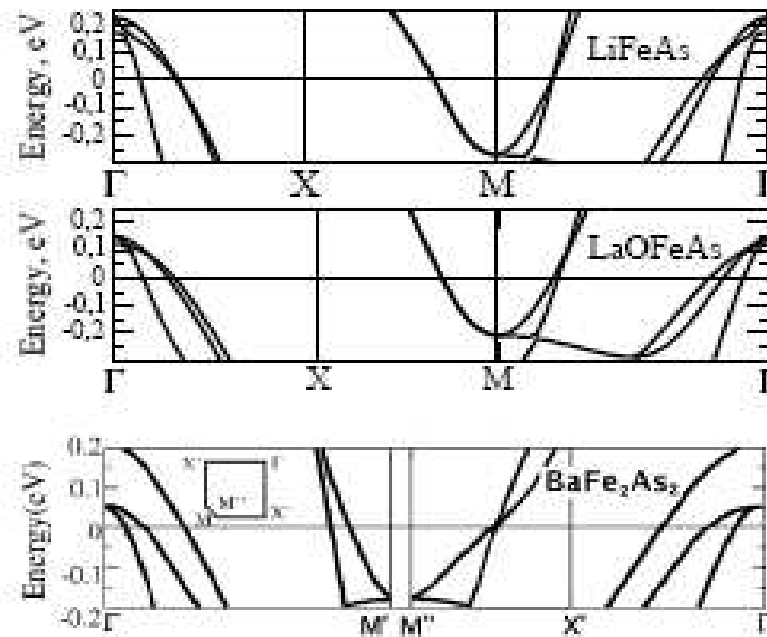
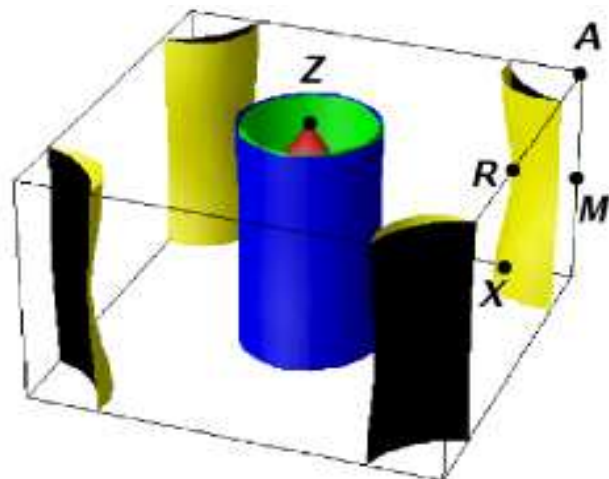
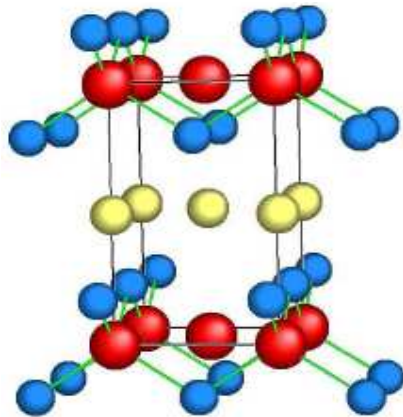


FIG. 3: The Fraunhofer diffraction pattern of the critical current as a function of magnetic field taken at 1.8K. Magnetic field is applied by a self-made NbTi superconducting coil, the maximum scanning range of magnetic field is  $-800\text{mG} \sim 800\text{mG}$ , limited by the Joule heat in contacts.

# Открытие сверхпроводимости в LiFeAs

T= 18K



Некрасов, Пчелкина, Садовский

Fig. 5. LDA Fermi surface of LiFeAs shown in the first Brillouin zone centered at  $\Gamma$  point.



# FeSe, FeS, FeTe

Недопированные соединения имеют единую кристаллическую структуру: они состоят из слоев FeSe как и все FeAs-системы, между слоями ничего нет.

В них не обнаружено ни структурной, ни магнитной неустойчивости.

Электронная структура их идентична структуре всех FeAs-систем.

При давлении 1,48 GPa возникает сверхпроводимость с  $T_c=27\text{K}$ .

Сверхпроводимость возникает также с допированием:

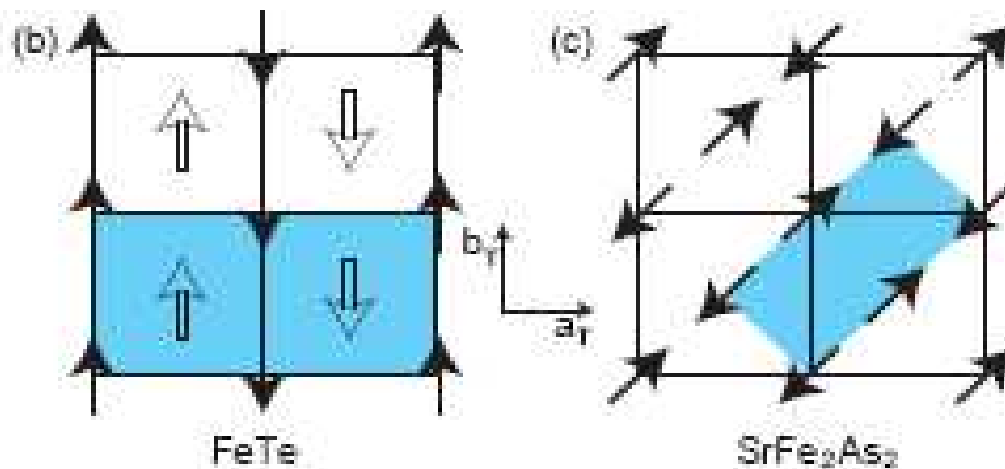
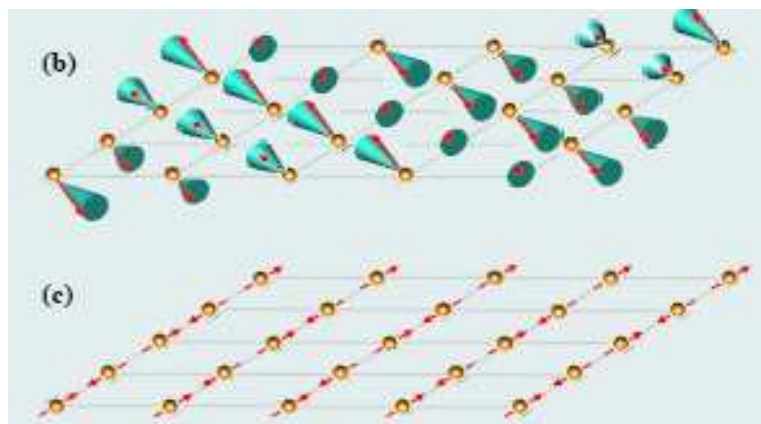
$\text{FeS}_{1-x}$	$T_c=8\text{K}$
$\text{Fe}_{0,92}\text{Co}_{0,08}\text{Se}$	$T_c=8,3\text{K}$
$\text{Na}_{0,1}\text{FeSe}$	$T_c=8,3\text{K}$
$\text{Fe}(\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x)_{0,82}$	$\max T_c=14\text{K}$ при $x=0,6$

