Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН) Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)

На правах рукописи

um

Шестаков Вадим Андреевич

Влияние немагнитных примесей на сверхпроводящее состояние в многозонных моделях ферропниктидов

Специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент Коршунов Максим Михайлович

 ${\rm Красноярск}-2021$

Оглавление

Стр.

Введе	ние.		4
Глава	 Оба 	зор литературы. Основные свойства	
	фе	рропниктидов и методы расчётов	9
1.1	1 Краткие сведения о теории сверхпроводимости		
1.2	Необычная сверхпроводимость в соединениях железа		
	1.2.1	Кристаллическая и электронная структура	11
	1.2.2	Фазовая диаграмма «Температура-допирование»	13
	1.2.3	Роль и величина электронных корреляций	14
	1.2.4	Симметрия и структура сверхпроводящего параметра	
		порядка	15
1.3	Teope	тические модели соединений железа	17
	1.3.1	Четырёхзонная модель	17
	1.3.2	Простая двухзонная модель	19
1.4	Влияние немагнитных примесей на сверхпроводящее состояние .		
	1.4.1	Примеси в сверхпроводниках	23
	1.4.2	Учёт рассеяния на немагнитных примесях в двухзонной	
		модели	24
	1.4.3	Переход между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями в ферропниктидах	26
1.5	Спин-резонансный пик в ферропниктидах		
	1.5.1	Динамическая спиновая восприимчивость в	
		многоорбитальных и многозонных системах	29
	1.5.2	Спин-резонансный пик в четырёхзонной модели	
		сверхпроводящих соединений железа	36
Гпава	2 Bm	ияние экспериментально наблюдаемых	
глара		ияние экспериментально наотодаемых бенностей ферропниктилов на спин-резонансный пик	40
21	Спин-	резонансный пик в сверупроволниках на основе железа с	10
2.1	неравными по амплитиле шелями		
	2.1.1	Результаты	41
	2.1.1	Сравнение с экспериментальными данными	44
2.2	Влиян	чие примесного рассеяния на спин-резонансный пик в	
	сверхі	проводниках на основе железа	47

		(Стр.
	2.2.1	Результаты и обсуждение	48
2.3	Заклю	чение	49
Глава	3. Дет	али вызванного рассеянием на немагнитных	
	при	месях перехода между s_\pm - и s_{++} -состояниями в	
	дву	хзонной модели сверхпроводников на основе железа	51
3.1	Модел	ь и методы	51
3.2	Детал	и перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ при низких температурах	52
3.3	Темпе	ратурная зависимость перехода между s_{\pm} - и	
	s_{++} -co	стояниями	54
3.4	Заклю	чение	59
Глава	4. Тем	пературная зависимость лондоновской глубины	
	про	никновения магнитного поля при наличии	
	пер	ехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$	63
4.1	Модел	ъ и методы	64
4.2	Резуль	ьтаты	65
	4.2.1	Глубина проникновения при наименьшей температуре	
		$T \to 0$	66
	4.2.2	Глубина проникновения λ_L и λ_L^{-2} в широком	
		температурном диапазоне	66
	4.2.3	Изменение в глубине проникновения с температурой,	
		$\Delta\lambda_L(T)$	69
	4.2.4	Температурная зависимость плотности сверхтекучей	
		жидкости $\rho_s(T)$	69
4.3	Заклю	чение	71
Вывод	цы		73
Списо	к литеј	ратуры	76

Введение

Ферропниктиды или пниктиды железа — открытый относительно недавно и один из наиболее исследуемых классов высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). Согласно имеющимся на данный момент представлениям, наблюдаемые высокие критические температуры сверхпроводящего перехода T_c не могут быть объяснены в рамках классической теории Бардина-Купера-Шриффера, применимой к сверхпроводникам с параметром порядка обладающим симметрией *s*-типа. Таким образом, данные материалы относятся к классу экзотических или необычных сверхпроводников, таких как сверхпроводящие купраты. Фазовая диаграмма «температура-допирование» последних схожа с фазовой диаграммой ферропниктидов. Несмотря на кажущееся на первый взгляд подобие, необычной сверхпроводимости в пниктидах железа и купратах присущи различные свойства. В частности, различается поведение систем при наличии немагнитного беспорядка.

 T_c в обычных сверхпроводниках с щелью *s*-типа не чувствительна к немагнитному беспорядку, но стремительно спадает с ростом числа магнитных примесей. С другой стороны, необычная сверхпроводимость с параметром порядка *d*-типа разрушается за счёт рассеяния на немагнитных примесях, и критическая температура подавляется подобно классическим сверхпроводникам с магнитными примесями. В то же время в ферропниктидах T_c подавляется не столь интенсивно и может даже выходить на насыщение. Предполагается, что такое поведение связано с переходом из сверхпроводящего состояния со знакопеременным параметром порядка s_{\pm} -типа в состояние с сохраняющим знак параметром порядка $s_{\pm+}$ -типа при добавлении беспорядка в систему.

Каждый из типов параметров порядка в чистом случае обусловлен различными взаимодействиями: s_{\pm} – спиновыми флуктуациями, s_{++} – флуктуациями орбитального момента, усиленными электрон-фононным взаимодействием. Таким образом, наблюдая переход, можно сделать вывод о изначальной структуре параметра порядка, а зная тип параметра порядка можно судить и о механизме возникновения необычной сверхпроводимости в соединениях железа. Существование такого перехода, $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$, однако, всё ещё достоверно не подтверждено. Оба состояния обладают параметрами порядка, которые принадлежат к одному и тому же классу симметрии. Следовательно, эксперименты по измерению удельной теплоёмкости и теплопроводности, а также фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy, ARPES) не подходят на роль надёжных инструментов. Этот вопрос может решить рассмотрение температурной зависимости лондоновской глубины проникновения, которая должна проявлять характерные признаки бесщелевого поведения, сопровождающего рассматриваемый переход. Все вышеперечисленные факты, касающиеся ферропниктидов, могут быть непосредственно расширены на весь класс сверхпроводников на основе железа, включающих в себя также халькогениды железа.

Ещё одним характерным указателем на s_{\pm} -структуру параметра порядка является спин-резонансный пик в мнимой части динамической спиновой восприимчивости или, более конкретно, в мнимой части спиновой корреляционной функции, наблюдаемый в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов (Inelastic Neutron Scattering, INS). При рассмотрении спин-резонансного пика необходимо знать, как он ведёт себя при добавлении в систему беспорядка. Ряд экспериментов указывает на наличие в ферропниктидах неравных по величине щелей. Поэтому, известный из рассмотрения купратных сверхпроводников, критерий « Ω_R ниже приблизительно 2Δ » определения того, является ли наблюдаемый пик спин-резонансным, требует обязательного уточнения с учётом имеющихся особенностей необычного сверхпроводящего состояния в ферропниктидах.

Целью данной работы является описание особенностей вызываемого рассеянием на немагнитных примесях перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями, а также описание поведения спиновой корреляционной функции сверхпроводника с s_{\pm} -параметром порядка при наличии немагнитных примесей и неравных сверхпроводящих щелей в различных зонах.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- Исследовать спин-резонансный пик в четырёхзонной модели с неравными сверхпроводящими щелями. Провести анализ влияния примесного рассеяния на формирование спин-резонансного пика.
- 2. Исследовать переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ при низких температурах для различных соотношений между внутри- и межзонными компонентами рассеивающего потенциала примеси в различных пределах: от борнов-

ского до унитарного. Рассмотреть, проявляется ли данный переход в борновском пределе в виде аномалий в критической температуре T_c .

- 3. Исследовать влияние температуры на переход между s_{\pm} и s_{++} -состояниями.
- 4. Исследовать температурную зависимость лондоновской глубины проникновения магнитного поля и определить особенности, указывающие на переход.

Научная новизна:

- Уточнён критерий определения частоты спин-резонансного пика с учётом неравных сверхпроводящих щелей. На основе данного критерия проведён анализ имеющихся экспериментальных данных о неравных сверхпроводящих щелях и частоте пика в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов. Рассмотрено влияние рассеяния на немагнитных примесях на спин-резонансный пик в четырёхзонной модели в простом приближении статической примесной собственно-энергетической части.
- 2. Впервые рассмотрен переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ для различных соотношений между внутри- и межзонными компонентами рассеивающего потенциала примеси, а также, в широких пределах величины примесного потенциала: от борновского предела до унитарного. Показано, почему рассматриваемый переход в борновском пределе не проявляет себя в виде каких-либо аномалий в T_c .
- 3. Впервые рассмотрен переход одновременно в зависимости от интенсивности рассеяния на примесях (пропорциональной концентрации примесей) и от температуры. Показано, что переход между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями оказывается зависящим от температуры. Система, перейдя в s_{++} -состояние при низкой температуре, при повышении температуры может вернуться в s_{\pm} -состояние.
- 4. Впервые представлен набор признаков данного перехода, которые можно наблюдать в экспериментах по измерению лондоновской глубины проникновения.

Практическая значимость Результаты, изложенные в диссертации, сами по себе представляют интерес для описания свойств рассматриваемых соединений, а также могут служить основой для построения новых теоретических подходов и подготовки экспериментов. Методология и методы исследования. Ряд экспериментально наблюдаемых характеристик сверхпроводящих соединений железа, таких как малая величина магнитного момента и отсутствие диэлектрического состояния даже в недопированных образцах, свидетельствуют в пользу того, что электронные корреляции в данных материалах не очень велики. В то же время ферми-поверхность рассматриваемых соединений железа указывает на то, что многоорбитальная и, соответственно, многозонная физика играет в них существенную роль. Кроме того, тот факт, что поверхность Ферми, наблюдаемая в экспериментах, хорошо согласуется с результатами расчётов из первых принципов, является дополнительным свидетельством в пользу слабых или умеренных электронных корреляций в ферропниктидах. Таким образом, мы используем наиболее соответствующий данным соединениям подход теории ферми-жидкости. В частотности, многозонное обобщение теории Элиашберга для описания влияния примесей на сверхпроводящее состояние и обобщение приближения хаотических фаз для вычисления спиновой восприимчивости.

Основные положения, выносимые на защиту:

- Результаты расчётов спин-резонансного пика в многозонных s_±-сверхпроводниках с неравными щелями. Анализ зависимости спинрезонансного пика от рассеяния на примесях.
- Обнаружение плавного изменения щелей при переходе s_± → s₊₊ в широкой области параметров рассеяния на примесях и обнаружение резкой смены знака низшей мацубаровской сверхпроводящей щели при переходе между s_±- и s₊₊-состояниями вблизи борновского предела.
- Расчёт фазовой диаграммы «интенсивность рассеяния на примесях температура» для борновского предела и промежуточного режима рассеяния на примесях.
- Анализ возможных проявлений перехода s_± → s₊₊ в лондоновской глубине проникновения магнитного поля в сверхпроводник.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением методов широко апробированных для изучения многозонных систем, а также согласием результатов работы с результатами других авторов и экспериментальными данными.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих международных конференциях: Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА-XXXVII», Верхняя Сысерть, 2018; The VII Euro-Asian Symposium "Trends in Magnetism" (EASTMAG-2019), Екатеринбург, 2019; Международная зимняя школа физиков-теоретиков «KO-УPOBKA-XXXVIII», Верхняя Сысерть, 2020; Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Проспект Свободный», Красноярск (2015,2016,2018-2020); а также на региональных и местных конференциях: XI Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур OKHO-2016, Красноярск, 2016; XIII Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур OKHO-2021, Новосибирск, 2021; Конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, (2019-2020); Конкурс-конференция ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых учёных, аспирантов и студентов. Секция «Физика», Красноярск, (2017-2020).

Личный вклад. Автор принимал непосредственное участие в получении результатов, а также активное участие в постановке задач и подготовке результатов к публикациям.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 29 печатных изданиях [1—29], 7 из которых изданы в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 22— в тезисах докладов.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, и заключения. Полный объём диссертации составляет 95 страниц, включая 30 рисунков. Список литературы содержит 190 наименований.

Глава 1. Обзор литературы. Основные свойства ферропниктидов и методы расчётов

1.1 Краткие сведения о теории сверхпроводимости

Согласно микроскопической теории Бардина-Купера-Шриффера (или БКШ-теории) [30], в основном состоянии сверхпроводника все электроны связаны в куперовские пары. Мерой связи является величина $\Delta_{\mathbf{k}}$, определяющая щель в спектре одночастичных возбуждений сверхпроводника, энергия которых выражается формулой

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2},\tag{1.1}$$

где $\xi_{\mathbf{k}}$ — энергия электрона в нормальной фазе с импульсом \mathbf{k} , отсчитанная от уровня Ферми. Величина щели $\Delta_{\mathbf{k}}$ определяется из самосогласованного уравнения

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = -\sum_{\mathbf{k}'} \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{2E_{\mathbf{k}'}} \Delta_{\mathbf{k}'}(T) \tanh \frac{E_{\mathbf{k}'}}{2T},$$
(1.2)

где $V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ — энергия взаимодействия электронов с импульсами \mathbf{k} и \mathbf{k}' , формирующих куперовскую пару. В теории БКШ $V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ определяется константой электрон-фононного взаимодействия g_{el-ph}^2 :

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -g_{el-ph}^2,\tag{1.3}$$

и уравнение на щель даёт решение $\Delta_{\mathbf{k}}(T) = \Delta_0(T)$. Таким образом, волновая функция всех куперовских пар (сверхпроводящий параметр порядка) изотропна, подобно волновой функции *s*-состояния электронов в атоме. Поэтому такое состояние сверхпроводника называется сверхпроводящим состоянием с симметрией *s*-волны. Все сверхпроводники с *s*-типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка называются обычными или классическими сверхпроводниками.

Теория БКШ рассматривает в качестве источника сверхпроводящего состояния только электрон-фононное взаимодействие, имеющее характер притяжения. В различных классах веществ взаимодействие, которое приводит к формированию куперовской пары, может происходить не только из обмена фононами, но и, например, за счёт флуктуаций спина или орбитального момента. Если преобладает спин-флуктуационное взаимодействие, то результирующая величина энергии взаимодействия электронов может оказаться положительной $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') > 0$, т. е. эффективное взаимодействие приобретает характер отталкивания. В том случае, когда $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ имеет максимум на определённом волновом векторе $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{Q}$, и если для простоты предположить, что

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = |\Lambda| \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{Q}), \qquad (1.4)$$

где Λ — константа связи, то у уравнения (1.2) существует решение, меняющее знак при смещении на волновой вектор **Q**, и в простейшем случае имеющее вид:

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = -\Delta_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}}(T). \tag{1.5}$$

Таким образом, эффективное отталкивательное взаимодействие между электронами может приводить к возникновению необычной сверхпроводимости со знакопеременной щелью. Сверхпроводящие соединения, у которых параметр порядка имеет отличную от *s*-волны симметрию называются необычными или экзотическими сверхпроводниками.

1.2 Необычная сверхпроводимость в соединениях железа

Материалы на основе железа обладают рядом отличительных особенностей, таких как необычная сверхпроводимость [31—36], существенно многозонная электронная структура [37—41]. Эти особенности проявляются в множестве экспериментов. Например, при измерении транспортных коэффициентов и рамановских спектров [42—45], при исследовании магнитного и немагнитного состояния [46—49]. Необычная сверхпроводимость в данных материалах представляет особый интерес, поскольку температура перехода в сверхпроводящее состояние (T_c) достигает 58 K в объёмных материалах [50] и 110 K в монослоях FeSe [51—55]. Таким образом, данный класс материалов относится к высокотемпературным сверхпроводникам.

1.2.1 Кристаллическая и электронная структура

Класс сверхпроводящих соединений железа подразделяется на два подкласса — пниктиды и халькогениды железа. Базовым структурным элементом в данных соединениях являются слои, в которых железо, расположенное в квадратной решётке, находится в тетраэдрическом окружении атомов мышьяка или фосфора (Pn: As, P) для первого подкласса соединений (ферропниктидов), либо селена, теллура или серы Ch: (Se, Te, S) для халькогенидов, см. Рисунок 1.1. Сообщалось также об открытии сверхпроводимости в силицидах железа LaFeSiH [56; 57]. Однако на данный момент по данным материалам очень мало информации и опубликовано лишь две упомянутые работы. В литературе принято обозначать сверхпроводящие соединения железа набором чисел, отражающих количество атомов, образующих элементарную ячейку кристалла недопированного соединения, и одного из элементов (при наличии), образующих слой разделяющий слои FePn(Ch). Например, запись Sm-1111 обозначает исходное соединение SmFeAsO, Ba-122 — BFe₂As₂, 11 — FeSe(Te) и т. д.

Замена ионов в промежуточных слоях на атомы с большим или меньшим числом электронов приводит, соответственно, к электронному или дырочному допированию. Возможно также допировать систему заменой атомов в FePn(Ch)-слоях, либо образованием избытка или недостатка атомов железа.



Рисунок 1.1 — Кристаллическая структура соединений 11[FeSe(Te)], 111[NaFeAs], 1111[LaOFeAs], 112[Ca(La)FeAs] и 112[BaFe]

Поскольку атомы Pn(Ch) находятся, попеременно, выше и ниже плоскости Fe, то возникает два неэквивалентных положения атомов железа. Следовательно, в элементарной ячейке находятся по два иона Fe и Pn(Ch). С помощью различных экспериментальных методик, в силу их специфики, можно исследовать одну или другую конфигурацию. Так например, в ARPES-экспериментах измерения проводятся для конфигурации с двумя атомами Fe и двумя атомами Pn(Ch) на элементарную ячейку, а рассеяние нейтронов происходит на спинах железа и, следовательно, несёт информацию об элементарной ячейке, содержащей один атом железа. Поэтому следует по возможности учитывать обе конфигурации. Переход от элементарной ячейки с одной парой FePn(Ch) к элементарной ячейке с двумя парами FePn(Ch) приводит к двухкратному уменьшению первой зоны Бриллюэна, а симметричные точки X = $(\pi/a,0)$ и Y = $(0, \pi/a)$ переходят в точку M = $(\pi/(a\sqrt{2}), \pi/(a\sqrt{2}))$, где a — сторона квадратной решётки Fe. В дальнейшем, для краткости, зону Бриллюэна, соответствующую двум и одному атомам железа на ячейку, мы будем обозначать как 2-FeBZ (BZ, Brillouin Zone) и 1-FeBZ, соответственно.

Наличие одинакового основного структурного элемента во всех соединениях железа и качественно схожая слоистая кристаллическая структура приводят к тому, что весь этот класс сверхпроводников обладает качественно схожей электронной структурой. Это подтверждается первопринципными расчётами [58—61] и экспериментами, например, ARPES [62; 63].

Поверхность Ферми состоит из двух или трёх дырочных листов, центрированных в точке Г, и двух электронных листов, центрированных в точке М, в 2-FeBZ. Исключения составляют случаи экстремального электронного или дырочного допирования, когда остаётся только одна группа листов поверхности Ферми. Кроме того, ферми-поверхность формируется всеми пятью 3d-орбиталями железа, из них орбитали d_{xz} , d_{yz} , и частично, d_{3z^2-r} участвуют в формировании дырочных листов поверхности Ферми, попарно орбитали (d_{xz}, d_{xy}) и (d_{yz}, d_{xy}) вносят вклад в электронные листы ферми-поверхности. Квазичастицы обладают слабой зависимостью от импульса k_z , поэтому поверхность Ферми в окрестности точек Г и М (X, Y) имеет цилиндрический характер. В результате, поверхность Ферми можно считать квазидвумерной, образованной двумя (или тремя) дырочными карманами, центрированными в точке Г, и двумя электронными карманами, центрированными в точке M (X, Y). При электронном или дырочном допировании соответствующие карманы поверхности Ферми изменяют свой размер, но, как правило, сохраняются. Исключение составляют случаи сильного электронного или дырочного допирования, как, например в соединении KFe₂As₂, в котором значительное увеличение дырочных

карманов сопровождается исчезновением электронных карманов, или соединение $\mathrm{KFe_2Se_2}$, в котором исчезают дырочные карманы в области точки Γ , а остаются только электронные.

1.2.2 Фазовая диаграмма «Температура-допирование»

В недопированном состоянии ферропниктиды и халькогениды являются антиферромагнитными (AFM) металлами с температурой Нееля $T_N \sim$ (100 – 300) К. Ориентация спинов в AFM-фазе для разных типов соединений различна: в соединениях 1111 и 122 реализуется магнитный порядок страйпового типа, а в соединениях 11 — шахматного типа. Выше температуры Нееля данные материалы находятся в парамагнитной (РМ) фазе. Фазовый переход из РМ- в AFM-фазу сопровождается структурным фазовым переходом из тетрагональной в орторомбическую или моноклинную фазу. Изменение кристаллографической симметрии и возникновение магнитного упорядочения может происходить либо при различных температурах (например, соединения 1111), либо при одной и той же температуре (соединения 122). Типичная фазовая диаграмма представлена на Рисунке 1.2. Отдельно стоит упомянуть соединения 111, остающиеся парамагнитными металлами даже при низких температурах [64—68], за исключением NaFeAs, который, как было показано в работе [69], испытывает структурный, магнитный и сверхпроводящий фазовые переходы при 52, 41 и 23 К, соответственно. Кроме того, соединения подкласса 245 халькогенидов проявляют свойства AFM-диэлектриков с $T_N \sim 500$ K [35].

Сверхпроводимость в данных материалах возникает тогда, когда антиферромагнетизм исчезает или в значительной степени подавляется допированием, структурным изменением посредством прикладываемого внешнего гидростатического или внутреннего химического давления из-за изовалентной замены атомов в кристаллической решётке. Из общей картины снова выделяются 245-халькогениды (см., например, [35]), и вместе с ними 1144-ферропниктиды [70], которые не требуют допирования. Соединения железа в сверхпроводящей фазе обладают тетрагональной симметрией. Магнитное упорядочение может сосуществовать со сверхпроводимостью [71—73], см. Рисунок 1.2. Для соединений 1111- и 122-типов это сосуществование имеет различную природу.



Рисунок 1.2 — Фазовая диаграмма семейства 122 пниктидов и халькогенидов железа, при дырочном (правая половина) и электронном (левая половина) допировании [39]. Фаза SDW (Spin Density Wave, волна спиновой плотности) — фаза с антиферромагнитным упорядочением, фаза SC (Superconducting) — сверхпроводящая фаза

Например, в 1111-соединении SmFeAsO_{0,85}F_{0,15} ($T_c = 52$ K) при $T \approx 6$ K обнаруживается антиферромагнитное упорядочение подрешётки Sm, в то время как магнитный порядок в FeAs слоях подавлен. В 122-соединениях дело обстоит иначе — так, например, было показано, что в соединении Ba(Fe_{1-x}Co_x)As₂ на каждом атоме Fe обнаруживается статический магнитный момент в сверхпроводящей фазе [74] и область сосуществования микроскопически однородна [72; 73].

