

ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ТРЕХЗОННЫХ ФЕРРОПНИКТИДОВ В ОКРЕСТНОСТИ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО (AFM) ПЕРЕХОДА

Каракозов А. Е., Магницкая М. В.

Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Россия

chkara@rambler.ru

Рассчитаны свойства ферропниктидов (FeSCs) с двумя дырочными (L и S) вокруг точки Γ и электронными (E) вокруг точек $X=(\pi, 0)$ и $Y=(0, \pi)$ карманами на поверхности Ферми (FS) в зависимости от отношения интенсивности спиновых и фононных флуктуаций $x = G/U$ как меры близости к AFM переходу. Показано, что в представляющей практический интерес области параметров [1] $0.1 < x < 1$, плотностей состояний $N_L > N_S > N_E$ и анизотропии спин-флуктуационного взаимодействия (SFI) $d(x)$ в моделях слабых и сильных корреляций электронная щель $\Delta_E(x)$ превышает малую дырочную щель $\Delta_S(x)$ и при $x \approx 1$ сравнивается с большой дырочной щелью $\Delta_L(x)$. Анизотропия $\Delta_E(x, T) \bar{d}(x, T)$, отличающаяся от $d(x)$ из-за SFI с s-дырочными L и S зонами, оказывается порядка 0.2-0.3 в обеих моделях.

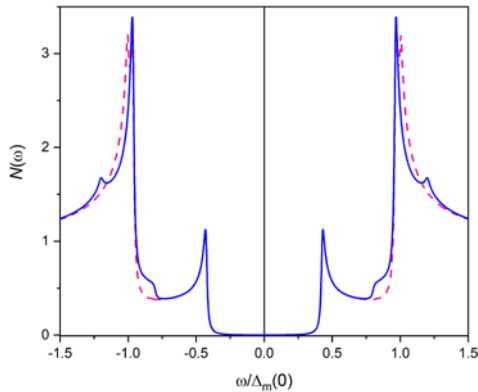


Рис. 1. Нормированная плотность состояний FeSC с почти совпадающими Δ_E и Δ_L ($x \approx 1$, $\bar{d} \approx 0.2$) и изотропного FeSC с такими же щелями (пунктир) при $T \rightarrow 0$.

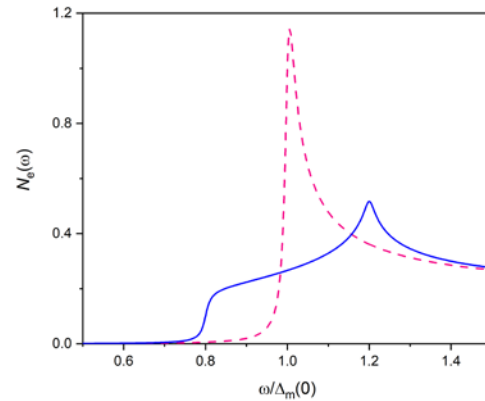


Рис. 2. Нормированная плотность состояний E-зоны FeSC с почти совпадающими Δ_E и Δ_L ($x \approx 1$, $\bar{d} \approx 0.2$) и изотропного FeSC с такими же щелями (пунктир) при $T \rightarrow 0$.

Таким образом, в большой окрестности AFM перехода ($x > 0.5$) анизотропная Δ_E и Δ_L перекрываются. Кластер $\{\Delta_E(x, T), \Delta_L(x, T)\}$ имеет сложную структуру (рис. 1, 2), причем максимум $N_E(\omega)$ (и его температурная зависимость) не совпадают с $\Delta_E(t)$ на величину порядка анизотропии E-щели $\bar{d}(x, T)$, из-за чего стандартный двухзонный анализ неверно оценивает нефононный вклад в сверхпроводимость FeSCs [2]. Разработанная нами модель, учитывающая структуру FS и анизотропию SFI, может служить базовой в исследовании роли корреляционных эффектов в механизме сверхпроводимости FeSCs.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФ (грант № 22-22-00806).

1. Karakozov A.E., Magnitskaya M.V., Kadyrov L.S., Gorshunov B.P. Phys.Rev.B 99, 054504 (2019).
2. Каракозов А.Е., Магницкая М.В. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования 4, 39 (2022).