$T_c$  в них ниже чем в FeAs-системах

# Магнитное упорядочение в FeTe

FeTe

ReOFeAs





Это усложнение  $\text{AFe}_2\text{As}_2$

$I4/mmm$

$a = 4.0678 \text{ \AA}$

$c = 26.8473 \text{ \AA}$

Соединение не имеет ни структурной, ни магнитной неустойчивостей.

Не ясно будет ли оно сверхпроводником при допировании

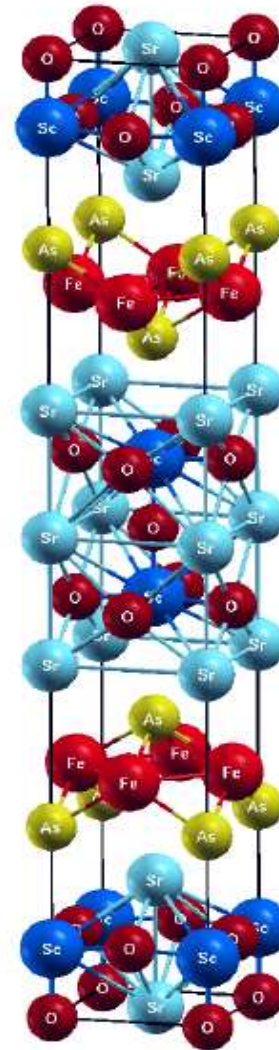


Fig. 1. Crystal structure of  $(\text{Sr}_3\text{Sc}_2\text{O}_5)\text{Fe}_2\text{As}_2$ .



# Выводы

---

- Имеется три класса соединений с чередующимися плоскостями

FeAs<sub>4</sub>:                    LaOFeAs      BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>      LiFeAs

- При стехиометрическом составе все они AFM металлы. При допировании TN резко падает и возникает сверхпроводимость с максимальными T<sub>c</sub> :    55 K                    38 K                    18 K

- Электронная структура всех соединений одинакова. Вблизи уровня Ферми доминируют двумерные Fe-3d-состояния. Поверхность Ферми многолистная. Имеется 2 дырочных кармана в центре зоны Бриллюэна и 2 электронных в ее углах.

- Симметрия сверхпроводящего параметра порядка однозначно не установлена. Наблюдаются признаки s-симметрии, в некоторых случаях другой тип симметрии: с нулями щели на поверхности Ферми.

- Механизм сверхпроводимости определяется, повидимому, близостью к магнитному фазовому переходу.



# Сравнение с ВТСП купратами

---

## Сходство

- Оба типа соединений содержат чередующиеся плоскости  $\text{FeAs}$  или  $\text{CuO}_2$
- Вблизи уровня Ферми доминируют  $\text{Fe-3d}$  или  $\text{Cu-3d}$  состояния
- Исходные соединения  $\text{LaOFeAs}$  и  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  AFM. Сверхпроводимость возникает при допировании (не Fe и не Cu). При этом AFM подавляется.



## Различие

- При стехиометрическом составе купраты изоляторы, а FeAs системы- металлы.
- В купратах атомы Cu разделены атомами O, поэтому важна гибридизация состояний Cu 3d и O 2p. В FeAs атомы Fe имеют соседями атомы Fe.
- Симметрия сверхпроводящего ПП в купратах d-типа, в FeAs s-типа (мультищель) или с нулями на поверхности Ферми.
- Купраты сильно коррелированные вещества, FeAs-системы, повидимому,- нет.
- В купратах двухслойки ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ ) имеют более высокие  $T_c > 100\text{K}$ , в FeAs-системе (пока)- нет.