1.2.3 Роль и величина электронных корреляций

Фазовая диаграмма для соединений железа (Рисунок 1.2) похожа на фазовую диаграмму другого класса высокотемпературных сверхпроводников купратов. ВТСП-купраты являются соединениями с сильными электронными корреляциями, и схожесть фазовых диаграмм наводит на мысль, что и в соединениях железа присутствуют сильные корреляции. На самом деле между купратами и ферропниктидами (халькогенидами) имеются существенные отличия. Во-первых, в нормальном состоянии, из-за сильных электронных корреляций, купраты являются моттовскими диэлектриками, хотя первопринципные расчёты приводят к результатам, в которых купраты являются хорошими металлами [75], что не делает чести расчётам. Соединения железа, наоборот, являются металлами, и расчёты хорошо согласуются с экспериментами. Во-вторых, различается величина магнитного момента: большая величина магнитного момента на атомах Cu, 1,2 μ_B [76], говорит о сильной локализации магнитного момента, что в очередной раз свидетельствует в пользу сильных электронных корреляций в купратах. В пниктидах железа, в свою очередь, наблюдается малый магнитный момент на атомах Fe, $(0,2-0,9)\mu_B$ [77; 78], что указывает на делокализованность магнитного момента в данных соединениях.

Перечисленные выше различия позволяют полагать, что в соединениях железа электронные корреляции не играют определяющей роли. Тем не менее, ряд экспериментальных данных показывает, что с электронными корреляциями всё же следует считаться. Так, например, электросопротивление в нормальном состоянии оказывается слишком большим, а в оптической проводимости отсутствует пик Друде и имеет место перераспределение спектрального веса с изменением температуры (см., например, [79; 80]). Таким образом, соединения железа можно отнести к слабо или умеренно коррелированным системам.

1.2.4 Симметрия и структура сверхпроводящего параметра порядка

В настоящее время вопрос определения симметрии сверхпроводящего параметра порядка окончательно не решён. Измерения сдвига Найта в различных соединениях железа (см., например, [81—83]) показали, что сверхпроводящее состояние не является спин-триплетным, т. е. параметр порядка не обладает *p*- или *f*-симметрией.

Структура поверхности Ферми обеспечивает практически идеальный нестинг на антиферромагнитном волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Дальнодействующее антиферромагнитное SDW-состояние разрушается с допированием, однако усиленные спиновые флуктуации сохраняются. Считается, что эти флуктуации являются главным источником куперовских пар, внося основной вклад в формирование сверхпроводящего состояния [31; 33; 84]. Поскольку спиновые флуктуации с большим волновым вектором $\sim \mathbf{Q}$ приводят к отталкивающему межзонному куперовскому взаимодействию, функция щели должна быть зависящей от импульсов и менять знак между дырочными и электронными карманами чтобы скомпенсировать знак взаимодействия в уравнении на щель. Наиболее простое решение носит название s_+ -состояния и соответствует неприводимому представлению A_{1q} с щелью, имеющей один знак в пределлах дырочных карманов и противоположный знак в пределах электронных карманов поверхности Ферми. В то же время, зоны вблизи уровня Ферми имеют смешанный орбитальный характер. Следовательно, флуктуации орбитального момента усиленные, к примеру, электрон-фононным взаимодействием или вершинными поправками, также могут приводить к сверхпроводимости [85-87]. Эти два механизма сверхпроводящего спаривания отличаются доминирующей структурой сверхпроводящей щели: знакопеременным *s*₊-состоянием для спиновых флуктуаций и сохраняющим знак s_{++} -состоянием для орбитальных флуктуаций. Кроме знакопеременного s₊-параметра порядка, относящегося к A_{1a}-представлению симметрии, возможен другой тип меняющего знак параметра порядка с нулями на поверхности Ферми — параметр порядка с, так называемой, *d*- или $d_{x^2-y^2}$ -симметрией, относящийся к неприводимому представлению B_{1g} . Таким образом, точное знание симметрии сверхпроводящего параметра порядка может пролить свет на механизм образования сверхпроводящего спаривания в соединениях железа. Увы, но структура сверхпроводящей щели всё ещё не была достоверно установлена в экспериментах. Тем не менее, ряд экспериментальных наблюдений, таких как спин-резонансный пик в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов (Inelastic Neutron) Scattering, INS) [88—91], интерференция квазичастиц в экспериментах по андреевскому туннелированию [92—95], скорость спин-решёточной релаксации в экспериментах с ядерным магнитным резонансом (ЯМР) [96; 97], а также температурная зависимость лондоновской глубины проникновения [98—100] естественным образом объясняются наличием s_{\pm} -состояния. Параметр порядка *d*-типа реализуется, вероятно, в соединении KFe₂Se₂ и обсуждается для соединения KFe₂As₂ [101; 102].

1.3 Теоретические модели соединений железа

1.3.1 Четырёхзонная модель

Поскольку ВТСП на основе железа обладают существенно многозонной электронной структурой, то даже для качественного описания физики в данных соединениях следует учитывать как минимум две орбитали или, соответственно, электронные зоны. Наилучшее соответствие с первопринципными расчётами и экспериментальными данными дают модели, учитывающие четыре, или даже все пять 3*d*-орбиталей железа. Однако учёт всё большего числа орбиталей ведёт к увеличению трудоёмкости расчётов, поэтому при выборе теоретической модели следует руководствоваться не только максимально точным описанием физики реальных систем, но и тем, что принимаемая к рассмотрению модель должна быть наиболее простой. Данным критериям удовлетворяет четырёхзонная модель, предложенная в работе [89]. Одноэлектронный гамильтониан модели в диагонализированном виде записывается следующим образом:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\mu,\sigma} \xi^{\mu}_{\mathbf{k}} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\mu\sigma} a_{\mathbf{k},\mu\sigma}, \qquad (1.6)$$

где $a_{\mathbf{k}\mu\sigma}$ — это оператор уничтожения электрона с импульсом \mathbf{k} , спином σ , и зонным индексом $\mu = \{a_1, a_2, b_1, b_2\}$ (*a* для дырочных и *b* для электронных зон, соответственно), $\xi_{\mathbf{k}}^{\mu} = \varepsilon^{\mu} + t_{\mathbf{k}}^{\mu}$ — энергия возбуждений в нормальном металле, включающая одноэлектронную энергию на узле ε^{μ} , дисперсию электронов $t_{\mathbf{k}}^{a_{1,2}}$, приводящую к возникновению дырочных карманов, центрированных вблизи точки Γ и дисперсию электронов $t_{\mathbf{k}}^{b_{1,2}}$, приводящая к возникновению электронных карманов вокруг точки M в 2-FeZB:

$$t_{\mathbf{k}}^{a_{1},a_{2}} = t_{1}^{a_{1},a_{2}} \left(\cos k_{x} + \cos k_{y}\right) + t_{2}^{a_{1},a_{2}} \cos k_{x} \cos k_{y},$$
(1.7)
$$t_{\mathbf{k}}^{b_{1},b_{2}} = t_{1}^{b_{1},b_{2}} \left(\cos k_{x} + \cos k_{y}\right) + t_{2}^{b_{1},b_{2}} \cos \frac{k_{x}}{2} \cos \frac{k_{y}}{2}.$$

Используя обозначение (ε^{μ} ; t_1^{μ} ; t_2^{μ}) можно записать выбранные параметры как (-0,60; 0,30; 0,24) и (-0,40; 0,20; 0,24) для зон a_1 и a_2 , соответственно, и (1,70; 1,14; 0,74) и (1,70; 1,14; -0,64) для, соответственно, зон b_1 и b_2 (все величины приведены в электрон-Вольтах). Электронный спектр и поверхность

Ферми, полученные при таких параметрах и химическом потенциале $\mu = 0$, представлены на рисунке 1.3.



Рисунок 1.3 — Электронный спектр (а) и поверхность Ферми (b) пниктидов железа в четырёхзонной модели [89]. Закрашенные точки на панели (b) относятся к состояниям, связанным друг с другом межзонным рассеянием на антиферромагнитном волновом векторе \mathbf{Q}_{AFM} , пустые точки обозначают внутри- и межзонные рассеяния на нескомпенсированном волновом векторе \mathbf{Q}_{SDW} . Бирюзовые пунктирные линии и знаки «+» и «-» обозначают линии нулей и соответствующую фазу s_{\pm} -параметра порядка на поверхности Ферми. На обеих панелях индексы $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$ обозначают дырочные и электронные зоны,

соответственно

Рассматриваемая модель обладает рядом достоинств. Например, она правильно воспроизводит не только качественные, но и некоторые количественные характеристики, такие как скорости Ферми и топология поверхности Ферми. Кроме того, данную четырёхзонную модель можно редуцировать до двухзонной, что позволяет упростить расчёты, но при этом сохраняет качественное описание явлений в ВТСП на основе железа. Кроме того, как видно из Рисунка 1.3, дырочные карманы имеют форму окружности, а электронные карманы — близкую к ней. Поэтому, редуцировав данную модель до двухзонной, можно пренебречь дисперсией на электронных листах ферми-поверхности и перейти к квазиклассическим ξ -интегрированным функциям Грина при качественном рассмотрении, например, динамических эффектов от рассеяния на примесях. Помимо явных преимуществ рассматриваемая модель обладает одним существенным недостатком — в ней априори задана зонная структура, что делает невозможным определение орбитальных вкладов в формирование ферми-поверхности. Тем не менее, данный недостаток не влияет на эффекты, основанные на топологии поверхности Ферми и не связанные с орбитальным характером зон. Ещё одним существенным недостатком является то, что в даной модели сверхпроводящий параметр порядка статичен и, по сути, является внешним параметром. От этого недостатка позволяет избавиться рассмотрение простой двухзонной модели, исключающей какую-либо **k**-зависимость величин, но учитывающую динамические собственно-энергетические поправки в параметр порядка.

1.3.2 Простая двухзонная модель

Топология поверхности Ферми сверхпроводящих соединений железа (см. Рисунок 1.3) позволяет использовать двухзонную модель, предложенную в работе [103] как компромисс между простотой исследования и возможностью получить результат, проливающий свет на физику в реальных материалах. Исключив по одной дырочной и электронной зонам, можно редуцировать исходную четырёхзонную модель до двухзонной, в которой поверхность Ферми состоит из одного дырочного кармана в центре первой зоны Бриллюэна и одного электронного кармана — в углу (см. Рисунок 1.4 (а)). Далее можно рассмотреть в качестве приближения случай, когда электронный карман и сверхпроводящий параметр порядка вблизи ферми-поверхности изотропны. Заменив в гамильто-



Рисунок 1.4 — Поверхность Ферми в редуцированной двухзонной модели (a) и в двухзонной модели ферми-точек (b) (размер точек выбран для наглядности)

ниане (1.6) дисперсию электронов на линеаризованную вблизи уровня Ферми:

$$\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}}^{\mu} = \mathbf{v}_{F\mu} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_{F\mu}), \qquad (1.8)$$

где $\mathbf{v}_{F\mu}$ и $\mathbf{k}_{F\mu}$ — скорость и импульс Ферми для зоны μ , соответственно, можно провести усреднение по \mathbf{k} .

Сверхпроводимость возникает в данной системе за счёт взаимодействия, которое, в общем случае, может иметь различные формы для различных механизмов спаривания. При дальнейшем рассмотрении предполагается, что задача по нахождению эффективного динамического сверхпроводящего взаимодействия уже решена, и константы связи, также как и спектральная функция бозонов (Рисунок 1.5), уже известны. Последняя описывает эффективное электрон-электронное взаимодействие посредством промежуточного бозона. В случае локального кулоновского (хаббардовского) взаимодействия [104; 105], промежуточными возбуждениями являются спиновые или зарядовые флуктуации [106], в то время как в случае электрон-фононного взаимодействия в их роли выступают фононы.



Рисунок 1.5 — Спектральная функция $B(\Omega)$, отражающая частотную зависимость спиновых флуктуаций [107]

Для учёта собственно-энергетических поправок используется подход Элиашберга для многозонных сверхпроводников [108]. Уравнение Дайсона

$$\hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n) = \left[\hat{\mathbf{G}}_0^{-1}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n) - \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n)\right]^{-1}, \qquad (1.9)$$

устанавливает связь между полной функцией Грина $\hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\omega}_n)$ и, так называемой, «голой» функцией Грина (без учёта межэлектронного взаимодействия и примесей),

$$\hat{G}_0^{\mu\nu}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n) = [\mathrm{i}\boldsymbol{\omega}_n \hat{\boldsymbol{\tau}}_0 - \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{k}\mu} \hat{\boldsymbol{\tau}}_3]^{-1} \,\boldsymbol{\delta}_{\mu\nu},\tag{1.10}$$

а также матрицей собственно-энергетической части $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_n)$. Функция Грина квазичастицы с импульсом **k** и фермионной мацубаровской частотой

$$\boldsymbol{\omega}_n = (2n+1)\pi k_B T \tag{1.11}$$

где k_B — это постоянная Больцмана, n — целое число, представляет собой матрицу в зонном пространстве (обозначается жирным шрифтом) и в пространстве Горькова-Намбу (обозначается символом «^»). Матрицы Паули в последнем обозначаются как $\hat{\tau}_i$, $i = 0, \ldots, 3$:

$$\hat{\tau}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
(1.12)

Далее в рассматриваемом приближении изотропной дисперсии и параметра порядка делается предположение, что собственно-энергетическая часть не зависит от волнового вектора \mathbf{k} , но сохраняет зависимость от частоты и зонных индексов,

$$\hat{\Sigma}(\boldsymbol{\omega}_n) = \sum_{i=0}^{3} \Sigma_{(i)\mu\nu}(\boldsymbol{\omega}_n) \hat{\tau}_i.$$
(1.13)

Таким образом, все уравнения могут быть записаны в терминах квазиклассической функции Грина, проинтегрированной по энергиям, представляющей собой матрицу 4 × 4 в пространстве Горькова-Намбу и зонном пространстве,

$$\hat{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\omega}_n) = \int d\boldsymbol{\xi} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\omega}_n) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{an} & 0\\ 0 & \hat{g}_{bn} \end{pmatrix}, \qquad (1.14)$$

где

$$\hat{g}_{\mu n} = g_{0\mu n} \hat{\tau}_0 + g_{2\mu n} \hat{\tau}_2, \qquad (1.15)$$

где, в свою очередь, $g_{0\mu n}$ и $g_{2\mu n}$ — нормальная и аномальная проинтегрированные по ξ функции Грина в представлении Горькова-Намбу,

$$g_{0\mu n} = -\frac{i\pi N_{\mu}\tilde{\omega}_{\mu n}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{\mu n}^{2} + \tilde{\varphi}_{\mu n}^{2}}}, \quad g_{2\mu n} = -\frac{\pi N_{\mu}\tilde{\varphi}_{\mu n}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{\mu n}^{2} + \tilde{\varphi}_{\mu n}^{2}}}.$$
 (1.16)

Данные функции зависят от плотности состояний на спин на уровне Ферми в соответствующей зоне $(N_{a,b})$ и от перенормированных собственно-энергетической частью параметра порядка $\tilde{\varphi}_{\mu n}$ и частот $\tilde{\omega}_{\mu n}$,

$$i\tilde{\omega}_{\mu n} = i\omega_n - \Sigma_{0\mu}(\omega_n),$$
 (1.17)

$$\tilde{\varphi}_{\mu n} = \Sigma_{2\mu}(\omega_n), \qquad (1.18)$$

где перенормировки $\Sigma_{0(2)\mu}(\boldsymbol{\omega}_n)$ определяются следующим образом:

$$\Sigma_{0\mu}(\boldsymbol{\omega}_n) = 1/2 \operatorname{Tr}\left(\hat{\Sigma}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\omega}_n)\hat{\tau_0}\right), \qquad (1.19)$$

$$\Sigma_{2\mu}(\boldsymbol{\omega}_n) = 1/2 \operatorname{Tr} \left(\hat{\Sigma}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\omega}_n) \hat{\tau}_2 \right).$$
 (1.20)

Таким образом, мы фактически приходим к эффективной модели «фермиточек».

Параметр порядка $\tilde{\varphi}_{\mu n}$ связан с функцией щели $\Delta_{\mu n}$ (именно она задаёт особенности в плотности состояний) посредством фактора перенормировки $Z_{\mu n} = \tilde{\omega}_{\mu n}/\omega_n$, а именно:

$$\Delta_{\mu n} = \tilde{\varphi}_{\mu n} / Z_{\mu n}. \tag{1.21}$$

Часть собственной энергии, связанная со спиновыми флуктуациями или каким-либо иным запаздывающим взаимодействием (электрон-фононным, запаздывающим кулоновским взаимодействием) может быть записана в следующем виде:

$$\Sigma_{0\mu}(\boldsymbol{\omega}_n) = k_B T \sum_{\boldsymbol{\omega}'_n, \boldsymbol{\nu}} \Lambda^Z_{\mu\nu}(n-n') \frac{g_{0\nu n'}}{N_{\boldsymbol{\nu}}}, \qquad (1.22)$$

$$\Sigma_{2\mu}(\boldsymbol{\omega}_n) = -k_B T \sum_{\boldsymbol{\omega}'_n, \boldsymbol{\nu}} \Lambda^{\boldsymbol{\varphi}}_{\mu\boldsymbol{\nu}}(n-n') \frac{g_{2\boldsymbol{\nu}n'}}{N_{\boldsymbol{\nu}}}, \qquad (1.23)$$

Функции взаимодействия,

$$\Lambda^{\varphi,Z}_{\mu\nu}(n-n') = 2\Lambda^{\varphi,Z}_{\mu\nu} \int_0^\infty d\Omega \frac{\Omega B(\Omega)}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega^2},$$

зависят от констант связи $\Lambda_{\mu\nu}^{\varphi,Z}$, включающих в себя плотность состояний N_{ν} , и от, представленной на Рисунке 1.5, нормированной бозонной спектральной функции $B(\Omega)$ [109—111]. Матричные элементы $\Lambda_{\mu\nu}^{\varphi}$ могут быть как положительными (притяжение), так и отрицательными (отталкивание) изза конкурирующих вкладов от спиновых флуктуаций и электрон-фононного взаимодействия [106; 109], в то время как матричные элементы $\Lambda_{\mu\nu}^Z$ всегда положительны. Для простоты можно принять, что $\Lambda_{\mu\nu}^Z = |\Lambda_{\mu\nu}^{\phi}| \equiv |\Lambda_{\mu\nu}|$ и пренебречь возможной анизотропией каждого параметра порядка $\tilde{\phi}_{\mu n}$. Эффекты обусловленные анизотропией в системах с s_{\pm} -состоянием рассматривались, например, в работе [112].

1.4 Влияние немагнитных примесей на сверхпроводящее состояние

1.4.1 Примеси в сверхпроводниках

Рассеяние на немагнитных примесях по разному влияет на сверхпроводники с различной симметрией и структурой щели. Исключительно притягивающее взаимодействие как во внутри-, так и в межзонном каналах приводит к возникновению s_{++} -состояния. Его отклик на беспорядок в системе хорошо изучен благодаря ранним исследованиям классической сверхпроводимости *s*-типа [113; 114], а также современному рассмотрению s_{++} -состояния в рамках многозонных моделей [115]. Согласно, так называемой, теореме Андерсона [113] в однозонном сверхпроводнике *s*-типа немагнитный беспорядок не влияет на критическую температуру сверхпроводящего перехода T_c . В случае необычных сверхпроводников теорема Андерсона не выполняется, и критическая температура подавляется немагнитным беспорядком [116] подобно тому, как предсказывает теория Абрикосова-Горькова для магнитных примесей в классическом сверхпроводнике [117]. Это подавление должно происходить по следующему закону:

$$\ln \frac{T_{c0}}{T_c} = \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi t_0 T_c}\right) - \psi \left(\frac{1}{2}\right), \qquad (1.24)$$

где T_{c0} — это критическая температура чистого сверхпроводника, t_0 — время свободного пробега квазичастиц $\psi(x)$ — дигамма-функция. Однако ряд экспериментов с ВТСП на основе железа показывает, что это подавление менее интенсивно, чем предсказывается теорией Абрикосова-Горькова [118—122]. Одной из возможных причин может служить то, что s_{\pm} -состояние переходит в s_{++} -состояние при некотором критическом значении интенсивности рассеяния на примесях Γ^{crit} [103; 123—125]. Последняя пропорциональна примесному потенциалу и концентрации примесей n_{imp} . Переход возникает когда одна из щелей, меньшая, уменьшается, а затем меняет свой знак проходя через нуль.