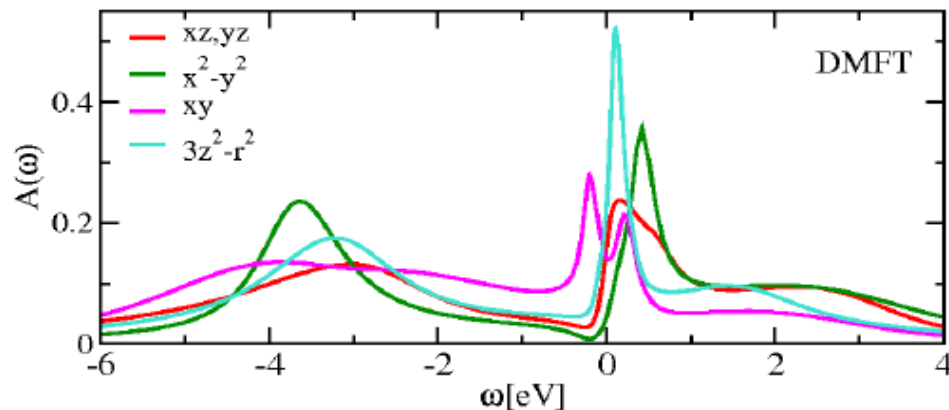


# Как велики электронные корреляции в LDA + DMFT

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

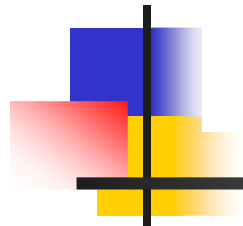
$$H_{int} = U \sum_{i,a} n_{i a \uparrow} n_{i a \downarrow} + U' \sum_{i,a \neq b} n_{i a} n_{i b} - J_H \sum_{i,a,b} \mathbf{S}_{i a} \cdot \mathbf{S}_{i b}$$

$$U = 4 \text{ eV}, \quad J_H = 0.7 \text{ eV}.$$



Haule, Shim, Kotliar  
Phys. Rev. Lett. **100**, 226402  
(2008)

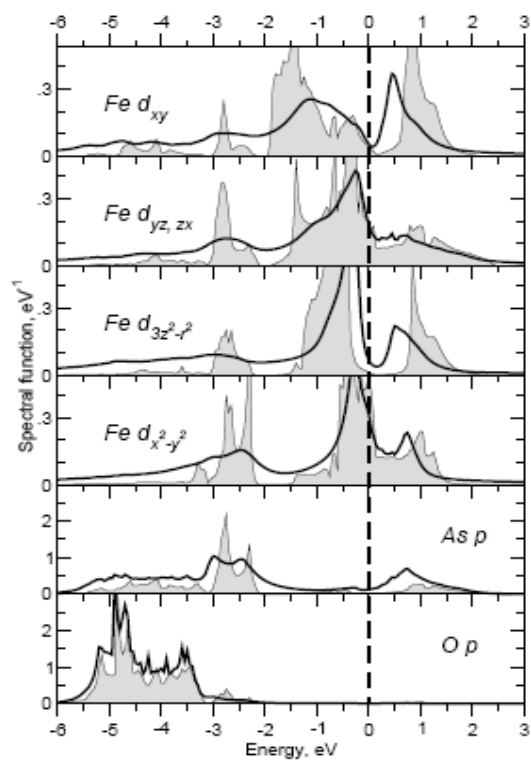
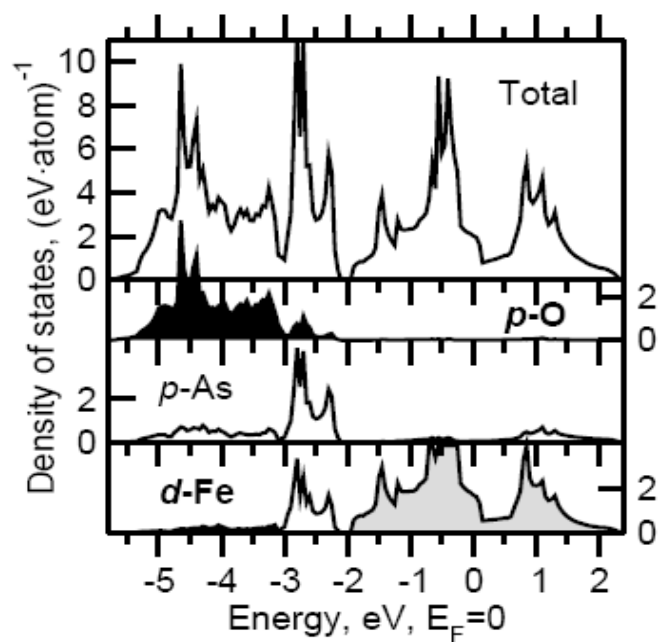
**Вывод:** FeAs-системы  
являются сильно  
коррелированными, находятся  
вблизи мотт-хаббардовского  
перехода



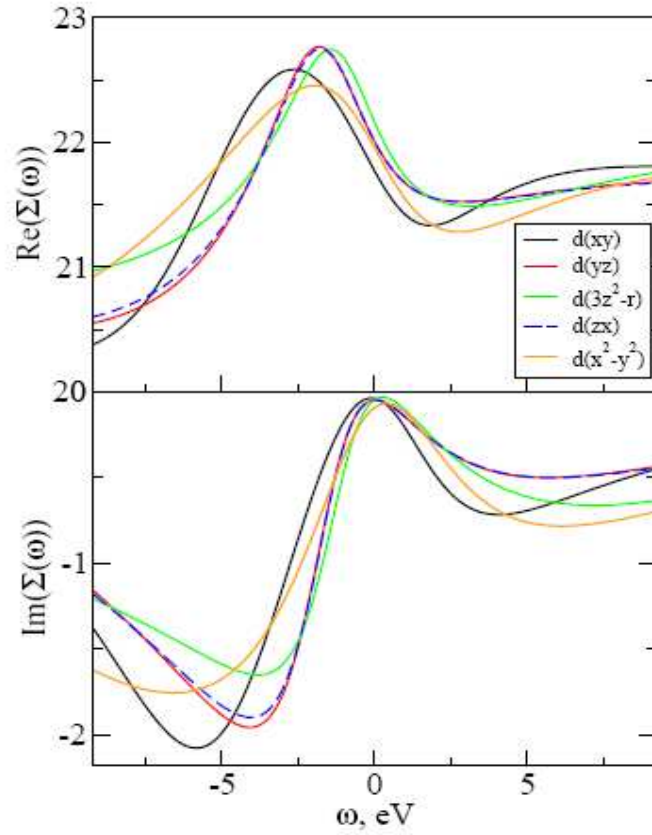
# LDA+DMFT

Анисимов, Изюмов, Курмаев

LaOFeAs  $U=3-4$  eV,  $J=0,8$  eV



# LDA+DMFT



$$Z = \left[ 1 - U \frac{d}{d\omega} \text{Re}(\omega) \right]_{\omega=0}^{-1} \simeq \frac{m}{m^*}$$

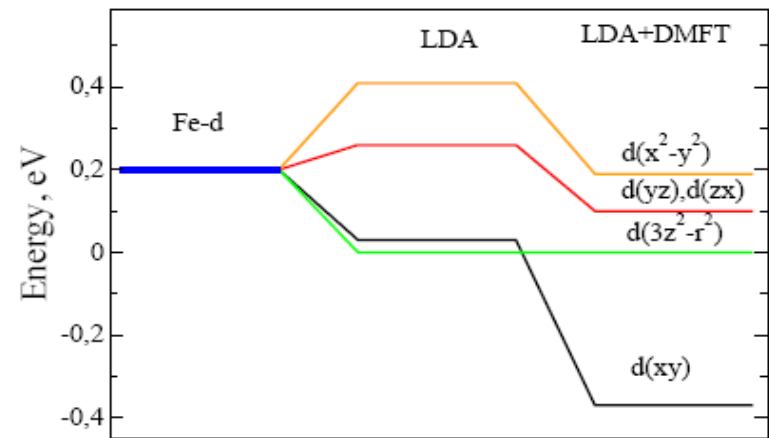


Figure 4: (Colour online) Splitting of Fe-*d* orbitals obtained in LDA and LDA+DMFT.

# LDA+DMFT : сравнение с экспериментом

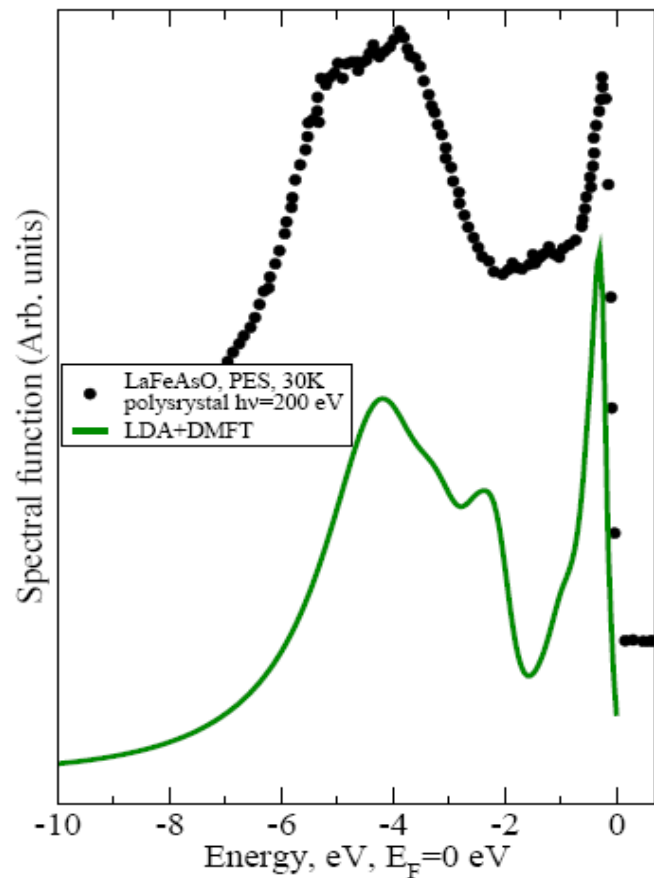
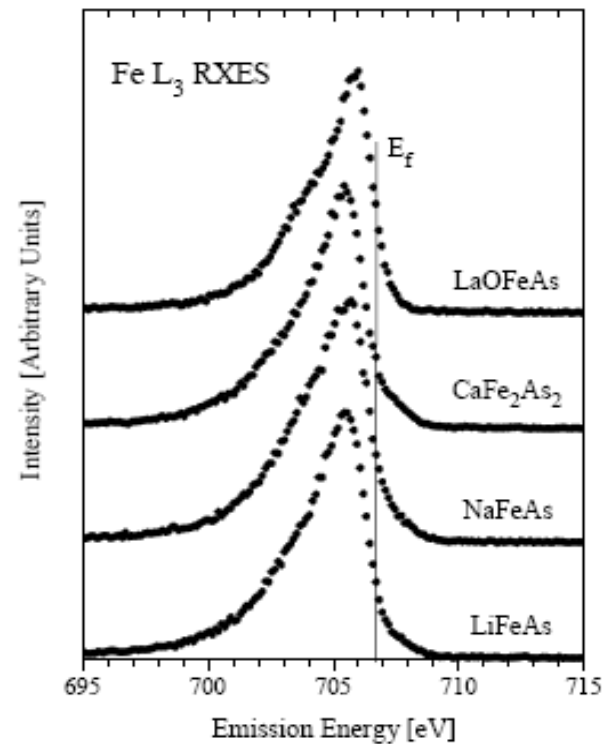