1.4.2 Учёт рассеяния на немагнитных примесях в двухзонной модели

Для описания эффектов беспорядка одночастичный гамильтониан H_0 следует дополнить слагаемым $H_{\rm imp}$, связанным с рассеянием на примесях:

$$H_{\rm imp} = \sum_{\mathbf{R}_i, \sigma, \sigma', \mu, \nu} \mathcal{U}_{\mathbf{R}_i}^{\mu\nu} \delta_{\sigma, \sigma'} a_{\mathbf{R}_i \mu\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{R}_i \nu \sigma'}, \qquad (1.25)$$

где $\mathcal{U}_{\mathbf{R}_{i}}^{\mu\nu}$ — рассеивающий потенциал примеси, расположенной в узлах \mathbf{R}_{i} . Для вычисления примесной собственно-энергетической части $\hat{\Sigma}^{imp}$ в рассматриваемой модели используется приближение непересекающихся диаграмм, или приближение \mathcal{T} -матрицы:

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{\text{imp}}(\boldsymbol{\omega}_n) = n_{\text{imp}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}\hat{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\omega}_n)\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{\text{imp}}(\boldsymbol{\omega}_n), \qquad (1.26)$$

где $n_{\rm imp}$ — концентрация примесей, а $\hat{\mathbf{U}}$ — матрица примесного потенциала, которая имеет вид $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} \otimes \hat{\tau}_3$, где $(\mathbf{U})_{\mu\nu} = \mathcal{U}_{\mathbf{R}_i}^{\mu\nu}$. В однопримесной задаче, без ограничения общности можно считать, что $\mathbf{R}_i = 0$. Для простоты внутризонные и межзонные компоненты потенциала примеси можно положить равными v и u соответственно, так что $(\mathbf{U})_{\mu\nu} = (v - u)\delta_{\mu\nu} + u$. При этом отношение между этими компонентами будем контролировать параметром $\boldsymbol{\eta}$:

$$v = u\eta. \tag{1.27}$$

Для величины примесного потенциала существует два важных предельных случая: борновский предел, или предел слабого рассеяния, при $\pi u N_{a,b} \ll 1$, и противоположный случай очень сильного примесного рассеяния, называемый унитарным пределом, при $\pi u N_{a,b} \gg 1$. Учитывая это, оказывается удобным ввести обобщённое сечение рассеяния

$$\sigma = \frac{\pi^2 N_a N_b u^2}{1 + \pi^2 N_a N_b u^2} \to \begin{cases} 0, \text{борновский предел} \\ 1, \text{унитарный предел} \end{cases}$$
(1.28)

и интенсивность рассеяния на примесях

$$\Gamma_{a,b} = \frac{2n_{\rm imp}\sigma}{\pi N_{a,b}} \to \begin{cases} 2n_{\rm imp}\pi N_{b,a}u^2, \text{ борновский предел} \\ 2n_{\rm imp}/(\pi N_{a,b}), \text{ унитарный предел} \end{cases}$$
(1.29)

Уравнение (1.26) расписанное по зонам, распадается на пару систем двух уравнений, одна из которых запишется следующим образом:

$$\hat{\Sigma}_{aa}^{imp} = n_{imp} v \hat{\tau}_{3} + v \hat{\tau}_{3} \left(g_{0an} \hat{\tau}_{0} + g_{2an} \hat{\tau}_{2} \right) \hat{\Sigma}_{aa}^{imp} + u \hat{\tau}_{3} \left(g_{0bn} \hat{\tau}_{0} + g_{2bn} \hat{\tau}_{2} \right) \hat{\Sigma}_{ba}^{imp},$$

$$\hat{\Sigma}_{ba}^{imp} = n_{imp} u \hat{\tau}_{3} + u \hat{\tau}_{3} \left(g_{0an} \hat{\tau}_{0} + g_{2an} \hat{\tau}_{2} \right) \hat{\Sigma}_{aa}^{imp} + v \hat{\tau}_{3} \left(g_{0bn} \hat{\tau}_{0} + g_{2bn} \hat{\tau}_{2} \right) \hat{\Sigma}_{ba}^{imp}.$$
(1.30)

Уравнения для $\hat{\Sigma}_{ab}^{imp}$ и $\hat{\Sigma}_{bb}^{imp}$ получаются из последних выражений просто заменой зонных индексов. Собственно-энергетические поправки к частотам и параметру порядка, обусловленные рассеянием на примесях, вычисляются подобно перенормировкам (1.19) и (1.20): $\Sigma_{0a}^{imp} = (1/2) \operatorname{Tr} \left(\hat{\Sigma}_{aa}^{imp} \hat{\tau}_0 \right)$ и $\Sigma_{2a}^{imp} = (1/2) \operatorname{Tr} \left(\hat{\Sigma}_{aa}^{imp} \hat{\tau}_2 \right)$, соответственно. С учётом соотношения $g_{0\mu n}^2 - g_{2\mu n}^2 =$ $= -\pi^2 N_{\mu}^2$, для Σ_{0a}^{imp} и Σ_{2a}^{imp} система (1.30) разрешается следующим образом:

$$\Sigma_{0a}^{\rm imp} = \frac{n_{\rm imp}}{D} \left[g_{0bn} u^2 + g_{0an} v^2 + g_{0an} \left(u^2 - v^2 \right)^2 \pi^2 N_b^2 \right], \qquad (1.31)$$

$$\Sigma_{2a}^{\rm imp} = -\frac{n_{\rm imp}}{D} \left[g_{2bn} u^2 + g_{2an} v^2 + g_{2an} \left(u^2 - v^2 \right)^2 \pi^2 N_b^2 \right], \qquad (1.32)$$

где

$$D = 1 + \pi^2 N_a^2 v^2 + \pi^4 N_a^2 N_b^2 \left(u^2 - v^2 \right)^2 + \pi^2 N_a^2 v^2 - 2u^2 \left(g_{0an} g_{0bn} - g_{2an} g_{2bn} \right).$$
(1.33)

С учётом обозначений (1.28) и (1.29) выражения для перенормированных мацубаровских частот и параметра порядка принимают вид:

$$\tilde{\omega}_{an} = \omega_n + i\Sigma_{0a}(\omega_n) + \frac{\Gamma_a}{2D} \left[\sigma \frac{\tilde{\omega}_{an}}{Q_{an}} \left(1 - \eta^2 \right)^2 + (1 - \sigma) \left(\frac{N_a \tilde{\omega}_{an}}{N_b Q_{an}} \eta^2 + \frac{\tilde{\omega}_{bn}}{Q_{bn}} \right) \right], \quad (1.34)$$

$$\tilde{\varphi}_{an} = \Sigma_{2a}(\omega_n) + \frac{\Gamma_a}{2D} \left[\sigma \frac{\tilde{\varphi}_{an}}{Q_{an}} \left(1 - \eta^2 \right)^2 + (1 - \sigma) \left(\frac{N_a \tilde{\varphi}_{an}}{N_b Q_{an}} \eta^2 + \frac{\tilde{\varphi}_{bn}}{Q_{bn}} \right) \right], \quad (1.35)$$

где $Q_{\mu n} = \sqrt{\tilde{\omega}_{\mu n}^2 + \tilde{\varphi}_{\mu n}^2},$

$$D = (1 - \sigma)^{2} + \sigma (1 - \sigma) \left(2 \frac{\tilde{\omega}_{an} \tilde{\omega}_{bn} + \tilde{\varphi}_{an} \tilde{\varphi}_{bn}}{Q_{an} Q_{bn}} + \frac{N_{a}^{2} + N_{b}^{2}}{N_{a} N_{b}} \eta^{2} \right) + \sigma^{2} \left(1 - \eta^{2} \right)^{2}.$$
(1.36)

В борновском пределе $\sigma \rightarrow 0, D = 1$ и

$$\tilde{\omega}_{an} = \omega_n + i\Sigma_{0a}(\omega_n) + \frac{\gamma_{aa}}{2} \frac{\tilde{\omega}_{an}}{Q_{an}} + \frac{\gamma_{ab}}{2} \frac{\tilde{\omega}_{bn}}{Q_{bn}}, \qquad (1.37)$$

$$\tilde{\varphi}_{an} = \Sigma_{2a}(\omega_n) + \frac{\gamma_{aa}}{2} \frac{\varphi_{an}}{Q_{an}} + \frac{\gamma_{ab}}{2} \frac{\varphi_{bn}}{Q_{bn}}, \qquad (1.38)$$

где $\gamma_{aa} = 2\pi n_{\rm imp} N_a u^2 \eta^2$, $\gamma_{ab} = 2\pi n_{\rm imp} N_b u^2$. Из выражений (1.37) и (1.38) видно, что при ненулевом межзонном рассеянии $\gamma_{ab} \neq 0$ (т. е. при конечной величине η) величины, относящиеся к различным зонам, перемешиваются. Это приводит к подавлению T_c , аналогичному тому, которое предсказывает теория Абрикосова-Горькова (1.24).

В унитарном пределе $\sigma \to 1$ и при $\eta = 1$ знаменатель *D* стремится к нулю. Аккуратно взяв последовательно пределы $\eta \to 1$ и $\sigma \to 0$ можно показать, что

$$\tilde{\omega}_{an} = \omega_n + i\Sigma_{0a}(\omega_n) + \frac{n_{imp}}{\pi N_a N_b D_{uni}} \left[N_a \frac{\tilde{\omega}_{an}}{Q_{an}} + N_b \frac{\tilde{\omega}_{bn}}{Q_{bn}} \right], \quad (1.39)$$

$$\tilde{\varphi}_{an} = \Sigma_{2a}(\boldsymbol{\omega}_n) + \frac{n_{\rm imp}}{\pi N_a N_b D_{\rm uni}} \left[N_a \frac{\tilde{\varphi}_{an}}{Q_{an}} + N_b \frac{\tilde{\varphi}_{bn}}{Q_{bn}} \right], \qquad (1.40)$$

где $D_{\text{uni}} = 2 \frac{\tilde{\omega}_{an} \tilde{\omega}_{bn} + \tilde{\phi}_{an} \tilde{\phi}_{bn}}{Q_{an} Q_{bn}} + \frac{N_a^2 + N_b^2}{N_a N_b}$, т. е. величины относящиеся к разным зонам перемешиваются и T_c подавляется. Однако сложно представить примесь в многозонной системе, рассеивающую одинаково как во внутри-, так и в межзонном каналах. Наиболее вероятным представляется случай, когда $\eta \neq 1$, даже если внутри- и межзонные компоненты различаются мало. В таком случае:

$$\tilde{\omega}_{an} = \omega_n + i\Sigma_{0a}(\omega_n) + \frac{n_{imp}}{\pi N_a} \frac{\tilde{\omega}_{an}}{Q_{an}}, \qquad (1.41)$$

$$\tilde{\varphi}_{an} = \Sigma_{2a}(\omega_n) + \frac{n_{\rm imp}}{\pi N_a} \frac{\varphi_{an}}{Q_{an}}, \qquad (1.42)$$

перемешивания не происходит и оказывается справедлива теорема Андерсона.

1.4.3 Переход между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями в ферропниктидах

Константы связи в многозонной системе можно представить в виде матрицы в зонном пространстве. Например, в двухзонной модели матрица констант связи будет иметь следующую форму:

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda_{aa} & \Lambda_{ab} \\ \Lambda_{ba} & \Lambda_{bb} \end{pmatrix}. \tag{1.43}$$

Матричные элементы в (1.43), как отмечалось выше, могут быть как положительными, если они соответствуют эффективному притягивающему взаимодействию (например электрон-фононному взаимодействию, или орбитальным флуктуациям), так и отрицательными, когда они соответствуют эффективному отталкивательному взаимодействию (например, спин-флуктуационнмоу) [103; 107]. Если все элементы матрицы констант связи положительны, то в системе реализуется сверхпроводящее состояние с s_{++} -структурой параметра порядка. Сверхпроводимость в такой системе оказывается устойчивой к эффектам, связанным с рассеянием на немагнитных примесях, см. Рисунок 1.6 (а). Когда в системе присутствует рассеяние квазичастиц, приводящее к эффективному отталкивательному межзонному взаимодействию (отрицательные антидиагональные элементы матрицы (1.43)), она после сверхпроводящего фазового перехода оказывается в состоянии с s_{\pm} -сверхпроводящим параметром порядка. В зависимости от знака усреднённой по зонам константы связи [103]

$$\langle \Lambda \rangle = \frac{(\Lambda_{aa} + \Lambda_{ab})N_a}{N} + \frac{(\Lambda_{ba} + \Lambda_{bb})N_b}{N}, \qquad (1.44)$$

где $N = N_a + N_b$ — полная плотность состояний в нормальной фазе, различают два вида s_{\pm} -состояния. Оба состояния по разному реагируют на наличие немагнитного беспорядка в системе. Так T_c в s_{\pm} -сверхпроводнике с отрицательной усреднённой константой связи ($\langle \Lambda \rangle < 0$) подавляется немагнитными примесями по закону (1.24), в то время как критическая температура в s_{\pm} -состоянии с положительной константой связи ($\langle \Lambda \rangle > 0$) остаётся конечной величиной, см. Рисунок 1.6 (b). В работах [103; 123] было показано, что причиной такой устойчивости к рассеяниям на примесях в последнем случае может быть переход из s_{\pm} - в s_{++} -состояние, см. Рисунок 1.7 (а). Физическая основа данного перехода достаточно ясна, а именно, если одно из двух конкурирующих сверхпроводящих взаимодействий приводит к состоянию, устойчивому к рассеяниям на примесях, то, хотя данное взаимодействие и не доминирует в чистом пределе, оно становится доминирующим когда другое состояние разрушается за счёт рассеяний на примесях [107]. О наблюдении данного перехода сообщалось, по меньшей мере, трижды. А именно, в соединениях $K_x Fe_{2-y}(Se_{1-z}S_z)_2$ [126],



Рисунок 1.6 — Графики зависимости критической температуры T_c от интенсивности рассеяния на примесях Γ_a для (a) s_{++} -состояния при v = u/2 и (b) s_{\pm} -состояния с различными знаками $\langle \Lambda \rangle$ [107]. Все величины приведены к критической температуре в чистом пределе T_{c0}

Ва(Fe_{0,9}Co_{0,1})₂As₂ [127] и Ва(Fe_{1-x}Rh_x)₂As₂ [128] с немагнитным беспорядком, который в первой системе контролировался уровнем допирования серой z, а в оставшихся двух системах введён посредством облучения протонами. В последней работе переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ наблюдался в экспериментах по измерению лондоновской глубины проникновения магнитного поля в сверхпроводник, где он определялся по резкому перепаду в зависимости глубины проникновения от степени облучения протонами при $T \rightarrow 0$, см. Рисунок 1.7 (b).

1.5 Спин-резонансный пик в ферропниктидах

Рассеяние электронов между дырочными и электронными листами фермиповерхности с практически идеальным нестингом в сверхпроводниках на основе железа приводит к возникновению пика в спиновой корреляционной функции, в соответствии с устоявшейся терминологией называемой далее динамической спиновой восприимчивостью, в нормальном состоянии на векторе **q** = **Q**

28



Рисунок 1.7 — Переход из s_{\pm} - в s_{++} -состояние. На панели (а) представлены зависимости от Γ_a критической температуры T_c , и функции щели $\tilde{\Delta}_{\mu n}$ для первых трёх мацубаровских частот при $T = 0.04T_{c0}$, $\sigma = 0.5$, $\langle \Lambda \rangle > 0$ в двухзонной модели [103]. Панель (b) представляет экспериментальные данные о T_c и глубине проникновения $\lambda_L(0)$ для соединения Ba(Fe_{1-x}Rh_x)₂As₂ [128]

или вблизи него, см. Рисунок 1.8. Для однородной изотропной щели *s*-типа, $\operatorname{sgn}\Delta_{\mathbf{k}} = \operatorname{sgn}\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ и спин-резонансный пик отсутствует. Для s_{\pm} -параметра порядка, также, как и для неоднородной расширенной симметрии *s*-волны, **Q** соединяет листы поверхности Ферми с различными знаками щелей. Это удовлетворяет условию возникновения резонанса для межзонной восприимчивости, и спин-резонансный пик возникает на частоте Ω_R ниже $\Omega_c = \min(|\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}|)$. Существование спинового резонанса в сверхпроводниках на основе железа было предсказано теоретически [88; 89] и затем обнаружено экспериментально, о чём свидетельствует множество работ с хорошо определённым спиновым резонансом в различных системах, см. [33].

1.5.1 Динамическая спиновая восприимчивость в многоорбитальных и многозонных системах

Динамическая спиновая восприимчивость определяется как корреляционная функция двух спиновых операторов, и в многоорбитальном случае

29



Рисунок 1.8 — Действительная часть спиновой восприимчивости без учёта взаимодействия, вычисленная в четырёхзонной модели [89]. Индексы $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$ обозначают дырочные и электронные зоны, соответственно. Обозначения \mathbf{Q}_{SDW} и \mathbf{Q}_{AFM} см. в подписи к Рисунку 1.3

записывается следующим образом:

$$\boldsymbol{\chi}_{l,l',m,m'}^{s,s'}(\mathbf{q},\boldsymbol{\tau}) = \left\langle T_{\boldsymbol{\tau}} S_{l,l'}^{s}(\mathbf{q},\boldsymbol{\tau}) S_{m'm}^{s'}(-\mathbf{q},0) \right\rangle, \qquad (1.45)$$

где оператор T_{τ} упорядочивает операторы в угловых скобках по мацубаровскому времени τ , угловые скобки $\langle \ldots \rangle$ означают усреднение по ансамблю взаимодействующих частиц, а S^s — это операторы спина на *j*-м узле, которые определяется следующим образом:

$$\vec{S}_{l,l',j}(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} a^{\dagger}_{\alpha,l,j}(\tau) \vec{\sigma}_{\alpha,\beta} a_{\beta,l',j}(\tau), \qquad (1.46)$$

где $a_{\alpha,l,j}^{\dagger}(a_{\beta,l',j})$ — оператор рождения (уничтожения) электрона на *j*-м узле с проекцией спина $\alpha(\beta)$; l,l' — орбитальные индексы; $\vec{\sigma}$ вектор составленный из матриц Паули:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (1.47)

Введём в рассмотрение операторы «подъёма» S^+ и «опускания» S^- спина следующим образом:

$$S_{l,l',j}^{+}(\tau) = S_{l,l',j}^{x}(\tau) + iS_{l,l',j}^{y}(\tau), \qquad (1.48)$$

$$S_{l,l',j}^{-}(\tau) = S_{l,l',j}^{x}(\tau) - iS_{l,l',j}^{y}(\tau), \qquad (1.49)$$

либо через соответствующие матрицы Паули:

$$\hat{\sigma}_{+} = \hat{\sigma}_{x} + i\hat{\sigma}_{y} = \begin{pmatrix} 0 & 2\\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_{-} = \hat{\sigma}_{x} - i\hat{\sigma}_{y} = \begin{pmatrix} 0 & 0\\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (1.50)$$

$$S_{l,l',j}^{+}(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} a_{\alpha,l,j}^{\dagger}(\tau)(\hat{\sigma}_{+})_{\alpha,\beta} a_{\beta,l',j}(\tau) = a_{\uparrow,l,j}^{\dagger}(\tau) a_{\downarrow,l',j}(\tau), \qquad (1.51)$$

$$S_{l,l',j}^{-}(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} a_{\alpha,l,j}^{\dagger}(\tau)(\hat{\sigma}_{-})_{\alpha,\beta} a_{\beta,l',j}(\tau) = a_{\downarrow,l,j}^{\dagger}(\tau) a_{\uparrow,l',j}(\tau).$$
(1.52)

В **k**-пространстве операторы спина запишутся в следующем виде:

$$\vec{S}_{l,l'}(\mathbf{q},\tau) = \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} \sum_{\mathbf{k}} a^{\dagger}_{\boldsymbol{\alpha},l,\mathbf{k}}(\tau) \vec{\sigma}_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} a_{\boldsymbol{\beta},l',\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau), \qquad (1.53)$$

Компоненты $S^+(\mathbf{q}, \mathbf{\tau})$ и $S^-(-\mathbf{q}, 0)$ векторов $\vec{S}(\mathbf{q}, \mathbf{\tau})$ и $\vec{S}(-\mathbf{q}, 0)$ будут иметь следующий вид:

$$S_{l,l'}^{+}(\mathbf{q},\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\uparrow,l,\mathbf{k}}^{\dagger}(\boldsymbol{\tau}) a_{\downarrow,l',\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\boldsymbol{\tau}), \qquad (1.54)$$

$$S_{m',m}^{-}(-\mathbf{q},0) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\downarrow,m',\mathbf{k}}^{\dagger}(0) a_{\uparrow,m,\mathbf{k}-\mathbf{q}}(0).$$
(1.55)

Динамическая спиновая восприимчивость (1.45) с учётом (1.53) в **k**-пространстве записывается следующим образом:

$$\chi_{l,l',m,m'}^{s,s'}(\mathbf{q},\boldsymbol{\tau}) =$$

$$= \frac{1}{4V} \sum_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\delta}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} \langle T_{\boldsymbol{\tau}} a_{\boldsymbol{\alpha},l,\mathbf{k}}^{\dagger}(\boldsymbol{\tau})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_s)_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} a_{\boldsymbol{\beta},l',\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\boldsymbol{\tau}) a_{\boldsymbol{\gamma},m',\mathbf{k}_1}^{\dagger}(0)(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{s'})_{\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\delta}} a_{\boldsymbol{\delta},m,\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}(0) \rangle.$$
(1.56)

Далее, перейдя от усреднения по ансамблю взаимодействующих частиц к усреднению по системе без взаимодействия, но со спонтанно нарушенной симметрией, $(\langle \ldots \rangle \rightarrow \langle \ldots \rangle_0)$ с последующим расцеплением операторов под знаком

усреднения по теореме Вика (см., например, [129]), можно получить выражение для «голой» спиновой восприимчивости $\chi^{(0)}$:

$$\begin{aligned} \chi_{l,l',m,m'}^{(0)s,s'}(\mathbf{q},\tau) &= \qquad (1.57) \\ &= \frac{1}{4V} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}_{1}} \langle T_{\tau} a_{\alpha,l,\mathbf{k}}^{\dagger}(\tau) a_{\beta,l',\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) a_{\gamma,m',\mathbf{k}_{1}}^{\dagger}(0) a_{\delta,m,\mathbf{k}_{1}-\mathbf{q}}(0) \rangle_{0}(\hat{\sigma}_{s})_{\alpha,\beta}(\hat{\sigma}_{s'})_{\gamma,\delta} = \\ &= \frac{1}{4V} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}_{1}} \Big[\langle T_{\tau} a_{\alpha,l,\mathbf{k}}^{\dagger}(\tau) a_{\beta,l',\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \rangle_{0} \langle T_{\tau} a_{\gamma,m',\mathbf{k}_{1}}^{\dagger}(0) a_{\delta,m,\mathbf{k}_{1}-\mathbf{q}}(0) \rangle_{0} - \\ &- \langle T_{\tau} a_{\alpha,l,\mathbf{k}}^{\dagger}(\tau) a_{\gamma,m',\mathbf{k}_{1}}^{\dagger}(0) \rangle_{0} \langle T_{\tau} a_{\beta,l',\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) a_{\delta,m,\mathbf{k}_{1}-\mathbf{q}}(0) \rangle_{0} + \\ &+ \langle T_{\tau} a_{\alpha,l,\mathbf{k}}^{\dagger}(\tau) a_{\delta,m,\mathbf{k}_{1}-\mathbf{q}}(0) \rangle_{0} \langle T_{\tau} a_{\beta,l',\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) a_{\gamma,m',\mathbf{k}_{1}}^{\dagger}(0) \rangle_{0} \Big] (\hat{\sigma}_{s})_{\alpha,\beta} (\hat{\sigma}_{s'})_{\gamma,\delta}. \end{aligned}$$

Определим температурные функции Грина и функции Горькова следующим образом:

$$G_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}^{(0)l,l'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\tau}-0) = -\langle T_{\boldsymbol{\tau}}a_{\boldsymbol{\alpha},l,\mathbf{k}}(\boldsymbol{\tau})a_{\boldsymbol{\beta},l',\mathbf{k}}^{\dagger}(0)\rangle_{0}, \qquad (1.58)$$

$$F_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}^{(0)l,l'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\tau}-0) = \langle T_{\boldsymbol{\tau}}a_{\boldsymbol{\alpha},l,\mathbf{k}}(\boldsymbol{\tau})a_{\boldsymbol{\beta},l',-\mathbf{k}}(0)\rangle_{0}, \qquad (1.59)$$

$$F_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}^{(0)\dagger l,l'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\tau}-0) = \langle T_{\boldsymbol{\tau}} a_{\boldsymbol{\alpha},l,-\mathbf{k}}^{\dagger}(\boldsymbol{\tau}) a_{\boldsymbol{\beta},l',\mathbf{k}}^{\dagger}(0) \rangle_{0}, \qquad (1.60)$$