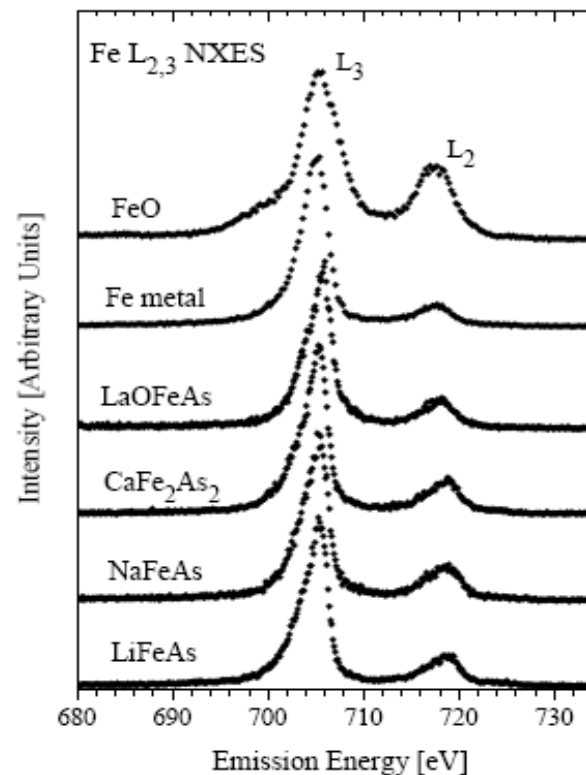
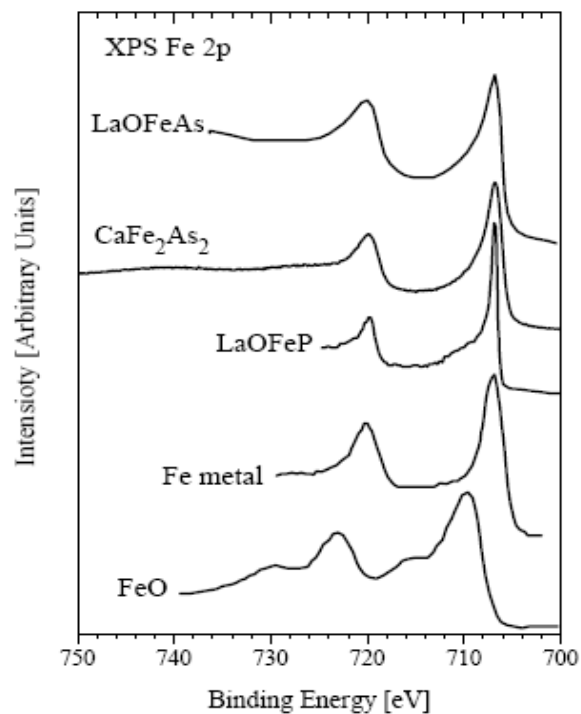
Figure 8: (Colour online) Calculated total LDA+DMFT spectral function (green) and experimental LaFeAsO PES spectrum (black circles) from Ref. [26].



PDF created with pdfFactory Pro trial version [www.pdffactory.com](http://www.pdffactory.com)

Figure 7: Fe  $L_3$  XES of LaOFeAs [12],  $\text{CaFe}_2\text{As}_2$  [26], LiFeAs and NaFeAs [27].

## Сравнение рентгеновских спектров соединений



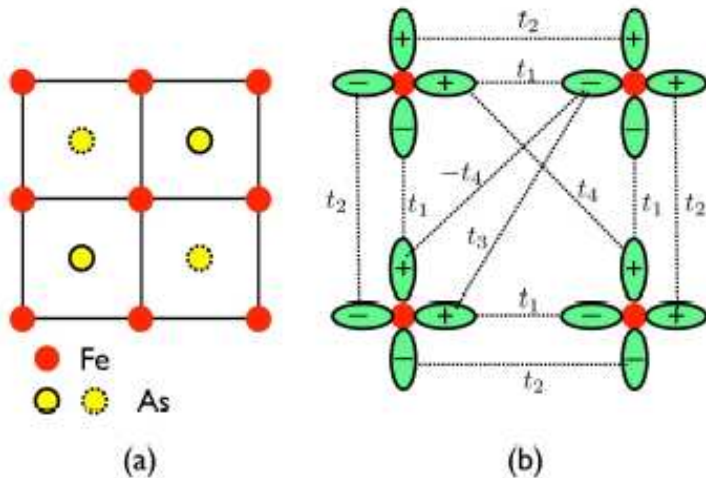
PDF created with pdfFactory Pro trial version [www.pdffactory.com](http://www.pdffactory.com)

Figure 8: XPS Fe 2p of LaOFeAs [14], CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> [28], LaOFeP [31], FeO [32] and Fe metal [33].

**Вывод: все FeAs-соединения являются слабо или умеренно коррелированными металлами**

# Теоретические модели.

## Минимальная двухзонная модель



Орбитали 3d-Fe :  
 $d_{xz}$ ,  $d_{yz}$ ,  $d_{xy}$ ,  $d_{x^2-y^2}$ ,  $d_{3z^2-r^2}$

Возьмем ( $d_{xz}$ ,  $d_{yz}$ )

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \psi_{\mathbf{k}\sigma}^+ T(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}\sigma},$$

$$\psi_{\mathbf{k}\sigma}^+ = (c_{x\mathbf{k}\sigma}^+, c_{y\mathbf{k}\sigma}^+)$$

$$T(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_x(\mathbf{k}) - \mu & \varepsilon_{xy}(\mathbf{k}) \\ \varepsilon_{xy}(\mathbf{k}) & \varepsilon_y(\mathbf{k}) - \mu \end{pmatrix}$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\nu=\pm} E_{\nu}(\mathbf{k}) \gamma_{\nu\mathbf{k}\sigma}^+ \gamma_{\nu\mathbf{k}\sigma}$$

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\varepsilon_x^2(\mathbf{k}) + \varepsilon_{xy}^2(\mathbf{k})} - \mu,$$

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\varepsilon_x(\mathbf{k}) \pm \varepsilon_y(\mathbf{k})]$$