где символ «(0)» обозначает отсутствие взаимодействия в системе (за исключением сверхпроводящего спаривания). С учётом выражений (1.58) – (1.60) восприимчивость (1.57) принимает вид:

$$\chi_{l,l',m,m'}^{(0)s,s'}(\mathbf{q},\tau) = \frac{1}{4V} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \sum_{\mathbf{k}} \left[F_{\gamma,\alpha}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\beta,\delta}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - (1.61) - G_{\delta,\alpha}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\beta,\gamma}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) \right] (\hat{\sigma}_s)_{\alpha,\beta} (\hat{\sigma}_{s'})_{\gamma,\delta}.$$

Если расписать явно произведения компонент матриц Паули:

$$(\hat{\sigma}_x)_{\alpha,\beta}(\hat{\sigma}_x)_{\gamma,\delta} = \begin{cases} 1, \text{для } (\hat{\sigma}_x)_{\uparrow,\downarrow}(\hat{\sigma}_x)_{\uparrow,\downarrow}, (\hat{\sigma}_x)_{\downarrow,\uparrow}(\hat{\sigma}_x)_{\uparrow,\downarrow}, (\hat{\sigma}_x)_{\downarrow,\uparrow}, (\hat{\sigma}_x)_{\downarrow,\downarrow}, (\hat{\sigma$$

$$(\hat{\sigma}_{y})_{\alpha,\beta}(\hat{\sigma}_{y})_{\gamma,\delta} = \begin{cases} -1, \text{для } (\hat{\sigma}_{y})_{\uparrow,\downarrow}(\hat{\sigma}_{y})_{\downarrow,\uparrow}(\hat{\sigma}_{y})_{\downarrow,\uparrow}(\hat{\sigma}_{y})_{\downarrow,\uparrow}, \\ 1, \text{для } (\hat{\sigma}_{y})_{\downarrow,\uparrow}(\hat{\sigma}_{y})_{\uparrow,\downarrow}, (\hat{\sigma}_{y})_{\uparrow,\downarrow}(\hat{\sigma}_{y})_{\downarrow,\uparrow}, \\ 0, \text{ для остальных.} \end{cases}$$
(1.63)

$$(\hat{\sigma}_{z})_{\alpha,\beta}(\hat{\sigma}_{z})_{\gamma,\delta} = \begin{cases} 1, \text{для } (\hat{\sigma}_{z})_{\uparrow,\uparrow}(\hat{\sigma}_{z})_{\downarrow,\downarrow}(\hat{\sigma}_{z})_{\downarrow,\downarrow}(\hat{\sigma}_{z})_{\downarrow,\downarrow}, \\ -1, \text{для } (\hat{\sigma}_{z})_{\uparrow,\uparrow}(\hat{\sigma}_{z})_{\downarrow,\downarrow}, (\hat{\sigma}_{z})_{\downarrow,\downarrow}(\hat{\sigma}_{z})_{\uparrow,\uparrow}, \\ 0, \text{ для остальных.} \end{cases}$$

$$(\hat{\sigma}_{+})_{\alpha,\beta}(\hat{\sigma}_{-})_{\gamma,\delta} = \begin{cases} 4, \text{для } (\hat{\sigma}_{+})_{\uparrow,\downarrow}(\hat{\sigma}_{-})_{\downarrow,\uparrow}, \\ 0, \text{ иля остальных.} \end{cases}$$

$$(1.64)$$

тогда можно получить набор компонент спиновой восприимчивости:

$$\begin{aligned} \chi_{l,l',m,m'}^{(0)x,x}(\mathbf{q},\tau) &= \\ &= \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}} \left[F_{\uparrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\downarrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \right. \\ &+ F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \\ &+ F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \\ &+ F_{\downarrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \\ &+ F_{\downarrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_{l,l',m,m'}^{(0)y,y}(\mathbf{q},\tau) &= \\ &= \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}} \Big[-F_{\uparrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + G_{\downarrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - \\ &- F_{\downarrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \\ &+ F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \\ &+ F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \\ &+ F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) \Big], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_{l,l',m,m'}^{(0)z,z}(\mathbf{q},\tau) &= \\ &= \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}} \Big[F_{\uparrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + \\ &+ F_{\downarrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - \\ &- F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + G_{\downarrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - \\ &- F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - \\ &- F_{\uparrow,\downarrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) + G_{\uparrow,\downarrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) \Big], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_{l,l',m,m'}^{(0)+,-}(\mathbf{q},\tau) &= \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Big[F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},-\tau) F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) - G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},-\tau) G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau) \Big], \end{aligned}$$
(1.69)

Следует отметить, что в синглетном сверхпроводящем состоянии слагаемые, содержащие функции Горькова с параллельными и функции Грина с антипараллельными проекциями спина зануляются. Кроме того, в случае спин-синглетного сверхпроводника справедливы следующие соотношения между компонентами динамической спиновой восприимчивости:

$$\chi_{l,l',m,m'}^{(0)x,x}(\mathbf{q},\tau) + \chi_{l,l',m,m'}^{(0)y,y}(\mathbf{q},\tau) = \chi_{l,l',m,m'}^{(0)+,-}(\mathbf{q},\tau) = 2\chi_{l,l',m,m'}^{(0)z,z}(\mathbf{q},\tau).$$
(1.70)

Поэтому в данном случае достаточно рассматривать только выражение (1.69).

В $\{\mathbf{k}, \boldsymbol{\omega}\}$ -представлении спиновая восприимчивость записывается следующим образом:

$$\chi_{l,l',m,m'}^{(0)s,s'}(\mathbf{q},\Omega_M) = \int_{0}^{1/k_B T} \chi_{l,l',m,m'}^{(0)s,s'}(\mathbf{q},\tau) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega_M \tau} d\tau, \qquad (1.71)$$

где $\Omega_M = 2M\pi k_B T$ — мацубаровская частота для квазичастиц, подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна, M — целые числа. Аналогичным же образом записываются функции Грина и функции Горькова. Обозначив их вместе как $O_{\alpha,\beta}^{l,l'}(\mathbf{k},\tau)$, можно записать:

$$O_{\alpha,\beta}^{l,l'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n) = \int_{0}^{1/k_B T} O_{\alpha,\beta}^{l,l'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\tau}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\omega}_n\boldsymbol{\tau}} d\boldsymbol{\tau}, \qquad (1.72)$$

где

$$O_{\alpha,\beta}^{l,l'}(\mathbf{k},\tau) = k_B T \sum_{\omega_n = -\infty}^{\infty} O_{\alpha,\beta}^{l,l'}(\mathbf{k},\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}.$$
 (1.73)

В результате подстановки (1.71), (1.72) и (1.73) в (1.69) получается следующее выражение для восприимчивости в многоорбитальной системе со спин-синглетным сверхпроводящим спариванием:

$$\chi_{l,l',m,m'}^{(0)+,-}(\mathbf{q},\Omega_M) = \frac{k_B T}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\omega_n = -\infty}^{\infty} \Big[F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)\dagger m',l}(\mathbf{k},\omega_n) F_{\downarrow,\uparrow}^{(0)l',m}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_n+\Omega_M) - G_{\uparrow,\uparrow}^{(0)m,l}(\mathbf{k},\omega_n) G_{\downarrow,\downarrow}^{(0)l',m'}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_n+\Omega_M) \Big].$$

$$(1.74)$$

Переход между базисами в зонном и орбитальном представлении осуществляется посредством матричных элементов $\phi^{\mu}_{l,\sigma}(\mathbf{k})$:

$$|\sigma, l, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\mu} \varphi^{\mu}_{l,\sigma}(\mathbf{k}) |\sigma, \mu, \mathbf{k}\rangle, \qquad (1.75)$$

$$\sum_{l} \varphi_{l,\sigma}^{*\mu'}(\mathbf{k}) |\sigma, l, \mathbf{k}\rangle = |\sigma, \mu', \mathbf{k}\rangle.$$
(1.76)

Функции Грина и Горькова в зонном базисе определяются следующим образом:

$$G^{\mu}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n) = -\int_{0}^{1/k_B T} \langle T_{\tau} b_{\sigma,\mu,\mathbf{k}}(\tau) b^{\dagger}_{\sigma',\mu,\mathbf{k}}(0) \rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\omega}_n \tau} d\tau, \qquad (1.77)$$

$$F^{\mu}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n) = \int_{0}^{1/k_B T} \langle T_{\tau} b_{\sigma,\mu,\mathbf{k}}(\tau) b_{\sigma',\mu,-\mathbf{k}}(0) \rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\omega}_n \tau} d\tau, \qquad (1.78)$$

$$F^{\dagger\mu}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n) = \int_{0}^{1/\kappa_B T} \langle T_{\tau} b^{\dagger}_{\sigma,\mu,-\mathbf{k}}(\tau) b^{\dagger}_{\sigma',\mu,\mathbf{k}}(0) \rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\omega}_n \tau} d\tau, \qquad (1.79)$$

где $b_{\sigma,\mu,\mathbf{k}}^{\dagger}(b_{\sigma,\mu,\mathbf{k}})$ — оператор рождения (уничтожения) квазичастицы со спином σ и зонным индексом μ (в μ -й энергетической зоне). Переход между функциями Грина и Горькова в орбитальном и зонном базисе осуществляется посредством следующего преобразования (в синглетном сверхпроводящем состоянии):

$$G_{\alpha,\beta}^{l,l'}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,\alpha} = \sum_{\mu} \varphi_{l,\alpha}^{\mu}(\mathbf{k})\varphi_{l',\beta}^{*\mu}(\mathbf{k})G_{\alpha,\beta}^{\mu}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,\alpha}, \qquad (1.80)$$

$$F_{\alpha,\beta}^{l,l'}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,-\alpha} = \sum_{\mu} \varphi_{l,\alpha}^{\mu}(\mathbf{k})\varphi_{l',\beta}^{\mu}(\mathbf{k})F_{\alpha,\beta}^{\mu}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,-\alpha}, \qquad (1.81)$$

$$F_{\alpha,\beta}^{\dagger l,l'}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n)\delta_{\beta,-\alpha} = \sum_{\mu} \varphi_{l,\alpha}^{*\mu}(\mathbf{k})\varphi_{l',\beta}^{*\mu}(\mathbf{k})F_{\alpha,\beta}^{\dagger\mu}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n)\delta_{\beta,-\alpha}.$$
 (1.82)

$$G^{\mu}_{\alpha,\beta}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,\alpha} = \sum_{l,l,\alpha,\beta} \varphi^{*\mu}_{l,\alpha}(\mathbf{k})\varphi^{\mu}_{l',\beta}(\mathbf{k})G^{l,l'}_{\alpha,\beta}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,\alpha}, \qquad (1.83)$$

$$F^{\mu}_{\alpha,\beta}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,-\alpha} = \sum_{l,l,\alpha,\beta} \varphi^{*\mu}_{l,\alpha}(\mathbf{k})\varphi^{*\mu}_{l',\beta}(\mathbf{k})F^{l,l'}_{\alpha,\beta}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,-\alpha}, \qquad (1.84)$$

$$F_{\alpha,\beta}^{\dagger\mu}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,-\alpha} = \sum_{l,l,\alpha,\beta} \varphi_{l,\alpha}^{\mu}(\mathbf{k})\varphi_{l',\beta}^{\mu}(\mathbf{k})F_{\alpha,\beta}^{\dagger l,l'}(\mathbf{k},\omega_n)\delta_{\beta,-\alpha}.$$
 (1.85)

Если предположить, что гамильтониан системы имеет такой вид, что для него функции Грина и Горькова диагональны в орбитальном базисе, то, фактически, не будет разницы между орбитальным и зонным представлением. В таком представлении выражение для спиновой восприимчивости будет иметь вид:

$$\chi_{\mu,\nu}^{(0)s,s'}(\mathbf{q},\Omega_M) = \frac{k_B T}{4V} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \sum_{\omega_n=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}} \left[F_{\gamma,\alpha}^{(0)\dagger\mu}(\mathbf{k},\omega_n) F_{\beta,\delta}^{(0)\nu}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_n+\Omega_M) - (1.86) \right]$$

$$-G^{(0)\mu}_{\delta,\alpha}(\mathbf{k},\boldsymbol{\omega}_n)G^{(0)\nu}_{\beta,\gamma}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\boldsymbol{\omega}_n+\Omega_M)\Big](\hat{\boldsymbol{\sigma}}_s)_{\alpha,\beta}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{s'})_{\gamma,\delta}.$$
(1.87)

1.5.2 Спин-резонансный пик в четырёхзонной модели сверхпроводящих соединений железа

В сверхпроводящем состоянии суммирование по мацубаровским частотам в (1.86) даёт следующее выражение для спиновой восприимчивости поперечной
компоненты $\chi^{(0)+,-}$:

$$\begin{split} \chi^{(0)+,-}_{\mu,\nu}(\mathbf{q},\Omega_{M}) &= (1.88) \\ &= \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(1 + \frac{\xi^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \Delta^{\mu}_{\mathbf{k}} \Delta^{\nu\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}} E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \cdot \frac{n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\mu}_{\mathbf{k}} - i\Omega_{M}} + \\ &+ \left(1 + \frac{\xi^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \Delta^{\mu}_{\mathbf{k}} \Delta^{\nu\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}} E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \cdot \frac{n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\mu}_{\mathbf{k}} + i\Omega_{M}} + \\ &+ \left(1 - \frac{\xi^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \Delta^{\mu}_{\mathbf{k}} \Delta^{\nu\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}} E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \cdot \frac{1 - n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E^{\mu}_{\mathbf{k}} \Delta^{\nu\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) + \\ &+ \left(1 - \frac{\xi^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \Delta^{\mu}_{\mathbf{k}} \Delta^{\nu\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}} E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \cdot \frac{1 - n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E^{\mu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) + \\ &+ \frac{E^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \xi^{\mu}_{\mathbf{k}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \cdot \frac{n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\mu}_{\mathbf{k}} - i\Omega_{M}} - \\ &- \frac{E^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \xi^{\mu}_{\mathbf{k}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \cdot \frac{1 - n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\mu}_{\mathbf{k}} - i\Omega_{M}} + \\ &+ \frac{E^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \xi^{\mu}_{\mathbf{k}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \cdot \frac{1 - n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E^{\mu}_{\mathbf{k}} - i\Omega_{M}} - \\ &- \frac{E^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \xi^{\mu}_{\mathbf{k}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \cdot \frac{1 - n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E^{\mu}_{\mathbf{k}} - i\Omega_{M}} - \\ &- \frac{E^{\mu}_{\mathbf{k}} \xi^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \xi^{\mu}_{\mathbf{k}}}{E^{\mu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \cdot \frac{1 - n_{f}(E^{\mu}_{\mathbf{k}}) - n_{f}(E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E^{\nu}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E^{\mu}_{\mathbf{k}} + i\Omega_{M}} \right],$$

где $n_f(E_{\mathbf{k}}^{\mu})$ — функция распределения Ферми-Дирака, $E_{\mathbf{k}}^{\mu} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^{\mu 2} + \Delta_{\mathbf{k}}^{\mu 2}}$ — энергия возбуждений в металле в сверхпроводящем состоянии.

В формировании характера частотной зависимости спиновой восприимчивости главную роль играют, так называемые, факторы когерентности $\left[1 \pm \left(\xi_k^{\mu} \xi_{k+q}^{\nu} + \Delta_k^{\mu} \Delta_{k+q}^{\nu \dagger}\right) / \left(E_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu}\right)\right]$. Они существенно зависят от симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Помимо факторов когерентности, в выражении (1.88) присутствуют слагаемые с перекрёстными членами $\left(\xi_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu} \pm \xi_{k+q}^{\nu} E_k^{\mu}\right) / E_k^{\mu} E_{k+q}^{\nu}$, обусловленными межзонным взаимодействием. Факторы когерентности в спиновой восприимчивости $\chi^{(0)}$ приводят к тому, что в случае s_{\pm} -симметрии сверхпроводящей щели на частоте $\Omega < 2\Delta_0$ в мнимой части возникает скачок, который при учёте взаимодействия между квазичастицами приводит к возникновению спин-резонансного пика. Для s_{++} -сверхпроводника спиновый отклик плавно возрастает, начиная с частоты $\Omega = 2\Delta_0$. В случае сверхпроводника с *d*-симметрией спиновый отклик практически не отличается от спинового отклика нормального металла. Это связано с тем, что линия нулей для такого параметра порядка находится в непосредственной близости к вектору **Q**, и величина сверхпроводящей щели на данном векторе оказывается близка к нулю.

В рассматриваемой четырёхзонной модели [89] с одночастичным гамильтонианом (1.6) эффективное взаимодействие состоит из одноузельного внутризонного хаббардовского отталкивания U и хундовского обмена J. В приближении случайных фаз спиновая восприимчивость $\hat{\chi}^{\text{RPA}}$ задаётся матричным уравнением:

$$\hat{\chi}^{\text{RPA}+,-}(\mathbf{q},\Omega) = \left[\hat{I} - \hat{\Gamma}\hat{\chi}^{(0)+,-}(\mathbf{q},\Omega)\right]^{-1}\hat{\chi}^{(0)+,-}(\mathbf{q},\Omega), \qquad (1.89)$$

где Ω — действительная частота, полученная аналитическим продолжением с мнимой оси, $i\Omega_M \to \Omega + i\delta^+ (\delta^+ \to 0+)$, \hat{I} — единичная матрица, $\hat{\chi}^{(0)+,-}(\mathbf{q},\Omega)$ матрица 4 × 4, составленная из внутри- и межзонных компонент восприимчивости $\hat{\chi}^{(0)+,-}_{\mu,\nu}(\mathbf{q},\Omega)$ (1.88). Вершина $\hat{\Gamma}$ задаётся матрицей 4 × 4 с компонентами

$$\left[\hat{\Gamma}\right]_{\mu\nu} = \left(U - \frac{J}{2}\right)\delta_{\mu\nu} + \frac{J}{2},\tag{1.90}$$

где J = 0,2U, а величина U выбирается такой, чтобы рассматриваемая система оставалась в области отсутствия магнитного упорядочения [89].

В результате учёта взаимодействия в приближении случайных фаз, спиновый отклик в сверхпроводнике с *d*-симметрией сверхпроводящего параметра порядка:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_0}{2} \left(\cos k_x - \cos k_y \right) \tag{1.91}$$

практически совпадает со спиновым откликом нормального металла, см. Рисунок 1.9. При этом у *d*-сверхпроводника можно наблюдать слабо выраженный пик в мнимой части восприимчивости χ^{RPA} на частоте $\Omega \sim 0.5\Delta_0$, который обусловлен наличием факторов когерентности. Для сверхпроводника с s_{++} -структурой сверхпроводящего параметра порядка

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = \Delta_0, \tag{1.92}$$

частотная зависимость $\mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{RPA}}$ схожа с частотной зависимостью восприимчивости без учёта межэлектронного взаимодействия. В s_{\pm} -сверхпроводнике

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_0}{2} \left(\cos k_x + \cos k_y \right), \qquad (1.93)$$

в мнимой части спиновой восприимчивости наблюдается чётко выраженный спин-резонансный пик на частоте, близкой к той, на которой был скачок в $\operatorname{Im} \chi^{(0)}$.



Рисунок 1.9 — Графики мнимой части спиновой восприимчивости полученные в четырёхзонной модели [89] в приближении случайных фаз на антиферромагнитном волновом векторе $\mathbf{Q}_{\mathrm{AFM}}$ как функции действительной частоты в нормальном и сверхпроводящем состояниях. Представлены результаты для сверхпроводящего параметра порядка с различной структурой, s_{++} - и s_{\pm} -, а также с d-симметрией. Индексы $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$ обозначают дырочные и электронные зоны, соответственно

Глава 2. Влияние экспериментально наблюдаемых особенностей ферропниктидов на спин-резонансный пик

2.1 Спин-резонансный пик в сверхпроводниках на основе железа с неравными по амплитуде щелями

Неупругое рассеяние нейтронов является весьма удобным инструментом исследования сверхпроводящих соединений, поскольку структурный фактор, определяемый в сверхпроводящем состоянии и соответствующий спиновой корреляционной функции (динамической спиновой восприимчивости) $\chi(\mathbf{q},\Omega)$, несёт в себе информацию о структуре щели. Существует множество свидетельств в пользу хорошо определённого пика в INS-спектре нейтронов в системах 1111, 122, и 11, появляющегося только при $T < T_c$ на волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ или вблизи него [48; 91; 130—132]. Спиновый резонанс, возникающий при наличии s_{\pm} -состояния, естественным образом объясняет возникновение данного пика. А именно, поскольку вектор \mathbf{Q} соединяет листы поверхности Ферми с различными знаками s_{\pm} -щелей, то выполняется условие возникновения резонанса для межзонной восприимчивости, и спин-резонансный пик возникает на частоте Ω_R ниже приблизительно 2Δ , где Δ представляет собой амплитуду щели [88; 89; 133].

Такое простое объяснение было неявным образом подвергнуто сомнению сопоставлением данных неупругого рассеяния нейтронов и результатов ARPES-экспериментов, а также измерениями щелей посредством Андреевской спектроскопии. Последние, в свою очередь, показывают, что присутствует по меньшей мере две различных щели, в соединениях 11, 122, и 1111 [134—138], и даже три щели в LiFeAs [139; 140]. Например, в соединениях BaCo-122 большая щель (Δ_L) равна, примерно, 9 мэВ, а меньшая щель (Δ_S) составляет около 4 мэВ. Из ARPES-экспериментов нам известно, что на электронных листах и внутреннем дырочном листе поверхности Ферми открывается большая щель, в то время как меньшая щель расположена на внешнем дырочном кармане поверхности Ферми [37; 141]. Само существование меньшей щели поднимает вопрос: какова будет частота спинового резонанса в системе с двумя различными щелями? Весьма наивное предположение состоит в том, что частота сдвинется к масштабу величин меньшей щели и $\Omega_R < 2\Delta_S$. Тогда наблюдаемый пик в INS-спектре в BaCo122-системе на частоте $\omega_{\rm INS} \sim 9.5$ мэВ [91] не может быть спин-резонансным, поскольку он возникает на частоте большей чем $2\Delta_S \sim 8$ мэВ [135]. Тогда этот пик может быть следствием наличия s_{++} -состояния [142; 143], в котором он возникает на частотах *выше* 2 Δ за счёт перераспределения спектрального веса при переходе в сверхпроводящее состояние и конкретного вида рассеяния в нормальном состоянии. Здесь мы рассматриваем этот вопрос в деталях и показываем, что такое наивное предположение не верно и что истинным критерием для частоты спинового резонанса является $\Omega_R \leqslant \Delta_L + \Delta_S$ [2]. Последний находится в согласии с максимальной частой наблюдаемого пика в INS-экспериментах в соединениях BaCo-122 и подтверждает, что это истинный спиновый резонанс, свидетельствуя в пользу s_+ -структуры сверхпроводящего параметра порядка [3]. Верхняя граница определяется условием $\Omega_R \leqslant 2\Delta_L$. Будет ли реализован верхний или нижний энергетический предел, зависит от отношения между точной зонной структурой конкретного материала и волнового вектора спинового резонанса Q.

2.1.1 Результаты

Мы исследуем спин-резонансный пик в рамках четырёхзонной модели (1.6) из работы [89]. Динамическая спиновая восприимчивость (1.88) также вычислялась в RPA (1.89) на волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ как функция частоты Ω полученной аналитическим продолжением с мацубаровских частот. Мнимые части «голой» спиновой восприимчивости и в приближении случайных фаз представлены на Рисунке 2.1.

Рассмотрим сперва результаты для случая равных щелей в пределах электронных (b1, b2) и дырочных (a1, a2) листов ферми-поверхностей, $\Delta_{b1,2} =$ $= \Delta_{a1,2} = \Delta_0$. Поскольку $\chi^{(0)+,-}(\mathbf{q},\Omega)$ описывает возбуждения в канале «частица-дырка» и в сверхпроводящем состоянии все возбуждения защелены ниже энергии, приблизительно, $2\Delta_0$ (при T = 0 K), то Im $\chi^{(0)+,-}(\mathbf{q},\Omega)$ становится конечной величиной только выше данной частоты. Для s_{++} -состояния имеет место плавный рост спинового отклика $\Omega > 2\Delta_0$. Для s_{\pm} -состояния вектор \mathbf{Q} соединяет листы поверхности Ферми, знаки щели в которых различны, $\operatorname{sgn}\Delta_{\mathbf{k}\mu} = -\operatorname{sgn}\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\nu}$, и в приближении RPA (1.89) это приводит к возникновению спин-резонансного пика, т. е. расходимости в $\operatorname{Im}\chi^{\operatorname{RPA}+,-}(\mathbf{Q},\Omega)$ на частоте Ω_R , см. Рисунок 2.1 (b).



Рисунок 2.1 — Результаты расчётов для $\operatorname{Im} \chi^{(0)+,-}(\mathbf{Q},\Omega)$ (a) и $\operatorname{Im} \chi^{\operatorname{RPA}+,-}(\mathbf{Q},\Omega)$ (b) на векторе $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$ в 2-FeBZ для четырёхзонной модели в нормальном и сверхпроводящем состояниях с s_{++} - и s_{\pm} -структурой параметра порядка. Представлены два случая сверхпроводящих состояний: равные щели $\Delta_{b1,2} =$ $= \Delta_{a1,2} = \Delta_0$, и неравные по величине щели $\Delta_{b1,2} = \Delta_{a1} = \Delta_0$ и $\Delta_{a2} = \Delta_0/2$

Рассмотрим теперь случай неравных по амплитуде щелей, в котором меньшая щель находится в пределах внешней дырочной поверхности Ферми, $\Delta_{a2} = \Delta_0/2$, а большие щели в пределах оставшихся ферми-поверхностей, $\Delta_{b1,2} = \Delta_{a1} = \Delta_0$. Соотношение между амплитудами большей и меньшей щелей приняты как $\Delta_L = \Delta_0 = 2\Delta_S$, где Δ_L и Δ_S обозначают большую и меньшую величины щели, соответственно. Примерно такое соотношение наблюдается в экспериментах [37; 144—147]. Как видно из Рисунка 2.1 (а), для s_{\pm} состояния резкий скачок и, следовательно, Ω_R смещаются к меньшим частотам. Данный новый энергетический масштаб хорошо прослеживается в s_{++} -состоянии как точка начала плавного увеличения восприимчивости. Он равен $\Delta_L + \Delta_S = 3/2\Delta_0$. Таким образом, спин-резонансный пик в s_{\pm} -состоянии смещается к меньшим частотам, $\Omega_R < \Delta_L + \Delta_S$, см. Рисунок 2.1 (b). На графиках присутствует также ещё одна особенность — «горб» вблизи частоты $2\Delta_L = 2\Delta_0$. Следует отметить, что восприимчивость в s_{++} -состоянии не претерпевает каких-либо значительных изменений по сравнению со случаем равных щелей.

Для демонстрации причины возникновения нового энергетического масштаба $\Delta_L + \Delta_S$, рассмотрим энергетический спектр системы в сверхпроводящем состоянии вблизи уровня Ферми, $E_{\mathbf{kv}} = \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{kv}}^2 + \Delta_{\mathbf{kv}}^2}$, см. Рисунок 2.2. С одной стороны, две границы по энергии, $2\Delta_S$ и $2\Delta_L$, естественным образом возникают в энергетическом спектре $E_{\mathbf{kv}}$ и связаны с дырочной a_2 и электронными $b_{1,2}$ зонами, соответственно. С другой стороны, восприимчивость $\chi^{(0)+,-}(\mathbf{Q},\Omega)$ содержит рассеяние между электронными и дырочными зонами на волновом векторе \mathbf{Q} . Энергетическая щель, которая превосходит энергию возбуждения электрондырочных пар оказывается непрямой щелью с величиной $\tilde{\Delta} = \Delta_L + \Delta_S$. Именно поэтому спиновые возбуждения в s_{++} -состоянии на Рисунке 2.1 возникают с частоты, пропорциональной непрямой щели $\tilde{\Delta} = 2\Delta_0$. То же справедливо и для резкого скачка в Im $\chi^{(0)}$ для s_{\pm} -состояния — он смещается к частоте $\approx \tilde{\Delta}$. Всё это вместе с соответствующей логарифмической сингулярностью в Re $\chi^{(0)}$ даёт спин-резонансный пик в RPA на частоте $\Omega_R \leqslant \tilde{\Delta}$.



Рисунок 2.2 — Энергетический спектр четырёхзонной модели вблизи уровня Ферми $\varepsilon_F = \mu$ в сверхпроводящем состоянии, $E_{\mathbf{k}\nu} = \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}\nu}^2 + \Delta_{\mathbf{k}\nu}^2}$, построенный как функция импульса **k** вдоль направления $\Gamma - M$, т. е. направления $(0,0) - (\pi,\pi)$. Также показан волновой вектор рассеяния **Q**, входящий в спиновую восприимчивость.

Изменения в зонной структуре или уровне допирования могут привести к изменению непрямой щели. В частности, поскольку при дырочном допировании дырочные карманы ферми-поверхности становятся больше, то волновой вектор **Q** может соединять состояния на электронном и *внутреннем* дырочном карманах поверхности Ферми. Щели на этих обеих ферми-поверхностях определяются величиной Δ_L и поэтому непрямая щель становится равной $\tilde{\Delta} = 2\Delta_L$. Это устанавливает максимальный масштаб энергий для возникновения спинового резонанса, т. е. $\Omega_R \leq 2\Delta_L$. Таким образом, мы приходим к заключению, что в зависимости от соотношения между волновым вектором \mathbf{Q} и точной геометрией поверхности Ферми, непрямая щель в большинстве сверхпроводников на основе железа может быть либо $\tilde{\Delta} = \Delta_L + \Delta_S$, либо $\tilde{\Delta} = 2\Delta_L$. Пик в динамической спиновой восприимчивости на волновом векторе \mathbf{Q} будет действительно спин-резонансным, если он возникает на частоте ниже энергии непрямой щели, $\Omega_R \leq \tilde{\Delta}$.

2.1.2 Сравнение с экспериментальными данными

Теперь мы можем сравнить энергетические масштабы полученные из ARPES-экспериментов, андреевской спектроскопии, и неупругого рассеяния нейтронов. Все данные приведены в Таблице 1. INS-эксперименты дают частоту пика $\omega_{INS} \approx 9.5$ мэВ в BaFe_{1,85}Co_{0,15}As₂ с $T_c = 25$ K [91]. Для той же самой системы величины щелей, извлечённые из ARPES, равны $\Delta_L \approx 6,7$ мэВ и $\Delta_S \approx 4,5$ мэВ [148], а для подобной системы с $T_c = 25,5$ K $\Delta_L \approx 6,6$ мэВ и $\Delta_S \approx 5$ мэВ [149]. Величины щелей полученные из андреевской спектроскопии составляют $\Delta_L \approx 9$ мэВ и $\Delta_S \approx 4$ мэВ в BaFe_{1,8}Co_{0,2}As₂ с $T_c = 24,5$ K [135]. Как видно, $\omega_{INS} < \Delta_L + \Delta_S$ и мы можем с уверенностью судить, что пик в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов является спин-резонансным.

Для дырочно-допированных систем частота пика в INS-экспериментах примерно равна 14 мэВ в Ва_{0,6}K_{0,4}Fe₂As₂ с $T_c = 38$ K [130]. Присутствует лёгкое несоответствие между величинами щелей, полученными из ARPES-экспериментов и андреевских спектров. Первые дают $\Delta_L \approx 12$ мэВ и $\Delta_S \approx 6$ мэВ в том же самом материале с $T_c = 37$ K [37], следовательно $\omega_{INS} < \Delta_L + \Delta_S$. Амплитуды щелей полученные из андреевской спектроскопии равные $\Delta_L \approx 8$ мэВ и $\Delta_S \approx 2$ мэВ в Ва_{0,65}K_{0,35}Fe₂As₂ с наименьшей $T_c = 34$ K [137]. В данном случае $\omega_{INS} > \Delta_L + \Delta_S$, но $\omega_{INS} < 2\Delta_L$ и мы всё ещё можем полагать, что пик в INS-экспериментах является спин-резонансным. Тем не менее, в таком случае определённый вывод может быть дан только после вычисления спинового отклика для конкретной зонной структуры.

Единственным случаем, когда $\omega_{INS} > 2\Delta_L$ является FeTe_{0,5}Se_{0,5}. Согласно нашему анализу, в данном соединении должно возникать сверхпроводящее состояние со структурой параметра порядка, сохраняющей знак в пределах по-

Таблица 1 — Сравнение энергий пиков в INS-экспериментах с большей и меньшей щелями в различных сверхпроводниках на основе железа. Данные об амплитудах щелей Δ_L и Δ_S получены из экспериментов с андреевским отражением, спектров сканирующей туннельной (scanning tunneling spectroscopy, STS), оптической и мюонной (µSR) спектроскопии, подгонкой данных $H_{c1}(T)$ под теорию БКШ, и из ARPES-экспериментов. Если частота пика и величины щелей удовлетворяют условию $\omega_{INS} < \Delta_L + \Delta_S$, то щели отмечаются зелёным цветом, а если они удовлетворяют условию $\omega_{INS} < 2\Delta_L$, то щели помечаются жёлтым цветом. Красный цвет используется в случае $\omega_{INS} > 2\Delta_L$.

Материал	$T_{\rm c}$ (K)	WING (MAB)	$\Delta_L \Delta_S$ (M3B)
BaFet oCoo tAsa	19	8.3 [150]	50:40 (ABPES) [150]
$\begin{bmatrix} BaFe_{1,9} \\ Co_{0,124} \\ As_{2} \end{bmatrix}$	25	8.0 [150]	6.5: 4.6 (ABPES) [150]
$BaFe_{1,800} Co_{0,134} Ho_2$	19	8.5 [150]	5.6: 4.6 (ABPES) [150]
$\begin{array}{c} \text{Dare}_{1,81}\text{Co}_{0,19}\text{As}_2\\ \text{BaFo}_{1,81}\text{Co}_{1,19}\text{As}_2 \end{array}$	25	$0.5 [01 \cdot 151]$	6.7: 4.5 (ARPES) [148]
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	25	9,0 [91, 101]	6.6.5 (ADDES) [140]
$Dare_{1,85}CO_{0,15}AS_2$	20,0	$\sim 9,5!$	0,0,0 (ARF ES) [149]
$BaFe_{1,8}Co_{0,2}As_2$	24,5	$\sim 9,5?$	9; 4 (Андреевское отр.) [135]
$BaFe_{1,84}Co_{0,16}As_2$	22	8,6 [152]	7 (Тунн. сп.) [153]
$Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$	38	14 [130; 154; 155]	12,5; 5,5 (ARPES) [37; 144]
$Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$	38	14 [130; 154; 155]	7-11,5; 4-7 (ARPES) [156]
$Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$	38	14 [130; 154; 155]	8,4; 3,2 (Тунн. сп.) [155; 157]
$Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$	35	14 [154]	10-12; 7-8 (ARPES) [158]
$Ba_{0,6}K_{0,4}Fe_2As_2$	37,5	14 [154]	$8,5-9,3; 1,7-2,3 (H_{c1})$ [159]
$Ba_{0,65}K_{0,35}Fe_2As_2$	34	13 [154]	7,4-8; 1,4-2 (Андреевское отр.) [137]
$Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$	32	14 [154]	9,2; 1,1 (ARPES) [141; 160]
FeSe	8	4 [161]	2,5; 3,5 (Тунн. сп.) [162]
FeSe	8	4 [161]	0,6-1; 2,4-3,2 (Андреевское отр.) [136]
$\mathrm{FeTe}_{0,5}\mathrm{Se}_{0,5}$	14	6-7 [163–165]	2,61; 0,51-0,87 (µSR) [166; 167]
$\mathrm{FeTe}_{0,5}\mathrm{Se}_{0,5}$	14	6-7 [163–165]	3,3-3,4; 1,0 (Андреевское отр.) [168]
LiFeAs	18	8 [169]	5-6; 2,8-3,5 (ARPES) [145–147]
LiFeAs	18	8 [169]	5,4; 1,4 (Андреевское отр.) [139; 140]
LiFeAs	18	8 [169]	5,3; 2,5 (Тунн. сп.) [170—172]
$NaFe_{0,935}Co_{0,045}As$	18	7 [173]	6,8; 6,5 (ARPES) [174]
$NaFe_{0,95}Co_{0,05}As$	18	$\sim 7?$	6,8; 6,5 (ARPES) [174]



Рисунок 2.3 — Данные из Таблицы 1, сгруппированные по материалам. Каждый столбец определяется величиной $\omega_{INS}/(\Delta_L + \Delta_S)$. Если он ниже границы $\Delta_L + \Delta_S$, то реализуется случай (1); случай (2) соответствует пересечению столбцом предела $2\Delta_L$, а случай (3) возникает когда столбец оказывается непосредственно под линией $2\Delta_L$.

верхности Ферми. Однако окончательный ответ можно дать только после того, как данные о сверхпроводящих щелях, полученные в мюонной спектроскопии (muon spin-resonance, µSR) [166; 167], будут тщательно проверены другими методиками.

В качестве отдельного замечания следует указать, что возникновение «горба» в сверхпроводящем состоянии на частотах больших чем частота основного пика (так называемая особенность двойного резонанса) может быть связана с энергетическим масштабом $2\Delta_L$, см. Рисунок 2.1. Подобная структура наблюдалась в NaFe_{0,985}Co_{0,015}As [175; 176] и FeTe_{0,5}Se_{0,5} [163]. Несколько похожая структура была обнаружена в INS-экспериментах с поляризованными нейтронами в BaFe_{1,9}Ni_{0,1}As₂ [177] и Ba(Fe_{0,94}Co_{0,06})₂As₂ [178], однако её источником может быть спин-орбитальное взаимодействие [179], а не просто энергетический масштаб $2\Delta_L$. Другое объяснение особенности двойного резонанса связано с наличием магнонной моды, т. е. интенсивностью слабого низкоэнергетического пика в недопированных материалах, связанного со спиновыми возбуждениями магнитного порядка, которая может усиливаться ниже T_c [150].

2.2 Влияние примесного рассеяния на спин-резонансный пик в сверхпроводниках на основе железа

Здесь мы снова исследуем спиновый резонанс в сверхпроводящем состоянии ферропниктидов в рамках четырёхзонной модели (1.6) в приближении сильной связи для двумерного слоя железа [89], описанной в главе 1. С целью рассмотреть основные эффекты, оказываемые немагнитным беспорядком на спиновый резонанс, для учёта влияния рассеяния на немагнитных примесях мы введём феноменологически простое статическое борновское приближение для квазичастичной собственно-энергетической части [1]. В следующих главах будут записаны уравнения на примесную собственно-энергетическую часть, которые будут решены в приближении \mathcal{T} -матрицы. Здесь же ограничимся простейшим приближением. Оно заключается в том, что многократное рассеяние на одной и той же примеси приводит к собственно-энергетической части в форме $\Sigma(\mathbf{k}) \approx -\frac{\mathrm{i}}{2t_{\mathbf{k}}}$, где $t_{\mathbf{k}}$ — время жизни квазичастиц (см., например, так называемое первое борновское приближение в книге [180]). Вычисление точной зависимости времени жизни квазичастиц от импульсов является отдельной сложной задачей, для которой необходимо рассмотрение реалистичных многоорбитальных моделей с точным учётом орбитального вклада в зоны, как например это было сделано для вычисления транспортных коэффициентов в работе [45]. Это находится за пределами настоящей работы, и, поэтому, пренебрегая импульсной зависимостью в $t_{\mathbf{k}}$, мы полагаем $\Sigma(\mathbf{k}, \mathrm{i}\Omega_M) = -\mathrm{i}\Gamma$, вводя параметр интенсивность рассеяния на примесях Г. Сверхпроводящее состояние описывается параметром порядка s_{\pm} -типа с равными по амплитуде щелями $\pm \Delta_0$ (1.93).

2.2.1 Результаты и обсуждение

Результат расчётов спиновой восприимчивости (1.88) в приближении случайных фаз (1.89) после аналитического продолжения $i\Omega_M \to \Omega + i\delta^+$ показан на Рисунке 2.4 для набора значений Г. В случае малых Г спин-резонансный пик непосредственно наблюдается ниже энергии $2\Delta_0$. С ростом Г он становится шире и практически исчезает как только Г становится сравнимой по величине с Δ_0 . Мы можем проследить энергию спинового резонанса Ω_R как функцию Г. Величина Ω_R определяется как максимальное значение Im $\chi^{\text{RPA}+,-}(\mathbf{Q},\Omega)$. Из результатов, показанных на вставке на Рисунке 2.4, мы видим, что Ω_R смещается к большим частотам с увеличением беспорядка.



Рисунок 2.4 — Результаты расчётов $\mathrm{Im} \chi^{\mathrm{RPA}+,-}(\mathbf{Q},\Omega)$ на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$ в четырёхзонной модели в s_{\pm} -состоянии (главная панель) и частоты спинового резонанса Ω_R , определённой как максимум $\mathrm{Im} \chi^{\mathrm{RPA}+,-}(\mathbf{Q},\Omega)$ (вставка) для различных значений интенсивности рассеяния Г. Спиновый резонанс ниже $\Omega = 2\Delta_0$ становится намного шире с ростом Г и, фактически, исчезает для $\Gamma > \Delta_0$.

Полученные результаты находятся в хорошем согласии с результатами представленными в работе [181], в котрой зонная модель была проще, чем используемая здесь, но учтены вершинные поправки в электронно-дырочный

пузырь за счёт рассеяния на примесях. В частности, для такого же сокращения высоты спин-резонансного пика мы видим подобное уширение пика и малые изменения частоты возникновения резонанса. Такое согласие подразумевает, что вершинные поправки не играют значительной роли в низкоэнергетическом спиновом резонансе, хотя они, как известно, важны для точного вычисления транспортных коэффициентов. С другой стороны, мы приходим к большим интенсивностям рассеяния, чем в работе [181], и наблюдаем нелинейный рост частоты спинового резонанса.

2.3 Заключение

Мы провели анализ спинового отклика сверхпроводников на основе железа с двумя различными величинами сверхпроводящих щелей, $\Delta_L > \Delta_S$. Спиновый резонанс возникает в s_{\pm} -состоянии ниже частоты, равной величине непрямой щели $\tilde{\Delta}$, которая определяется суммой щелей в пределах двух различных листов поверхности Ферми, связанных волновым вектором рассеяния **Q**. В s_{++} -состоянии спиновые возбуждения отсутствуют ниже $\tilde{\Delta}$ когда не принимаются во внимание дополнительные механизмы рассеяния, которые могут привести к возникновению пика выше $\tilde{\Delta}$ [85]. Для геометрии поверхности Ферми, характерной для большинства сверхпроводящих соединений железа, непрямая щель равна либо $\tilde{\Delta} = \Delta_L + \Delta_S$, либо $\tilde{\Delta} = 2\Delta_L$. Это даёт простой критерий определения того, действительно ли пик, наблюдаемый в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов, является спин-резонансным: если частота возникновения пика Ω_R меньше чем щель $\tilde{\Delta}$, тогда это спиновый резонанс и, следовательно, сверхпроводящее состояние обладает s_{\pm} -структурой щели.

Сравнение энергетических масштабов полученных из андреевской спектроскопии, INS- и ARPES- и других экспериментов, позволяющих определить сверхпроводящие щели, для большинства материалов подтверждает, что наблюдаемая особенность в INS-спектре является спин-резонансным пиком. Тем не менее, в некоторых случаях не совсем ясно из эксперимента, какие щели связаны волновым вектором **Q**. Даже не зная этого точно, мы можем сделать некоторые выводы. К примеру, если одна из щелей Δ_L , то возможны три случая: (1) $\Omega_R \leq \Delta_L + \Delta_S$ и пик на частоте Ω_R является спин-резонансным, (2) $\Omega_R > 2\Delta_L$ и пик определённо не спин-резонансный, и (3) $\Omega_R \leq 2\Delta_L$ и пик весьма вероятно является спин-резонансным, но точный ответ можно дать только после расчётов динамической спиновой восприимчивости для конкретной зонной структуры.

Также, мы исследовали спин-резонансный пик в сверхпроводящем состоянии соединений железа в присутствии немагнитного беспорядка. Последний рассматривался в рамках простого статического борновского приближения, что даёт нам только основные качественные результаты. Усреднённая интенсивность рассеяния на примесях Г рассматривалась как параметр. Для малых значений Г спин-резонансный пик отчётливо наблюдается ниже энергии $2\Delta_0$ и с ростом Г он становится шире и практически исчезает, как только Г становится сравнимой с Δ_0 . Энергия спинового резонанса Ω_R (определяемая как максимальное значение мнимой части спиновой восприимчивости) смещается к большим энергиям с ростом степени беспорядка.