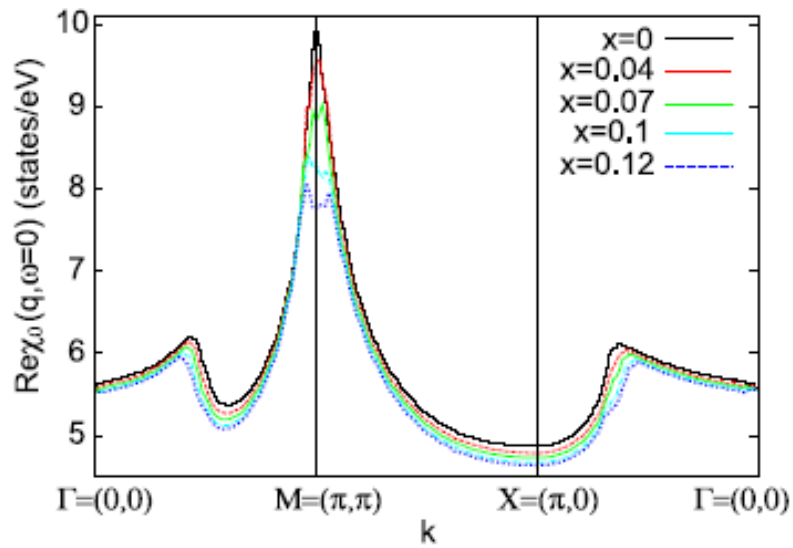
$$\varepsilon_x(\mathbf{k}) = -2t_1 \cos k_x - 2t_2 \cos k_y - 4t_3 \cos k_x \cos k_y$$

$$\varepsilon_y(\mathbf{k}) = -2t_2 \cos k_x - 2t_1 \cos k_y - 4t_3 \cos k_x \cos k_y$$

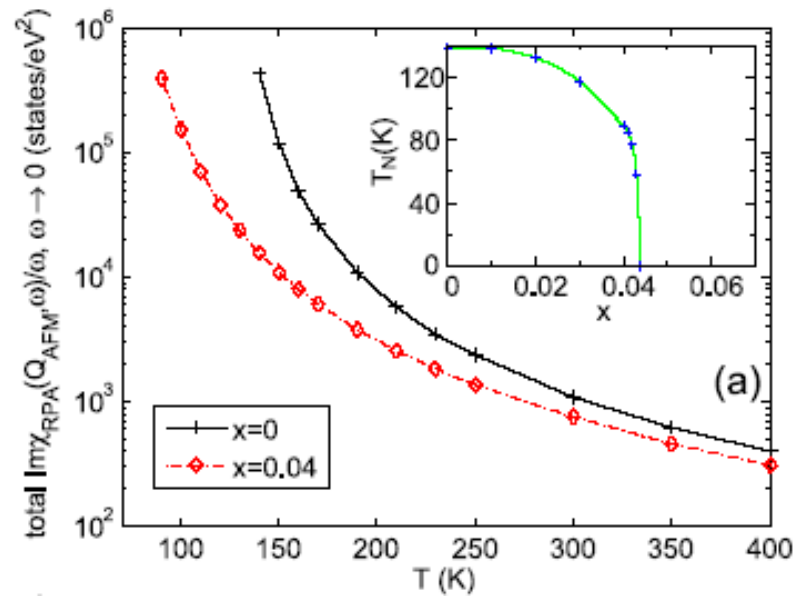
$$\varepsilon_{xy}(\mathbf{k}) = -4t_4 \sin k_x \sin k_y$$

# Магнитная восприимчивость (статическая)

Вещественная часть



Мнимая часть



# Уравнение для спаривательного взаимодействия

Гамильтониан

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{ab} c_{iab}^+ c_{jbs\sigma} + U \sum_{ia} n_{ia\uparrow} n_{ia\downarrow}$$

Линеаризованное уравнение для сверхпроводящего ПП

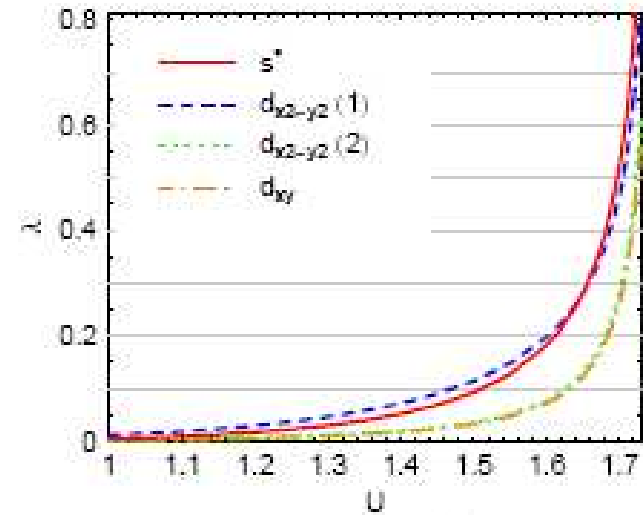
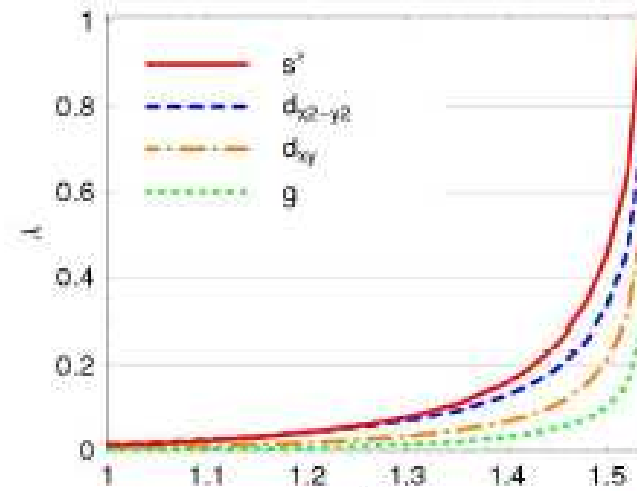
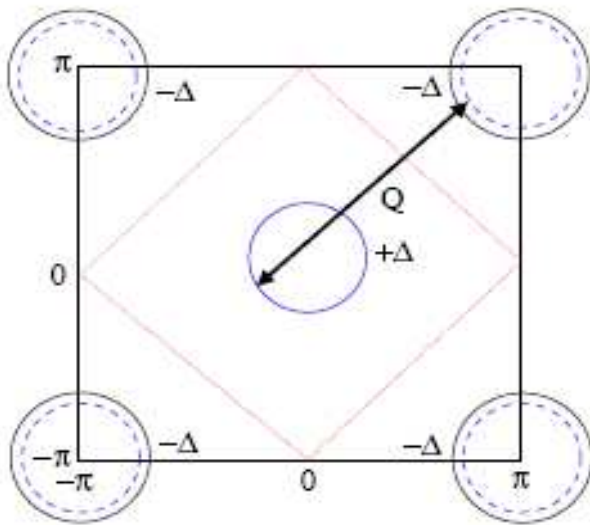
$$\lambda \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = T \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\alpha'\beta'} V_{\alpha'\beta'}^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) G_{\alpha'\alpha'}(\mathbf{q}) G_{\beta\beta'}(\mathbf{q}) \Phi_{\alpha'\beta'}(\mathbf{q}),$$
$$V_{\alpha'\beta'}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{3}{2} U^2 \chi_{\alpha\beta}^s(\mathbf{q}) - \frac{1}{2} U^2 \chi_{\alpha\beta}^c(\mathbf{q}) + U$$