Глава 3. Детали вызванного рассеянием на немагнитных примесях перехода между *s*_±- и *s*₊₊-состояниями в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа

В ранних работах, изучавших переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ в ферропниктидах, было показано, что он имеет место только в системах с существенным межзонным спаривающим взаимодействием [103; 123]. В своей работе мы фокусировались на деталях перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$. В частности, нас интересует непрерывность значений сверхпроводящей щели в процессе данного перехода [5]. Кроме того, поскольку расчёты ранее [103; 107; 182] проводились для низких температур, то необходимо рассмотреть данный переход в широком температурном диапазоне, вплоть до T_c [4; 6].

3.1 Модель и методы

Для рассмотрения перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями в ВТСП на основе железа мы используем двухзонную модель, описанную в главе 1. Для того, чтобы определить критическую температуру T_c , мы решаем линеаризованные уравнения на параметр порядка и частоту,

$$\sum_{\omega_{n'},\nu} \left[\delta_{nn'} \delta_{\mu\nu} - \delta_{nn'} \tilde{\Gamma}_{\mu\nu} \frac{\operatorname{sgn}(\omega_{n'})}{|\tilde{\omega}_{\nu n'}|} - \pi T_c \sum_{\omega_{n'},\nu} \Lambda_{\mu\nu} (n-n') \frac{\operatorname{sgn}(\omega_{n'})}{|\tilde{\omega}_{\nu n'}|} \right] \tilde{\varphi}_{\nu n'} = 0, \quad (3.1)$$

$$\tilde{\omega}_{\mu n} = \omega_n + \sum_{\nu} \tilde{\Gamma}_{\mu\nu} \operatorname{sgn}(\omega_n) + \pi T_c \sum_{\omega_{n'},\nu} |\Lambda_{\mu\nu}(n-n')| \operatorname{sgn}(\omega_{n'}), \qquad (3.2)$$

где $\tilde{\Gamma}_{\mu\nu}$ — компоненты матрицы интенсивности рассеяния на примеси [103],

$$\tilde{\Gamma}_{ab(ba)} = \frac{\Gamma_{a(b)}(1-\sigma)}{\sigma(1-\sigma)\eta^2 N^2 / (N_a N_b) + (\sigma \eta^2 - 1)^2}.$$
(3.3)

Стоит отметить, что диагональные элементы $\tilde{\Gamma}_{aa}$ и $\tilde{\Gamma}_{bb}$ в уравнениях (3.1) и (3.2) отсутствуют. Уравнение (3.1) может быть записано в матричной форме как $\hat{\mathbf{K}}\tilde{\boldsymbol{\varphi}} = 0$, где $\hat{\mathbf{K}}$ и $\tilde{\boldsymbol{\varphi}}$ представляют собой матрицу и вектор, соответственно, в комбинированном зонном пространстве и пространстве мацубаровских частот. Изменяя T_c как независимый параметр, мы определяем её величину как точку, в которой определитель det $|\hat{\mathbf{K}}|$ меняет знак.

В своих расчётах мы выбрали следующее соотношение между плотностями состояний: $N_b/N_a = 2$, а соответствующие константы связи приняты в следующем виде: $\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda_{aa} & \Lambda_{ab} \\ \Lambda_{ba} & \Lambda_{bb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & -0.2 \\ -0.1 & 0.5 \end{pmatrix}$. Это приводит к возникновению сверхпроводящего состояния с s_{\pm} -параметром порядка и критической температурой сверхпроводящего перехода $T_{c0} = 41.4$ К в чистом пределе [103; 110; 111] и положительной усреднённой константой связи (1.44), $\langle \Lambda \rangle > 0$.

3.2 Детали перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ при низких температурах

Поскольку нас интересует поведение сверхпроводящих щелей в процессе перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями, на Рисунке 3.1 мы строим $\Delta_{\mu n}$ для низшей мацубаровской частоты n = 0 как функцию Γ_a при $T = 0.03T_{c0}$. Рассматривая поведение щели в зоне b мы можем сделать вывод, что переход наблюдается при $\Gamma_a/T_{c0} \gtrsim 1.1$. Для больших значений σ щели меняются плавно вблизи перехода, но для $\sigma < 0.12$ мы отмечаем скачок на графике для малой



Рисунок 3.1 — Зависимость сверхпроводящих щелей на низшей мацубаровской частоте $\Delta_{\mu n=0}$ от интенсивности рассеяния на немагнитных примесях Γ_a для s_{\pm} - состояния с $\eta = 0$ и $T = 0,03T_{c0}$. На панели (а) представлены $\Delta_{\mu n=0}$ в широком диапазоне σ , на панели (b) изображён скачок у щелей в точке перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ при малых значениях σ . Можно отметить плавное поведение щелей при $\sigma > 0,11$

щели, Δ_{bn} , когда она пересекает нуль. Это происходит даже в борновском пределе, $\sigma = 0$. В то же время, критическая температура всегда представляет собой гладкую функцию от Γ_a , см. график T_c на Рисунке 3.2. Критическая темпе-



Рисунок 3.2 — Зависимость T_c от интенсивности рассеяния Γ_a для s_{\pm} -состояния с $\eta = 0$. На панели (а) приведены результаты для широкого диапазона Γ_a . На панели (b) выделен узкий диапазон Γ_a в котором переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ происходит со скачком в щелях. T_c изменяется плавно в точках перехода помеченных кружками

ратура, очевидно, «не чувствует» возникновения скачка в поведении меньшей щели. Чтобы понять, почему так происходит, мы рассмотрели как щели эволюционируют с температурой. Результаты для $\sigma = 0$ и $\eta = 0$ представлены на Рисунке 3.3. Отчётливо видно, что с увеличением температуры скачкообразное поведение Δ_{bn} меняется на плавную зависимость от интенсивности рассеяния. Такая смена поведения происходит при $T \sim 0.1T_{c0}$ и, естественно, при более высоких температурах, включая T_c , система проявляет гладкое поведение сверхпроводящих щелей. Следует отметить, что температурная зависимость щелей, представленная на Рисунке 3.3, сохраняется для $\eta = 0.5$ и $\eta = 1$.

Как известно, наиболее сильное подавление T_c имеет место в борновском пределе при $\eta = 0$, в то время как в противоположном пределе полностью внутризонного рассеяния с u = 0 ($\eta \to \infty$) разрушение пар отсутствует, т. к. $\tilde{\Gamma}_{ab} \to 0$ [107]. Похожая картина характерна и для унитарного предела с $\sigma = 1$, см. уравнение (3.3).

Для того, чтобы продемонстрировать как переход изменяется с увеличением внутризонной части примесного потенциала, v, на Рисунках 3.4 и 3.5 мы



Рисунок 3.3 — Температурная эволюция щелей $\Delta_{\mu n=0}$ на низшей мацубаровской частоте для различных Γ_a при $\sigma = 0$ и $\eta = 0$. Видно, как скачкообразное поведение меньшей щели при низких температурах преходит в плавное при $T \gtrsim 0.09T_{c0}$

представили результаты для различных величин η при $T = 0.03T_{c0}$. На Рисунке 3.4 мы видим изменение от почти полностью межзонного (v = 0.1u) до однородного (v = u) по внутри- и межзонным каналам потенциала рассеяния. Мы видим, что критическая величина Γ_a , при которой переход имеет место, увеличивается с ростом v для $\sigma > 0$. В борновском пределе мы наблюдаем скачок у щелей для всех η при одном и том же критическом значении Γ_a^{crit} , см. Рисунок 3.5(a).

3.3 Температурная зависимость перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями

Мы рассмотрели как меньшая щель $\Delta_{b,n}$ для наименьшей мацубаровской частоты, n = 0, зависит от интенсивности рассеяния Γ_a и температуры T в двух различных случаях: 1) слабое рассеяние с $\sigma = 0$ (борновский предел), см. Рисунок 3.6, и 2) промежуточный случай с $\sigma = 0,5$, см. Рисунок 3.7. Большая щель, $\Delta_{a,n}$, всегда положительна и, таким образом, существует линия перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ соответствующая смене знака у $\Delta_{b,n}$ с отрицательного на положительный. В процессе данного перехода система проходит через бесщелевое состояние с конечной большей щелью [103]. Характерно, что линия перехода не вертикальна на Рисунках 3.6 и 3.7. Следовательно, существует не единственное



Рисунок 3.4 — Зависимость сверхпроводящих щелей на низшей мацубаровской частоте $\Delta_{\mu n=0}$ от интенсивности рассеяния Γ_a в s_{\pm} -состоянии при σ от 0 до 0,7 для различных значений η , а именно для v = 0,1u (a), v = u/2 (b), v = 0,8u (c) и однородного примесного потенциала v = u (d)

критическое значение интенсивности рассеяния, а целый диапазон значений, зависящих от температуры $\Gamma_a^{\text{crit}}(T)$. Более того, если мы фиксируем Γ_a при температуре $1,1T_{c0} < \Gamma_a < 1,6T_{c0}$ для $\sigma = 0$ или $1,5T_{c0} < \Gamma_a < 3,2T_{c0}$ для $\sigma = 0,5$, а затем начнём увеличивать температуру, то мы будем наблюдать необычное поведение меньшей щели. А именно, в то время как при низких температурах переход в s_{++} -состояние уже произошёл ($\Delta_{b,n} > 0$), при более высоких температурах система возвращается в s_{\pm} -состояние ($\Delta_{b,n} < 0$). Таким образом, существует зависящий от температуры переход $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$. Вместе с увеличением Γ_a температура этого перехода смещается к T_c и система, в конечном итоге, находится в s_{++} -состоянии для всего температурного диапазона.

Для того чтобы проиллюстрировать указанные моменты, на Рисунках 3.8 и 3.9 для $\sigma = 0$ (Рисунках 3.10 и 3.11 для $\sigma = 0.5$) мы приводим результаты для температурной зависимости функции щели $\Delta_{\mu,n=0}$, параметра порядка $\tilde{\phi}_{\mu,n=0}$ и

55



Рисунок 3.5 — Зависимость сверхпроводящих щелей на низшей мацубаровской частоте $\Delta_{\mu n=0}$ от интенсивности рассеяния Γ_a в s_{\pm} -состоянии при различных η для $\sigma = 0$ (a), $\sigma = 0.1$ (b), $\sigma = 0.2$ (c) и $\sigma = 0.3$ (d). На панели (a), все кривые для различных значений η накладываются друг на друга

фактора перенормировки $Z_{\mu,n=0}$ для различных фиксированных значений Γ_a . Щель в зоне *a* остаётся положительна для всех значений Γ_a и спадает до нуля при T_c , см. Рисунки 3.8(a) и 3.10(a). Существует, однако, небольшой диапазон значений Γ_a вблизи Γ_a^{crit} , для которых щель является возрастающей функцией T при низких температурах. В то же время, параметр порядка ведёт себя совершенно обычным образом и спадает с ростом T_c , см. Рисунки 3.9(a) и 3.11(a). Такая необычная температурная зависимость щели при наименьшей мацубаровской частоте обусловлена фактором перенормировки $Z_{\mu,n=0}$, показанном на Рисунках 3.9(b) и 3.11(b). А именно, согласно уравнению (1.21), большие значения $Z_{\mu,n}$ имеющие место при низких температурах приводят к уменьшению $\Delta_{\mu,n}$. Для зоны *b* аналогичный эффект не наблюдается в борновском пределе, но оказывается заметным в промежуточном режиме. Это видно если сравнить функцию щели на Рисунке 3.10(b) и параметр порядка на Рисунке 3.11(c),

56



Рисунок 3.6 — Зависимость функции щели $\Delta_{b,n=0}$ от интенсивности рассеяния Γ_a и температуры T в борновском пределе, $\sigma = 0$. Зелёным цветом обозначается состояние с исчезающе малой величиной меньшей щели, $\Delta_{b,n} < 10^{-3} T_{c0}$

приняв во внимание при этом низкотемпературное поведение $Z_{\mu,n}$ на Рисунке 3.11(d). Подобное поведение щелей, в принципе, может возникать за счёт функциональной зависимости щелей на действительных частотах, см. уравнение (7) в работе [183].

В чистом пределе и для малых Γ_a знак меньшей щели $\Delta_{b,n}$ отрицателен при всех температурах, см. Рисунок 3.8(b) и 3.10(b). С увеличением интенсивности рассеяния на примесях щель при низких температурах меняет свой знак, а при более высоких температурах знак снова меняется на исходный (при малых Γ_a) или щель обращается в нуль ($\Gamma_a \gtrsim 2T_{c0}$). Таким образом, переход из s_{\pm} -состояния в s_{++} -состояние характеризуется двумя параметрами, а именно, критической интенсивностью рассеяния Γ_a^{crit} и критической температурой T^{crit} . Последняя изменяется от нуля до T_c . Следовательно, s_{++} -состояние оказывается доминирующим в изначально чистой s_{\pm} -системе для $\Gamma_a > \Gamma_a^{crit}$ и $T < T^{crit}$. Это выполняется как в борновском, так и в промежуточном случае. Кроме того следует отметить, что подобное поведение проявляется также и для более высоких мацубаровских частот, см. Рисунок 3.12, где для примера представлено поведение щелей для n = 1 и n = 10.

Как было показано выше в разделе 3.2, при низких температурах, меньших $0,1T_{c0}$, изменение меньшей щели как функции Γ_a в пределе слабого



Рисунок 3.7 — Зависимость функции щели $\Delta_{b,n=0}$ от интенсивности рассеяния Γ_a и температуры T в промежуточном режиме рассеяния на примесях, $\sigma = 0,5$. Зелёным цветом обозначается состояние с исчезающе малой величиной меньшей щели, $\Delta_{b,n} < 10^{-3} T_{c0}$



Рисунок 3.8 — Температурная зависимость функции щели при наименьшей мацубаровской частоте $\Delta_{\mu,n=0}$ для фиксированных значений Γ_a в борновском пределе. Зонные индексы принимают значения $\mu = a$ (панель (a)) и $\mu = b$ (панель (b))

рассеяния происходит скачкообразно. Тот же самый скачок наблюдается также и в температурной зависимости щели, см. Рисунок 3.13, где показана $\Delta_{b,n}$ в борновском пределе. Резкий скачок в температурной зависимости меньшей щели возникает при $T < 0,1T_{c0}$.

3.4 Заключение

Итак, мы исследовали детали перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа, учитывающей рассеяние на немагнитных примесях. Мы показали, что при низких температурах щели меняются плавно при данном переходе для всех значений параметра обобщённого сечения рассеяния σ и отношения между меж- и внутризонным потенциалами рассеяния η , за исключением случая слабо рассеивающей примеси с малыми значениями $\sigma < 0.12$. В последнем случае меньшая щель изменяется скачком в точке перехода. Для намного больших значений интенсивности рассеяния Γ_a меньшая щель меняется плавно. Для исключительно



Рисунок 3.9 — Температурная зависимость перенормированного параметра порядка при наименьшей мацубаровской частоте $\tilde{\varphi}_{\mu,n=0}$ (a), (c) и фактора перенормировки $Z_{\mu,n=0}$ (b),(d), для фиксированных значений Γ_a в борновском пределе. Зонные индексы принимают значения $\mu = a$ (панели (a), (b)) и $\mu = b$ (панели (c), (d))



Рисунок 3.10 — Температурная зависимость функции щели при наименьшей мацубаровской частоте $\Delta_{\mu,n=0}$ для фиксированных значений Γ_a в промежуточном случае рассеяния на примесях ($\sigma = 0,5$). Зонные индексы принимают значения $\mu = a$ (панель (a)) и $\mu = b$ (панель (b))

межзонного рассеивающего потенциала примеси ($\eta = 0$) поведение меняется вблизи $\sigma = 0,11$. С увеличением температуры поведение щелей меняется со скачкообразного до плавного вблизи $T \sim 0,1T_{c0}$. По этой причине критическая температура представляет собой гладкую функцию интенсивности рассеяния Γ_a и не «чувствует» ступенчатого изменения в поведении щелей.

Кроме того, рассмотрев зависимости сверхпроводящих щелей $\Delta_{\mu,n}$ как от температуры, так и от интенсивности рассеяния на немагнитных примесях, мы показали, что переход из s_{\pm} - в s_{++} -состояние оказывается зависящим от температуры. А именно, в узком диапазоне значений интенсивности рассеяния, когда s_{++} -состоянием является основным, оно возвращается к s_{\pm} -состоянию при повышении температуры. При увеличении интенсивности рассеяния на примесях температура такого перехода $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$ смещается к критической температуре T_c . Переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ характеризуется двумя параметрами: 1) критической интенсивностью рассеяния Γ_a^{crit} и 2) критической температурой $T^{crit} \leq T_c$. Состояние с s_{++} -параметром порядка становится доминирующем в изначально чистой s_{\pm} -системе для $\Gamma_a > \Gamma_a^{crit}$ и $T < T^{crit}$.

Что касается возможности экспериментально наблюдать возврат в s_{\pm} -состояние с увеличением T для фиксированной степени беспорядка, которая приводит к возникновению низкотемпературного s_{++} -состояния, то это может быть осуществимо, к примеру, в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов, где должен отсутствовать спин-резонансный пик в низкотемпературном s_{++} -состоянии, но появиться в s_{\pm} -состоянии при повышении температуры [33;

60



Рисунок 3.11 — Температурная зависимость перенормированного параметра порядка при наименьшей мацубаровской частоте $\tilde{\varphi}_{\mu,n=0}$ (a), (c) и фактора перенормировки $Z_{\mu,n=0}$ (b), (d), для фиксированных значений Γ_a в промежуточном случае рассеяния на примесях ($\sigma = 0,5$). Зонные индексы принимают значения $\mu = a$ (панели (a), (b)) и $\mu = b$ (панели (c), (d))

88; 89; 184]. Кроме того, температурная зависимость лондоновской глубины проникновения должна также проявлять характерные признаки бесщелевого поведения, которое сопровождает переход $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$ [107].

61



Рисунок 3.12 — Температурная зависимость сверхпроводящей щели для более высоких мацубаровских частот, $\Delta_{\mu,n=1}$ (a) и $\Delta_{\mu,n=10}$ (b) для фиксированных значений Γ_a в промежуточном случае рассеяния на примесях ($\sigma = 0,5$. Щели относящиеся к зоне *a* (зоне *b*) изображены штриховыми (сплошными) линиями



Рисунок 3.13 — Температурные зависимости функции щели при наименьшей мацубаровской частоте $\Delta_{b,n=0}$ в борновском пределе для нескольких значений интенсивности рассеяния Γ_a . Сплошные линии соответствуют плавному переходу $s_{++} \rightarrow s_{\pm}$, символами обозначены температурные зависимости в которых присутствует резкий скачок щели при переходе

Глава 4. Температурная зависимость лондоновской глубины проникновения магнитного поля при наличии перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$

Наблюдение перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями может быть весьма нетривиальной задачей, поскольку оба состояния характеризуются полной щелью, а оба параметра порядка принадлежат к одному и тому же классу симметрии. Следовательно, эксперименты по измерению удельной теплоёмкости и теплопроводности, а также ARPES-эксперименты не подходят в роли надёжных инструментов, т. к. они не обеспечивают непосредственного наблюдения тех изменений, что происходят при переходе. В даном случае особое внимание привлекают температурная зависимость оптического отклика и лондоновской глубины проникновения $\lambda_L(T)$. В частности, переход $s_{\pm} \leftrightarrow s_{++}$ проходит через бесщелевое состояние и должен проявить себя в качественном изменении формы $\lambda_L(T)$ [103; 107].

В последней на данный момент из опубликованных экспериментальных работ [128], посвящённых экспериментальному наблюдению рассматриваемого перехода, излагаются результаты экспериментов по измерению $\lambda_L(T)$ в образцах с немагнитным беспорядком, создаваемым облучением протонами. Данная работа сопровождается теоретическими расчётами, которые вызывают вопросы по нескольким причинам. Во-первых, плазменная частота ω_p меняется вместе с изменением концентрации примесей на порядок: сначала уменьшается с 1,21 эВ до 0,0821 эВ, а затем растёт до 0,139 эВ. Поскольку ω_p определяется электронами проводимости и нет свидетельств в пользу того, что облучение протонами оказывает существенное влияние на поверхность Ферми, то нет каких-либо оснований ожидать такого сильного изменения ω_p . То же справедливо для теоретического анализа экспериментальных результатов, проводимых в последующих работах той же самой группы исследователей [185; 186]. Во-вторых, обобщённое сечение рассеяния σ также должно, в теоретических расчётах из работы [128], очень сильно меняется при облучении протонами, от 0 до 0,278. Данный параметр задаёт рассматриваемый предел рассеяния, т. е. он равен нулю в слабом (борновском) пределе и становится равным единице в сильном (унитарном) пределе. Снова, у нас нет достаточных оснований ожидать, что σ будет меняться с добавлением беспорядка, созданного протонами. Что касается экспериментального наблюдения в работе [128], внезапный скачок в зависимости $\lambda_L(T)$ после первой дозы облучения протонами и появление длинных «хвостов» вблизи T_c указывают на поведение, отличное от предсказываемого теорией среднего поля, и подчёркивают всю сложность рассматриваемой системы.

Все указанные выше вопросы требуют формулировки чётких признаков перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$, которые позволят однозначно утверждать о его наличии. Здесь мы теоретически анализируем низкотемпературное поведение лондоновской глубины проникновения в рамках двухзонной модели для «грязного» сверхпроводника. Мы выводим надёжные признаки перехода из s_{\pm} -состояния в s_{++} -состояние [7], обнаружение которых естественны образом укажет на наличие рассматриваемого перехода.

4.1 Модель и методы

Здесь мы используем ту же двухзонную модель, что и в главе 3. Сверхпроводящий параметр порядка вычисляется также в рамках подхода Элиашберга для многозонных сверхпроводников, а учёт рассеяния на примесях производится в приближении *T*-матрицы.

В локальном пределе лондоновская глубина проникновения магнитного поля соответствует мнимой части оптической проводимости $\sigma^{xx'}(\omega, \mathbf{q} = 0)$ на нулевом импульсе **q** (в локальном, т. е., лондоновском, пределе) [187—189],

$$\frac{1}{\lambda_{L,xx'}^2} = \lim_{\omega \to 0} \frac{4\pi\omega}{c^2} \operatorname{Im} \, \sigma^{xx'}(\omega, \mathbf{q} = 0), \tag{4.1}$$

где x и x' — это направление осей в декартовых координатах, а c — скорость света в вакууме. Если пренебречь эффектами сильной связи и, в общем, эффектами ферми-жидкости, то для чистого однородного сверхпроводника при нулевой температуре мы имеем $1/\lambda_L = \sum_{\mu} \omega_{p\mu}/c \equiv \sum_{\mu} \omega_{p\mu}^{xx'}/c$, где $\omega_{p\mu}^{xx'} = \sqrt{8\pi e^2 N_{\mu}(0)} \langle v_{F\mu}^x v_{F\mu}^{x'} \rangle}$ представляет собой плазменную частоту электронов в зоне μ , $N_{\mu}(0)$ — это плотность состояний на уровне Ферми, и $v_{F\mu}^x$ — x-ая компонента скорости Ферми. Для рассеяния на примесях вершинные поправки от непересекающихся диаграмм равны нулю из-за условия $\mathbf{q} = 0$. Таким образом, глубина проникновения для многозонной системы может быть вычислена при помощи следующего выражения [107]:

$$\frac{1}{\lambda_L^2} = \sum_{\mu} \left(\frac{\omega_{p\mu}}{c}\right)^2 k_B T \sum_n \frac{g_{2\mu n}^2}{\pi N_{\mu}^2 \sqrt{\tilde{\omega}_{\mu n}^2 + \tilde{\varphi}_{\mu n}^2}}.$$
(4.2)

В экспериментах кроме λ_L получают следующие величины: изменение глубины проникновения с температурой

$$\Delta \lambda_L(T) = \lambda_L(T) - \lambda_L(0), \qquad (4.3)$$

и, так называемая, «плотность сверхтекучей жидкости»

$$\rho_s(T) = \frac{\lambda_L^2(0)}{\lambda_L^2(T)}.\tag{4.4}$$

4.2 Результаты

Расчёты выполнены в промежуточном случае рассеяния на примесях, $\sigma = 0.5$. Для простоты мы исключили рассеяние на внутризонных примесях полагая $\eta = 0$, приняв u = 0.7 и v = 0. Плазменные частоты для двух зон взяты из расчётов в теории функционала плотности (density functional theory, DFT) [190] и равны $\omega_{pa} = 2.34$ эВ и $\omega_{pb} = 1.25$ эВ. Данные величины типичны для пниктидов железа, см. [111].

Поведение s_{\pm} -состояния сильно зависит от знака усреднённой по зонам константы связи $\langle \Lambda \rangle$, см. выражение (1.44). Здесь мы выбрали отношение $N_a/N_b = 1/2$ и спин-флуктуационный спектр теми же, что и в проведённых ранее расчётах в главе 3 и в работах [103; 107; 182]. То же верно и для матрицы констант связи $\Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda_{aa} & \Lambda_{ab} \\ \Lambda_{ba} & \Lambda_{bb} \end{pmatrix}$, содержащей следующие элементы: $\Lambda = \begin{pmatrix} 3 & -0.2 \\ -0.1 & 0.5 \end{pmatrix}$ для s_{\pm} -парамера порядка с $\langle \Lambda \rangle > 0$ и критической температурой $T_{c0} = 41.4$ К, $\Lambda = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ для s_{\pm} -параметра порядка с $\langle \Lambda \rangle < 0$ и $T_{c0} = 39$ К, а также $\Lambda = \begin{pmatrix} 3 & 0.2 \\ 0.1 & 0.5 \end{pmatrix}$ для s_{++} -сверхпроводника с $T_{c0} = 41.4$ К.

В предыдущей главе было показано, что интенсивность рассеяния $\Gamma_a^{\rm crit}$, при которой переход между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями имеет место, зависит от температуры. В промежуточном режиме рассеяния на примесях, $\sigma = 0.5$, для $T = 0.01T_{c0}$ мы имеем $\Gamma_a^{\rm crit} = 1.15T_{c0}$.

4.2.1 Глубина проникновения при наименьшей температуре $T \rightarrow 0$

Мы работаем с мацубаровскими функциями Грина (1.16), и поэтому мы не можем рассматривать случай непосредственно абсолютного нуля температур. Очевидно, то же самое справедливо и в случае реальных экспериментов, где невозможно проводить измерения при T = 0. Следовательно, мы полагаем $\lambda_L(0) \approx \lambda_L(T = T_{min})$ с $T_{min} = 0.01T_{c0}$.

Как видно из Рисунка 4.1 (синяя линия), переход между s_{\pm} - и s_{++} - сверхпроводящими состояниями проявляется в глубине проникновения при $T \to 0$ как резкая смена зависимости λ_L от интенсивности рассеяния на примесях. До перехода $\lambda_L(\Gamma_a)$ быстро возрастает, что указывает на подавление s_{\pm} -щели. Подобное поведение получается для s_{\pm} -состояния с $\langle \Lambda \rangle < 0$ (зелёная линия на Рисунке 4.1). После перехода, который выглядит как резкий скачок в $\lambda_L(\Gamma_a)$, глубина проникновения возрастает менее интенсивно, что соответствует s_{++} -состоянию, обозначенному красной линией на Рисунке 4.1. Отметим, что наклон кривой до перехода отличается от наклона после перехода, что также служит дополнительным указателем на смену s_{\pm} - на s_{++} -состояние. По большому счёту, синяя кривая на Рисунке 4.1 качественно воспроизводит результаты экспериментов, полученные в работе [128] (см. Рисунок 1.7 (b)), однако имеются некоторые количественные расхождения.

4.2.2 Глубина проникновения λ_L и λ_L^{-2} в широком температурном диапазоне

Поскольку оптическая проводимость, а следовательно и обратный квадрат глубины проникновения, представляет собой функцию отклика, см. выраже-



Рисунок 4.1 — Глубина проникновения $\lambda_L(\Gamma_a)$ при температуре $T = 0,01T_{c0}$ для s_{\pm} -состояния с $\langle \Lambda \rangle > 0$ и с $\langle \Lambda \rangle < 0$, а также для s_{++} -сверхпроводника. Здесь $\sigma = 0,5, v = 0$. Γ_a и T выражены в единицах T_{c0} . Экспериментальные данные из работы [128] представлены на вставке чтобы продемонстрировать немонотонную зависимость $\lambda_L(T \to 0)$ от степени беспорядка, а также для демонстрации качественного совпадения с нашими результатами для s_{\pm} -состоянием с $\langle \Lambda \rangle > 0$

ние (4.1), именно λ_L^{-2} может быть непосредственно измерена, а не сама λ_L . Таким образом, с точки зрения экспериментального обнаружения рассматриваемого перехода оказывается более удобным рассмотреть λ_L^{-2} вместо λ_L . На Рисунке 4.2(a), переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ при температуре от 0,01 до 0,02 T_{c0} проявляется в виде скачка в $\lambda_L^{-2}(\Gamma_a)$. Присутствует хорошо различимый минимум в точке перехода. Следует отметить, что данный минимум не может быть устранён изменением масштаба графика. Для s_{++} -щели (Рисунок 4.2(c)), λ_L^{-2} слабо спадает как функция Γ_a , оставаясь конечной ненулевой величиной ниже T_c , в то время как для s_{\pm} -щели с $\langle \lambda \rangle < 0$ (Рисунок 4.2(b)) обратный квадрат глубины проникновения быстро спадает при любой температуре.

При температуре выше, примерно, $0,02T_{c0}$, переход $s_{\pm} \to s_{++}$ в глубине проникновения λ_L не сильно выражен, см. Рисунок 4.2(d). Более того, поведение λ_L для s_{\pm} -состояния с $\langle \Lambda \rangle > 0$ и s_{++} -состояния схожи вплоть до $T \approx 0,8T_{c0}$, что видно на Рисунках 4.2(d) и (f). При более высоких температурах, однако, λ_L в первом случае возрастает быстрее как функция Γ_a . Это происходит потому, что T_c в s_{++} -состоянии, возникшем после перехода $s_{\pm} \to s_{++}$, оказывается подавленным более интенсивно, чем в «подлинном» s_{++} -состоянии изображённом на Рисунке 4.2(f). При $T > 0,8T_{c0}$ существует диапазон значений интенсивности рассеяния на примесях, начиная с $\Gamma_a^{\text{p.b.}}$ ("pair breaking", «разрушающая пару»),



Рисунок 4.2 — Обратный квадрат глубины проникновения $\lambda_L^{-2}(\Gamma_a)$ (a)–(c) и глубина проникновения $\lambda_L(\Gamma_a)$ в логарифмическом масштабе (d)–(f) при температурах $0.01T_{c0} < T < T_{c0}$ для s_{\pm} -состояния с $\langle \Lambda \rangle > 0$ (a),(d) и $\langle \Lambda \rangle < 0$ (b),(e) а также для $s_{\pm+}$ -состояния (c),(f). Здесь $\sigma = 0.5$, v = 0. Γ_a и T даны в единицах T_{c0}

для которых сверхпроводимость полностью подавляется. На Рисунке. 4.2(d), такая величина показана для $T = 0,87T_{c0}$. В случае s_{\pm} -состояния с $\langle \Lambda \rangle < 0$ немагнитный беспорядок разрушает сверхпроводящее состояние при любой температуре в диапазоне $0,01T_{c0} < T < T_{c0}$, что проявляется в наличии $\Gamma_a^{\text{p.b.}}$ при каждой температуре, см. Рисунок 4.2(e).

4.2.3 Изменение в глубине проникновения с температурой, $\Delta\lambda_L(T)$

Для того чтобы вычислить изменение в глубине проникновения $\Delta\lambda_L(T)$, используя выражение (4.3) мы снова полагаем $\lambda_L(0) \approx \lambda_L(T_{min})$. Зависимость $\Delta\lambda_L(T)$ от интенсивности рассеяния на примесях Γ_a в s_{++} - и s_{\pm} -состояниях показана на Рисунке 4.3. Для s_{++} -щели (Рисунок 4.3(c)), наклон $\Delta\lambda_L(T)$ уменьшается с увеличением Γ_a , в то время как наклон для s_{\pm} -щели с $\langle\Lambda\rangle < 0$ (Рисунок 4.3(b)) становится круче. В случае s_{\pm} -щели с $\langle\Lambda\rangle > 0$ (Рисунок 4.3(a)) имеют место оба этих поведения: до перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ наклон увеличивается, после перехода уменьшается.

Две щели для s_{++} -состояния, изначально (при $\Gamma_a = 0$) имея различные значения, начинают меняться с внесением беспорядка так, что их абсолютные значения сближаются. Таким образом, изначальное двухщелевое поведение сменяется однощелевой зависимостью $\Delta\lambda_L(T)$ при высоких значениях Γ_a . Такая смена поведения является причиной пересечения различных кривых вблизи $0.6T_{c0}$ на Рисунке 4.3(c).

4.2.4 Температурная зависимость плотности сверхтекучей жидкости $\rho_s(T)$

Для чистого s_{\pm} -сверхпроводника с $\langle \Lambda \rangle > 0$, температурная зависимость плотности сверхтекучей жидкости $\rho_s(T)$, определяемая выражением (4.4), проявляет поведение, свойственное двухзонному сверхпроводнику с двумя неравными щелями, см. Рисунок 4.3(d), случай $\Gamma_a = 0$. Увеличение интенсивности рассеяния на примесях меняет двухщелевое поведение ρ_s вблизи перехода

70



Рисунок 4.3 — Изменение в глубине проникновения с температурой $\Delta\lambda_L(T) = \lambda_L(T) - \lambda_L(T_{min})$ (a)–(c) и плотность сверхтекучей жидкости ρ_s (d)–(f) для s_{\pm} -состояния с $\langle\Lambda\rangle > 0$ (a),(d) и с $\langle\Lambda\rangle < 0$ (b),(e) а также для s_{++} -состояния (c),(f). Расчёты были проведены в промежуточном режиме рассеяния на примесях, $\sigma = 0.5$, v = 0.0u. Γ_a и T даны в единицах T_{c0}

 $s_{\pm} \to s_{++}$ на поведение, характерное для однощелевого классического сверхпроводника. Это происходит из-за того, что меньшая щель проходит через нуль меняя знак. Дальнейшее увеличение концентрации примесей «восстанавливает» двухщелевое поведении $\rho_s(T)$, которое, в свою очередь, напоминает однощелевое при больших значениях Γ_a в s_{++} -состоянии. Такая ситуация совершено отлична от случая s_{\pm} -состояния с $\langle \Lambda \rangle < 0$, которое проявляет в наших расчётах однощелевое поведение у $\rho_s(T)$, несмотря на присутствие двух неравных щелей, см. Рисунок 4.3(е). Причиной этого является качественно схожая температурная зависимость λ_L^{-2} для обеих щелей, см. парциальные вклады от обеих зон в $\lambda_L^{-2}(T)$ на Рисунке 4.4. Поведение, продемонстрированное на Рисунке 4.3(d), также отличается от поведения для s_{++} -сверхпроводника (Рисунок 4.3(f)), которое переходит сразу от типичной двухщелевой зависимости $\rho_s(T)$ при низких интенсивностях рассеяния к однощелевой для высоких значений Γ_a .

Основываясь на результатах расчётов, представленных на Рисунке 4.3, мы отмечаем, что в чистом пределе нет разницы между s_{++} -состоянием и s_{\pm} -состоянием с $\langle \Lambda \rangle > 0$ в таких величинах как $\Delta \lambda_L$ и ρ_s .



Рисунок 4.4 — Температурная зависимость λ_L^{-2} для s_\pm -состояния с $\langle\Lambda\rangle<0.$ Γ_a и Tвыражены в единицах T_{c0}

4.3 Заключение

Здесь мы получили характерные особенности перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ в зависимости глубины проникновения как от температуры, так и от интенсивности рассеяния на примесях. Наблюдение этих особенностей может служить критерием обнаружения данного перехода. Первой особенностью является резкое изменение зависимости глубины проникновения λ_L от интенсивности рассеяния на примесях при $T \rightarrow 0$. Более того, наклон кривой как функции интенсивности рассеяния до перехода отличен от наклона после перехода, что является дополнительным индикатором смены s_{\pm} - на s_{++} -состояние. Вторая особенность связана с наклоном относительного изменения в глубине проникновения, $\Delta \lambda_L(T) = \lambda_L(T) - \lambda_L(0)$, как функции температуры — до перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ наклон возрастает, а после перехода — убывает.

Третья особенность заключается в резком скачке в обратном квадрате глубины проникновения как функции интенсивности рассеяния на примесях, $\lambda_L^{-2}(\Gamma_a)$, в точке перехода $s_{\pm} \to s_{++}$.

И, наконец, последней особенностью является температурная зависимость плотности сверхтекучей жидкости $\rho_s(T)$, которая проявляет почти однощелевое поведение вблизи перехода между s_{\pm} - и s_{++} -состояниями, и с увеличением интенсивности рассеяния на примесях восстанавливает двухщелевое поведение.

Результаты, представленные здесь, получены в промежуточном случае рассеяния на примесях, $\sigma = 0.5$. Изменение σ сменит точное положение перехода на фазовой диаграмме T- Γ_a , см. Рисунки 3.6 и 3.7. Сам переход, однако, сохраняется в широком диапазоне σ , за исключением унитарного предела ($\sigma = 1$) с неоднородным потенциалом примеси $\eta \neq 1$. Таким образом, описанные характерные особенности в глубине проникновения могут наблюдаться в системах проявляющих переход $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ в широком диапазоне параметров.
Выводы

Основные результаты работы заключаются в следующем.

- 1. Показано, что спин-резонансный пик в многозонном s_{\pm} -сверхпроводнике с двумя неравными щелями, Δ_L и Δ_S , возникает на частоте ниже $\Delta_{\text{eff}} = \Delta_L + \Delta_S$. В случае равных по величине щелей, $\Delta_L = \Delta_S = \Delta_0$, энергия Δ_{eff} совпадает с $2\Delta_0$. Проведённый анализ имеющихся экспериментальных данных позволяет утверждать, что в соединениях Ва-122 и Na-111, допированных кобальтом, наблюдаемый в неупругом рассеянии нейтронов пик является спин-резонансным. При наличии рассеяния на немагнитных примесях, учитываемого в простейшем приближении как статическая перенормировка собственно-энергетической части, с увеличением интенсивности рассеяния на примесях ширина спин резонансного пика увеличивается, а его высота уменьшается.
- 2. В двухзонной модели сверхпроводящих ферропниктидов в приближении *T*-матрицы исследован вызванный рассеянием на немагнитных примесях переход из s_±-состояния в s₊₊- состояние. Сверхпроводящие щели изменяются плавно в области перехода для широкого диапазона величин эффективного сечения примесного рассеяния σ и соотношения внутри- и межзонного потенциалов рассеяния η. Исключение составляет слабое рассеяние с малыми значениями σ вблизи борновского предела, а именно, σ < 0,12, когда малая щель меняет знак скачком. С увеличением температуры скачок сглаживается уже при *T* ~ 0,1*T*_{c0} и поэтому не изменяет гладкой зависимости критической температуры от интенсивности рассеяния на примесях Γ_a. В борновском пределе наличие внутризонной составляющей потенциала примеси не оказывает влияния на переход. Для σ ≠ 0 рост величины межзонного потенциала приводит к смещению точки рассматриваемого перехода к большим значениям Γ_a.
- 3. Показано, что точка перехода s_± → s₊₊ зависит от температуры и характеризуется двумя параметрами: критической интенсивностью рассеяния на примесях Γ_a^{crit} и критической температурой перехода из s_±- в s₊₊-состояние T^{crit} < T_c. При увеличении интенсивности рассеяния на примесях температура перехода смещается к критической температуре

 T_c . Построена фазовая диаграмма в координатах температура-беспорядок, отражающая поведение меняющей знак щели, $\Delta_b(T,\Gamma_a)$. На этой диаграмме имеется узкая полоса, в которой система из низкотемпературного s_{++} -состояния может вернуться в s_{\pm} -состояние при более высоких температурах.

- 4. Из подробного анализа температурной зависимости лондоновской глубины проникновения магнитного поля λ_L сделан вывод, что о наличии перехода $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ можно судить по следующей совокупности признаков:
 - а) резкое изменение в зависимости λ_L при увеличении интенсивности рассеяния на примесях при низких температурах $T \to 0$, что наблюдалось в эксперименте;
 - б) характер изменения наклона графиков $\Delta \lambda_L(T) = \lambda_L(T) \lambda_L(0)$ с введением примесей при низких температурах: до перехода наклон увеличивается, после убывает;
 - в) изменение характера температурной зависимости сверхпроводящей плотности ρ_s ~ 1/λ²_L, а именно смена двухщелевого поведения однощелевым, а затем возврат к двухщелевому поведению.

Благодарности

В первую очередь я хочу поблагодарить своего научного руководителя Максима Михайловича Коршунова за полезные обсуждения, помощь и, самое главное, поддержку на протяжении всего времени выполнения данной диссертационной работы.

Кроме того я хочу поблагодарить Сергея Геннадьевича Овчинникова полезные обсуждения и ценные наставления на финальном этапе подготовки диссертации, и Тимофеева Ивана Владимировича, чей неугасаемый интерес к науке вдохновляет на взятие новых высот в научной деятельности, за поддержку, а также за создание дружеской атмосферы в лаборатории Физики молекулярных систем.

Кроме того, выражаю благодарность своим соавторам: Ю. Н. Тогушовой, О. В. Долгову и Д. В. Ефремову.

Наконец, особую благодарность я выражаю своим близким, за то, что всегда поддерживали и верили в меня несмотря ни на что.

Список литературы

- Togushova, Y. N. Impurity-Induced Smearing of the Spin Resonance Peak in Fe-Based Superconductors [Текст] / Y. N. Togushova, V. A. Shestakov, M. M. Korshunov // Journal of Low Temperature Physics. — 2016. — Mar. — Vol. 185, issue 5/6. — P. 481.
- Korshunov, M. M. Spin resonance peak in Fe-based superconductors with unequal gaps [Tekct] / M. M. Korshunov, V. A. Shestakov, Y. N. Togushova // Phys. Rev. B. — 2016. — Sept. — Vol. 94, issue 9. — P. 094517.
- Korshunov, M. M. Comparison of experimental data on the spin resonance frequency and gap magnitudes in Fe-based superconductors [Текст] / M. M. Korshunov, V. A. Shestakov, Y. N. Togushova // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2017. Vol. 440. P. 133—135.
- Shestakov, V. A. Temperature-Dependent s_± ↔ s₊₊ Transitions in the Multiband Model for Fe-Based Superconductors with Impurities [Tekcr] / V. A. Shestakov, M. M. Korshunov, O. V. Dolgov // Symmetry. — 2018. — Vol. 10, no. 8. — P. 323.
- Details of the disorder-induced transition between s_± and s₊₊ states in the two-band model for Fe-based superconductors [Teκcτ] / V. A. Shestakov [et al.] // Superconductor Science and Technology. 2018. Vol. 31, no. 3. P. 034001.
- 6. Shestakov, V. Influence of temperature on the impurity-induced $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ transition in the two-band model for Fe-based superconductors [Tekct] / V. Shestakov, M. M. Korshunov // Journal of Physics Conference Series. — 2019. — Vol. 1389. — P. 012065.
- 7. Decisive proofs of the $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ transition in the temperature dependence of the magnetic penetration depth [Tekct] / V. A. Shestakov [et al.] // Superconductor Science and Technology. — 2021. — May. — Vol. 34. — P. 075008.
- 8. Шестаков, В. А. Исследование спин-резонансного пика в сверхпроводящем состоянии пниктидов железа [Текст] / В. А. Шестаков,

М. М. Коршунов // «Проспект Свободный – 2015»: Материалы научной конференции. — 2015.

- Шестаков, В. А. Исследование спин-резонансного пика в сверхпроводящем состоянии пниктидов железа в четырёхзонной модели с неэквивалентными щелями [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // «Проспект Свободный – 2016»: Материалы научной конференции. — 2016.
- Шестаков, В. А. Влияние примесного рассеяния на спин-резонансный пик в соединениях железа [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // XI Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур «ОКНО-2016». — 2016.
- Korshunov, M. M. Spin-resonance peak in iron-based superconductors as a probe of gap symmetry [Tekct] / M. M. Korshunov, V. A. Shestakov, Y. N. Togushova // VI Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism" EASTMAG-2016. — 2016.
- Korshunov, M. M. Spin-resonance peak in inelastic neutron scattering as a probe of gap symmetry in Fe-based superconductors [Текст] / М. М. Коrshunov, Y. N. Togushova, V. A. Shestakov // Spectroscopies in Novel Superconductors. — 2016.
- Шестаков, В. А. Влияние примесного рассеяния на спин-резонансный пик в двухзонной модели пниктидов железа [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // Конкурс-конференция молодых учёных, аспирантов и студентов ФИЦ КНЦ СО РАН – 2017. Секция «Физика». — 2017.
- Korshunov, M. M. Spin resonance peak in Fe-based superconductors with unequal gaps [Текст] / М. М. Korshunov, V. A. Shestakov, Y. N. Togushova // APS March Meeting 2017. — 2017.
- Тогушова, Ю. Н. Магнитная восприимчивость сверхпроводников на основе железа [Текст] / Ю. Н. Тогушова, В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // Заседание секции "Магнетизм" Научного совета РАН по физике конденсированных сред. — 2018.
- Korshunov, M. M. Spin resonance peak in the superconducting state of iron pnictides and chalcogenides [Tekct] / M. M. Korshunov, V. A. Shestakov, Y. N. Togushova // The 21st International Conference on Solid Compounds of Transition Elements. — 2019.