Спиновая и зарядовая динамические восприимчивости

$$\hat{\chi}^s(\mathbf{q}) = \hat{\chi}^{irr}(\mathbf{q}) \{1 - U \hat{\chi}^{irr}(\mathbf{q})\}^{-1},$$
$$\hat{\chi}^c(\mathbf{q}) = \hat{\chi}^{irr}(\mathbf{q}) \{1 + U \hat{\chi}^{irr}(\mathbf{q})\}^{-1}$$

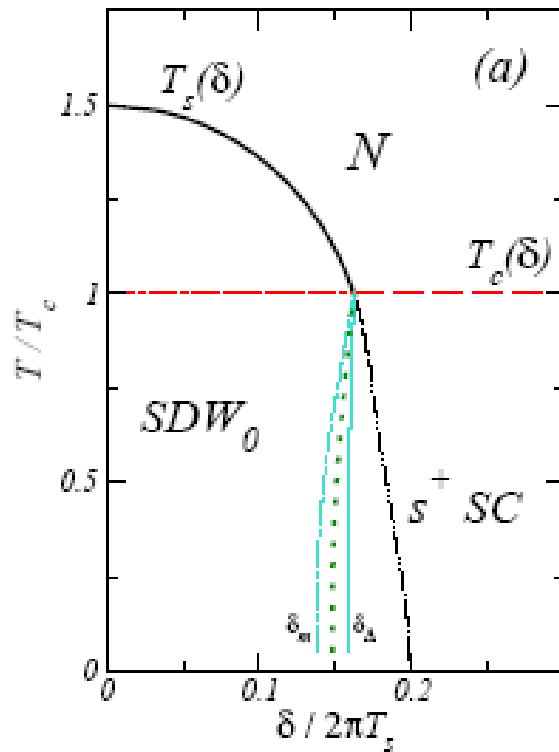


# S+ симметрия сверхпроводящего параметра порядка

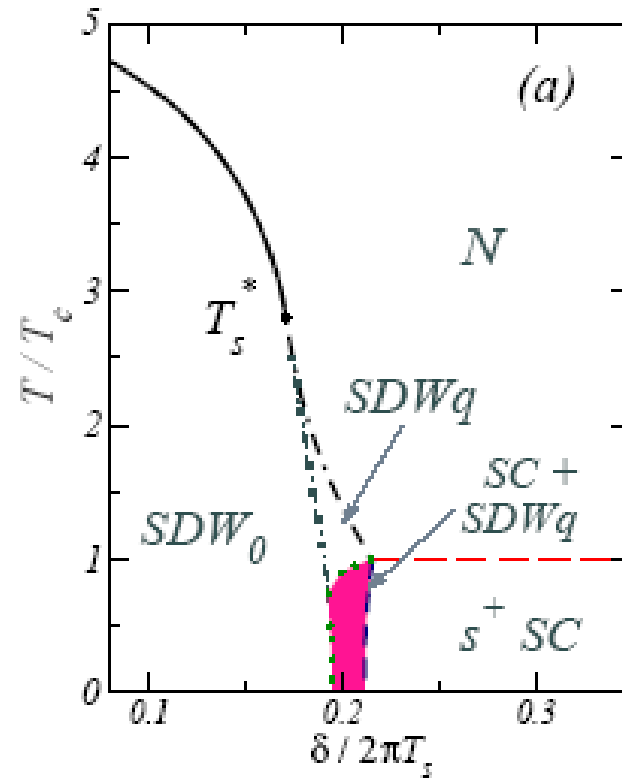


# Сосуществование сверхпроводимости и магнетизма

$T_s/T_c=1,5$



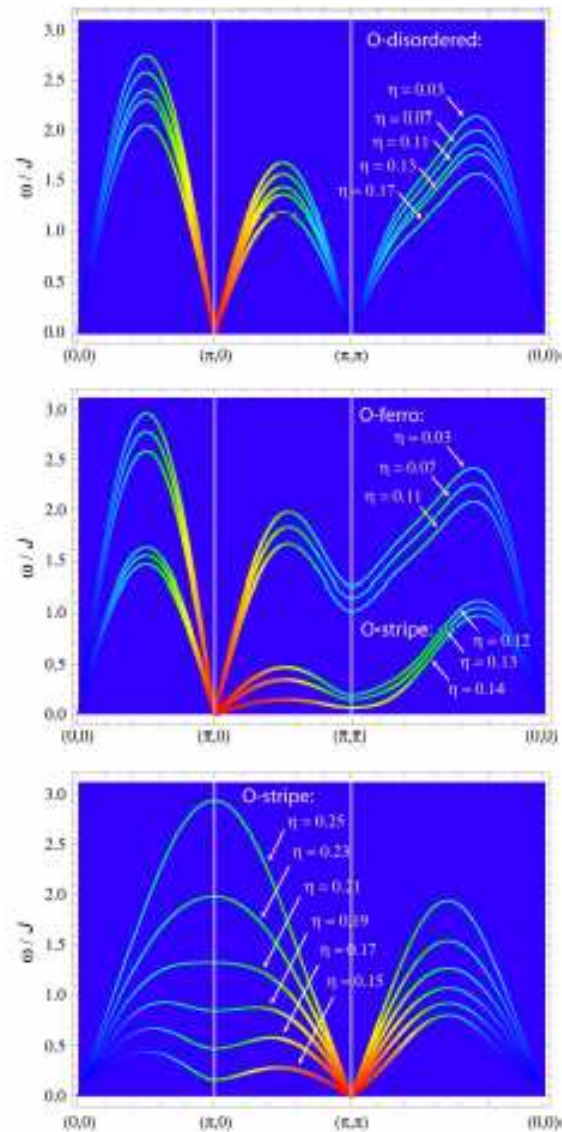
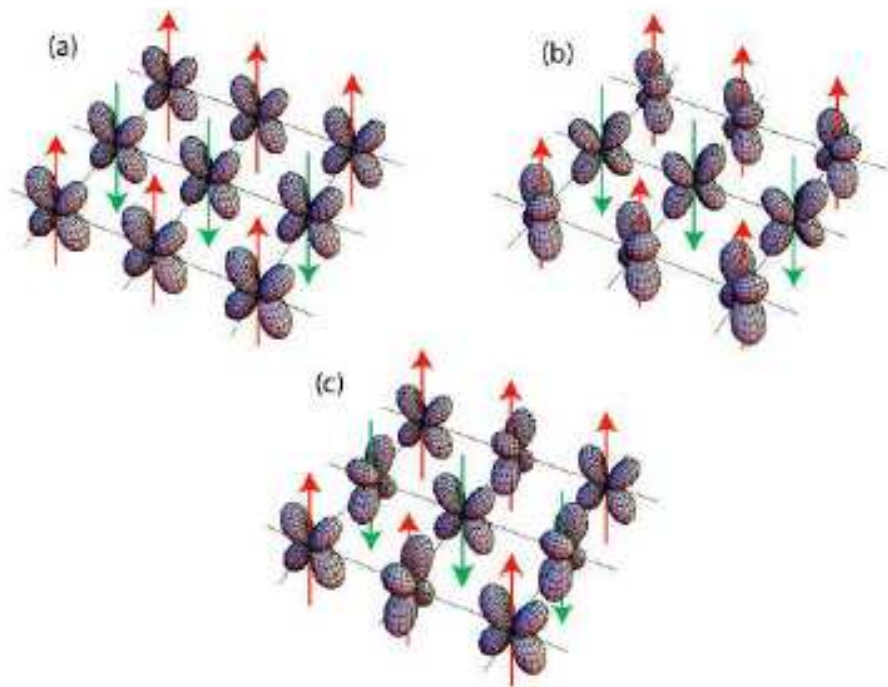
$T_s/T_c=5$



$\delta$  -разница в энергии Ферми на дырочном и электронном листах

# Орбитальное и спиновое упорядочение

Спины: SDW  
 Орбитали:  
 A-(00), B-(10), C-(11)





# Выводы

---

- Имеется три класса соединений с чередующимися плоскостями

FeAs<sub>4</sub>:                    LaOFeAs      BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>      LiFeAs

- При стехиометрическом составе все они AFM металлы. При допировании TN резко падает и возникает сверхпроводимость с максимальными T<sub>c</sub> :    55 K                    38 K                    18 K

- Электронная структура всех соединений одинакова. Вблизи уровня Ферми доминируют двумерные Fe-3d-состояния. Поверхность Ферми многолистная. Имеется 2 дырочных кармана в центре зоны Бриллюэна и 2 электронных в ее углах.

- Симметрия сверхпроводящего параметра порядка однозначно не установлена. Наблюдаются признаки s-симметрии, в некоторых случаях другой тип симметрии: с нулями щели на поверхности Ферми.

- Механизм сверхпроводимости определяется, повидимому, близостью к магнитному фазовому переходу.



# Сравнение с ВТСП купратами

---

## Сходство

- Оба типа соединений содержат чередующиеся плоскости  $\text{FeAs}$  или  $\text{CuO}_2$
- Вблизи уровня Ферми доминируют  $\text{Fe-3d}$  или  $\text{Cu-3d}$  состояния
- Исходные соединения  $\text{LaOFeAs}$  и  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  AFM. Сверхпроводимость возникает при допировании (не Fe и не Cu). При этом AFM подавляется.



## Различие

- При стехиометрическом составе купраты изоляторы, а FeAs системы- металлы.
- В купратах атомы Cu разделены атомами O, поэтому важна гибридизация состояний Cu 3d и O 2p. В FeAs атомы Fe имеют соседями атомы Fe.
- Симметрия сверхпроводящего ПП в купратах d-типа, в FeAs s-типа (мультищель) или с нулями на поверхности Ферми.
- Купраты сильно коррелированные вещества, FeAs-системы, повидимому,- нет.
- В купратах двухслойки ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ ) имеют более высокие  $T_c > 100\text{K}$ , в FeAs-системе (пока)- нет.