- 17. Шестаков, В. А. Исследование вызванного рассеянием на немагнитных примесях перехода из s_± в s₊₊ [Teкст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // Конкурс-конференция молодых учёных, аспирантов и студентов ФИЦ КНЦ СО РАН – 2018. Секция «Физика». — 2018.
- Шестаков, В. А. Исследование спин-резонансного пика в сверхпроводящем состоянии пниктидов железа при наличии неравных сверхпроводящих щелей и присутствии немагнитных примесей [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // Коуровка – XXXVII. – 2018.
- Шестаков, В. А. Исследование сверхпроводящего параметра порядка в двухзонной модели сверхпроводящих соединений железа вблизи перехода из s_± в s₊₊ состояние в результате рассеяния на немагнитных примесях [Teкст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // «Проспект Свободный – 2018»: Материалы научной конференции. — 2018.
- 20. Шестаков, В. А. Зависящие от температуры переходы между s_± и s₊₊ состояниями в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // Конкурс-конференция ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых ученых, аспирантов и студентов. Секция «Физика». 2019.
- 21. Шестаков, В. А. Зависящие от температуры переходы между s_± и s₊₊ состояниями в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // XXII Конференция молодых ученых ФИЦ КНЦ СО РАН. 2019.
- 22. Korshunov, M. M. Influence of temperature on the impurity-induced $s_{\pm} \rightarrow s_{++}$ transition in the multiband model of Fe-based superconductors [Tekct] / M. M. Korshunov, V. A. Shestakov // VII Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism" EASTMAG-2019. 2019.
- Korshunov, M. M. Magnetic interactions, superconductivity, and spin-resonance peak in iron-based materials [Tekct] / M. M. Korshunov,
 V. A. Shestakov // VII Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism" EASTMAG-2019. — 2019.
- Шестаков, В. А. Температурно-зависимые переходы между s_± и s₊₊ состояниями в сверхпроводниках на основе железа [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // «Проспект Свободный – 2019»: Материалы научной конференции. — 2019.

- Шестаков, В. А. Немагнитные примеси в сверхпроводниках на основе железа [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // Коуровка XXXVIII. 2020.
- 26. Шестаков, В. А. Лондоновская глубина проникновения в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями [Tekct] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // Конкурс-конференция ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых ученых, аспирантов и студентов. Секция "Физика". 2020.
- 27. Шестаков, В. А. Лондоновская глубина проникновения в двухзонной модели сверхпроводников на основе железа с немагнитными примесями [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // ХХІІІ Конференция молодых ученых ФИЦ КНЦ СО РАН, Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН. 2020.
- Шестаков, В. А. Лондоновская глубина проникновения в сверхпроводниках на основе железа при наличии немагнитных примесей [Текст] /
 В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // «Проспект Свободный 2020»: Материалы научной конференции. 2020.
- 29. Шестаков, В. А. Влияние рассеяния на немагнитных примесях на лондоновскую глубину проникновения в сверхпроводящих соединениях железа [Текст] / В. А. Шестаков, М. М. Коршунов // XIII Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур «OKHO-2021». — 2021.
- Bardeen, J. Theory of Superconductivity [Текст] / J. Bardeen, L. N. Cooper,
 J. R. Schrieffer // Phys. Rev. 1957. Dec. Vol. 108, issue 5. —
 P. 1175—1204.
- Mazin, I. I. Superconductivity gets an iron boost [Текст] / I. I. Mazin // Nature. — 2010. — Маг. — Vol. 464, no. 7286. — Р. 183—186.
- Sadovskii, M. V. High-temperature superconductivity in iron-based layered compounds [Tekct] / M. V. Sadovskii // Phys. Usp. — 2008. — Vol. 51, no. 12. — P. 1201—1227.
- Hirschfeld, P. J. Gap symmetry and structure of Fe-based superconductors [Текст] / Р. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, I. I. Mazin // Reports on Progress in Physics. — 2011. — Vol. 74, no. 12. — Р. 124508.

- 34. From d-wave to s-wave pairing in the iron-pnictide superconductor (Ba,K)Fe
 2 As 2 [Текст] / J.-P. Reid [et al.] // Superconductor Science and Technology. — 2012. — Vol. 25, no. 8. — Р. 084013.
- 35. Hosono, H. Iron-based superconductors: Current status of materials and pairing mechanism [Tekct] / H. Hosono, K. Kuroki // Physica C: Superconductivity and its Applications. — 2015. — Vol. 514, Supplement C. — P. 399—422 ; — Superconducting Materials: Conventional, Unconventional and Undetermined.
- Hirschfeld, P. J. Using gap symmetry and structure to reveal the pairing mechanism in Fe-based superconductors [Tekct] / P. J. Hirschfeld // Comptes Rendus Physique. — 2016. — Vol. 17, no. 1/2. — P. 197—231.
- 37. Observation of Fermi-surface dependent nodeless superconducting gaps in Ba0.6K0.4Fe2As2 [Текст] / H. Ding [et al.] // EPL (Europhysics Letters). — 2008. — Vol. 83, no. 4. — Р. 47001.
- 38. Fe-based superconductors: an angle-resolved photoemission spectroscopy perspective [Tekct] / P. Richard [et al.] // Reports on Progress in Physics. — 2011. — Vol. 74, no. 12. — P. 124512.
- Kordyuk, A. A. Iron-based superconductors: Magnetism, superconductivity, and electronic structure (Review Article) [Текст] / А. А. Kordyuk // Low Temperature Physics. — 2012. — Vol. 38, no. 9. — Р. 888—899.
- 40. Angle-resolved photoemission spectroscopy study on iron-based superconductors [Tekct] / Y. Zi-Rong [et al.] // Chinese Physics B. 2013. Vol. 22, no. 8. P. 087407.
- 41. Kordyuk, A. A. Pseudogap from ARPES experiment: Three gaps in cuprates and topological superconductivity (Review Article) [Текст] / А. А. Ко-rdyuk // Low Temperature Physics. 2015. Vol. 41, no. 5. Р. 319—341.
- 42. Stewart, G. R. Superconductivity in iron compounds [Текст] / G. R. Stewart // Rev. Mod. Phys. — 2011. — Dec. — Vol. 83, issue 4. — P. 1589—1652.

- 43. Band- and momentum-dependent electron dynamics in superconducting Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂ as seen via electronic Raman scattering [Текст] / B. Muschler [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. Nov. Vol. 80, issue 18. P. 180510.
- 44. Canfield, P. C. FeAs-Based Superconductivity: A Case Study of the Effects of Transition Metal Doping on BaFe2As2 [Tekct] / P. C. Canfield, S. L. Bud'ko // Annual Review of Condensed Matter Physics. 2010. Vol. 1, no. 1. P. 27—50.
- 45. Anisotropic quasiparticle lifetimes in Fe-based superconductors [Текст] / A. F. Kemper [et al.] // Phys. Rev. B. 2011. May. Vol. 83, no. 18. Р. 184516.
- 46. Lumsden, M. D. Magnetism in Fe-based superconductors [Текст] / M. D. Lumsden, A. D. Christianson // Journal of Physics: Condensed Matter. 2010. Vol. 22, no. 20. P. 203203.
- 47. Fisher, I. R. In-plane electronic anisotropy of underdoped '122' Fe-arsenide superconductors revealed by measurements of detwinned single crystals [Tekct] / I. R. Fisher, L. Degiorgi, Z. X. Shen // Reports on Progress in Physics. 2011. Vol. 74, no. 12. P. 124506.
- Dai, P. Antiferromagnetic order and spin dynamics in iron-based superconductors [Текст] / P. Dai // Rev. Mod. Phys. — 2015. — Aug. — Vol. 87, issue 3. — P. 855—896.
- Inosov, D. S. Spin fluctuations in iron pnictides and chalcogenides: From antiferromagnetism to superconductivity [Текст] / D. S. Inosov // Comptes Rendus Physique. — 2016. — Vol. 17, no. 1/2. — P. 60—89.
- 50. The effect of exceptionally high fluorine doping on the anisotropy of single crystalline SmFeAsO_{1-x}F_x [Teкct] / M. Fujioka [et al.] // Applied Physics Letters. 2014. Vol. 105, no. 10. P. -.
- 51. Interface-Induced High-Temperature Superconductivity in Single Unit-Cell FeSe Films on SrTiO₃ [Текст] / W. Qing-Yan [et al.] // Chinese Physics Letters. — 2012. — Vol. 29, no. 3. — P. 037402.
- 52. Electronic origin of high-temperature superconductivity in single-layer FeSe superconductor [Текст] / D. Liu [et al.] // Nat. Commun. 2012. July. Vol. 3. Р. 931.

- 53. Phase diagram and electronic indication of high-temperature superconductivity at 65K in single-layer FeSe films [Teкст] / S. He [et al.] // Nat Mater. — 2013. — July. — Vol. 12, no. 7. — P. 605—610.
- 54. Interface-induced superconductivity and strain-dependent spin density waves in FeSe/SrTiO3 thin films [Текст] / S. Tan [et al.] // Nat Mater. — 2013. — July. — Vol. 12, no. 7. — P. 634—640.
- 55. Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO3 [Текст] / J.-F. Ge [et al.] // Nat Mater. 2015. Mar. Vol. 14, no. 3. Р. 285—289.
- 56. Evidence of nodal superconductivity in LaFeSiH [Текст] / A. Bhattacharyya [et al.] // Phys. Rev. B. — 2020. — June. — Vol. 101, issue 22. — P. 224502.
- 57. Iron-based superconductivity extended to the novel silicide LaFeSiH [Текст] / F. Bernardini [et al.] // Phys. Rev. B. — 2018. — Mar. — Vol. 97, issue 10. — P. 100504.
- 58. Nekrasov, I. A. Electronic structure of prototype AFe₂As₂ and ReOFeAs high-temperature superconductors: a comparison [Teкст] / I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, M. V. Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 88, вып. 2. С. 155—160.
- 59. Nekrasov, I. A. Electronic Structure of New LiFeAs High-T_c Superconductor [Текст] / I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, M. V. Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 88, вып. 8. С. 621—623.
- 60. Jishi, R. A. Electronic and Lattice Dynamical Properties of the Iron-Based Superconductors LiFeAs and NaFeAs [Текст] / R. A. Jishi, H. M. Alyahyaei // Advances in Condensed Matter Physics. — 2010. — Vol. 2010.
- Density functional study of FeS, FeSe, and FeTe: Electronic structure, magnetism, phonons, and superconductivity [Tekct] / A. Subedi [et al.] // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78, issue 13. — P. 134514.
- Orbital-Dependent Modifications of Electronic Structure across the Magnetostructural Transition in BaFe₂As₂ [Tekcr] / T. Shimojima [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Vol. 104, issue 5. — P. 057002.

- 63. Distinct Fermi Surface Topology and Nodeless Superconducting Gap in a (Tl_{0.58}Rb_{0.42})Fe_{1.72}Se₂ Superconductor [Teкст] / D. Mou [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106, issue 10. P. 107001.
- 64. LiFeAs: An intrinsic FeAs-based superconductor with $T_c = 18K$ [Tekct] / J. H. Tapp [et al.] // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78, issue 6. P. 060505.
- 65. The superconductivity at 18 K in LiFeAs system [Текст] / X. C. Wang [et al.] // Solid State Communications. — 2008. — Vol. 148, no. 11/12. — P. 538—540.
- 66. Structure and superconductivity of LiFeAs [Текст] / М. J. Pitcher [et al.] // Chem. Commun. — 2008. — Issue 45. — Р. 5918—5920.
- 67. Enhanced superfluid stiffness, lowered superconducting transition temperature, and field-induced magnetic state of the pnictide superconductor LiFeAs [Tekct] / F. L. Pratt [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79, issue 5. P. 052508.
- Structure, antiferromagnetism and superconductivity of the layered iron arsenide NaFeAs [Tekct] / D. R. Parker [et al.] // Chem. Commun. — 2009. — Issue 16. — P. 2189—2191.
- 69. Multiple Phase Transitions in Single-Crystalline Na_{1-δ}FeAs [Текст] / G. F. Chen [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102, issue 22. P. 227004.
- 70. New-Structure-Type Fe-Based Superconductors: CaAFe₄As₄ (A = K, Rb, Cs) and SrAFe₄As₄ (A = Rb, Cs) [Teкст] / A. Iyo [et al.] // J. Am. Chem. Soc. 2016. Mar. Vol. 138, issue 10. P. 3410.
- 71. Magnetic characterization of undoped and 15%F-doped LaFeAsO and SmFeAsO compounds [Текст] / М. R. Cimberle [et al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2009. — Vol. 321, no. 19. — P. 3024—3030.
- 72. Coexistence of Competing Antiferromagnetic and Superconducting Phases in the Underdoped Ba(Fe_{0.953}Co_{0.047})₂As₂ Compound Using X-ray and Neutron Scattering Techniques [Tekct] / D. K. Pratt [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 103, issue 8. P. 087001.

- 73. Hall Effect and Resistivity Study of the Magnetic Transition, Carrier Content, and Fermi-Liquid Behavior in $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ [Tekct] / F. Rullier-Albenque [et al.]. — 2009. — July.
- 74. Atomic coexistence of superconductivity and incommensurate magnetic order in the pnictide Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂ [Текст] / Y. Laplace [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 80, issue 14. P. 140501.
- 75. Овчинников, С. Г. Квазичастицы в сильно коррелированной электронной системе оксидов меди [Текст] / С. Г. Овчинников // Успехи физических наук. 1997. Т. 167, № 10. С. 1043—1068.
- Magnetic pair-breaking effects: Moment formation and critical doping level in superconducting La_{1.85}Sr_{0.15}Cu_{1-x}A_xO₄ systems (A =Fe,Co,Ni,Zn,Ga,Al) [Teкст] / G. Xiao [et al.] // Phys. Rev. B. 1990. Nov. Vol. 42, issue 13. P. 8752—8755.
- 77. Magnetic order close to superconductivity in the iron-based layered $LaO_{1-x}F_xFeAs$ systems [Tekct] / C. de la Cruz [et al.] // Nature. 2008. June. Vol. 453, no. 7197. P. 899—902.
- 78. Commensurate Spin Density Wave in LaFeAsO: A Local Probe Study [Tekct] / H.-H. Klauss [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2008. Aug. Vol. 101, no. 7. P. 077005.
- 79. Competing orders and spin-density-wave instability in La(O_{1-x}F_x)FeAs [Teкст] / J. Dong [et al.] // EPL (Europhysics Letters). 2008. Vol. 83, no. 2. Р. 27006.
- Electronic correlations in the iron pnictides [Текст] / М. М. Qazilbash [et al.] // Nat. Phys. — 2009. — Vol. 5, issue 9. — Р. 647—650.
- 81. ⁷⁵As NMR Studies of Superconducting LaFeAsO_{0.9} $F_{0.1}$ [Tekct] / H.-J. Grafe [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2008. July. Vol. 101, issue 4. P. 047003.
- 82. Anisotropic spin fluctuations and multiple superconducting gaps in holedoped Ba_{0.72}K_{0.28}Fe₂As₂: NMR in a single crystal [Текст] / K. Matano [et al.] // EPL (Europhysics Letters). — 2009. — Vol. 87, no. 2. — P. 27012.
- ⁷⁵As nuclear magnetic resonance study of antiferromagnetic fluctuations in the normal state of LiFeAs [Tekct] / P. Jeglič [et al.] // Phys. Rev. B. 2010. Apr. Vol. 81, issue 14. P. 140511.

- 84. Коршунов, М. М. Сверхпроводящее состояние в соединениях железа и спин-флуктуационная теория спаривания [Текст] / М. М. Коршунов // Успехи физических наук. — 2014. — Т. 184, № 8. — С. 882—888.
- 85. Kontani, H. Orbital-Fluctuation-Mediated Superconductivity in Iron Pnictides: Analysis of the Five-Orbital Hubbard-Holstein Model [Tekct] / H. Kontani, S. Onari // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Apr. — Vol. 104, issue 15. — P. 157001.
- Onari, S. Self-consistent Vertex Correction Analysis for Iron-based Superconductors: Mechanism of Coulomb Interaction-Driven Orbital Fluctuations [Tekct] / S. Onari, H. Kontani // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Sept. — Vol. 109, issue 13. — P. 137001.
- 87. Yamakawa, Y. Superconductivity without a hole pocket in electron-doped FeSe: Analysis beyond the Migdal-Eliashberg formalism [Tekct] / Y. Yamakawa, H. Kontani // Phys. Rev. B. — 2017. — July. — Vol. 96, issue 4. — P. 045130.
- 88. Maier, T. A. Theory of neutron scattering as a probe of the superconducting gap in the iron pnictides [Tekct] / T. A. Maier, D. J. Scalapino // Phys. Rev. B. 2008. July. Vol. 78, issue 2. P. 020514.
- Korshunov, M. M. Theory of magnetic excitations in iron-based layered superconductors [Tekct] / M. M. Korshunov, I. Eremin // Phys. Rev. B. 2008. Oct. Vol. 78, issue 14. P. 140509.
- 90. Phonon Density of States of LaFeAsO_{1-x} F_x [Tekct] / A. D. Christianson [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2008. Oct. Vol. 101, issue 15. P. 157004.
- 91. Normal-state spin dynamics and temperature-dependent spin-resonance energy in optimally doped BaFe_{1.85}Co_{0.15}As₂ [Tekct] / D. S. Inosov [et al.] // Nat. Phys. 2010. Mar. Vol. 6, no. 3. P. 178—181.
- 92. Multiple gaps in SmFeAsO 0.9 F 0.1 revealed by point-contact spectroscopy [Текст] / Y.-L. Wang [et al.] // Superconductor Science and Technology. — 2009. — Vol. 22, no. 1. — Р. 015018.

- 93. Point-contact Andreev-reflection spectroscopy in ReFeAsO1-xFx (Re = La, Sm): Possible evidence for two nodeless gaps [Текст] / R. Gonnelli [et al.] // Physica C: Superconductivity. 2009. Vol. 469, no. 9—12. P. 512—520 ; Superconductivity in Iron-Pnictides.
- 94. Evidence for two-gap superconductivity in Ba_{0.55}K_{0.45}Fe₂As₂ from directional point-contact Andreev-reflection spectroscopy [Текст] / P. Szabó [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. Jan. Vol. 79, issue 1. P. 012503.
- 95. Probing the order parameter of superconducting LiFeAs using Pb/LiFeAs and Au/LiFeAs point-contact spectroscopy [Tekct] / X. Zhang [et al.] // Phys. Rev. B. 2012. Mar. Vol. 85, issue 9. P. 094521.
- 96. Systematic ⁷⁵As NMR study of the dependence of low-lying excitations on F doping in the iron oxypnictide LaFeAsO_{1-x}F_x [Текст] / Y. Nakai [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. June. Vol. 79, issue 21. P. 212506.
- 97. 75As NMR Study of Hole-Doped Superconductor Ba1-xFxFe2As2 (Tc≃38 K)
 [Текст] / Н. Fukazawa [et al.] // Journal of the Physical Society of Japan. 2009. Vol. 78, no. 3. Р. 033704.
- 98. Effects of disorder induced by heavy-ion irradiation on (Ba_{1-x}K_x)Fe₂As₂ single crystals, within the three-band Eliashberg s± wave model [Текст] / G. Ghigo [et al.] // Scientific Reports. 2017. Vol. 7, no. 1. Р. 13029.
- 99. Penetration depth of $\mathbf{Ba}_{1-x}\mathbf{K}_x\mathbf{Fe}_2\mathbf{As}_2$ single crystals explained within a multiband Eliashberg $s \pm$ approach [Tekct] / G. Ghigo [et al.] // Phys. Rev. B. 2017. July. Vol. 96, issue 1. P. 014501.
- 100. Robust s_{\pm} pairing in CaK(Fe_{1-x}Ni_x)₄As₄ (x = 0 and 0.05) from the response to electron irradiation [Tekct] / S. Teknowijoyo [et al.] // Phys. Rev. B. — 2018. — Apr. — Vol. 97, issue 14. — P. 140508.
- 101. Exotic *d*-Wave Superconducting State of Strongly Hole-Doped $K_x Ba_{1-x} Fe_2 As_2$ [Tekct] / R. Thomale [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2011. — Sept. — Vol. 107, issue 11. — P. 117001.
- 102. Maiti, S. Gap symmetry in KFe₂As₂ and the cos4θ gap component in LiFeAs
 [Teκcτ] / S. Maiti, M. M. Korshunov, A. V. Chubukov // Phys. Rev. B. —
 2012. Jan. Vol. 85, issue 1. P. 014511.

- 103. Disorder-induced transition between s_{\pm} and s_{++} states in two-band superconductors [Tekct] / D. V. Efremov [et al.] // Phys. Rev. B. 2011. Nov. Vol. 84, issue 18. P. 180512.
- 104. Castellani, C. Magnetic structure of V₂O₃ in the insulating phase [Текст] / C. Castellani, C. R. Natoli, J. Ranninger // Phys. Rev. B. 1978. Nov. Vol. 18, issue 9. Р. 4945—4966.
- 105. Oleś, A. M. Antiferromagnetism and correlation of electrons in transition metals [Текст] / A. M. Oleś // Phys. Rev. B. — 1983. — July. — Vol. 28, issue 1. — P. 327—339.
- 106. Berk, N. F. Effect of Ferromagnetic Spin Correlations on Superconductivity [Текст] / N. F. Berk, J. R. Schrieffer // Phys. Rev. Lett. — 1966. — Aug. — Vol. 17, issue 8. — P. 433—435.
- 107. Korshunov, M. M. Impurities in multiband superconductors [Текст] / M. M. Korshunov, Y. N. Togushova, O. V. Dolgov // Physics-Uspekhi. 2016. Vol. 59, no. 12. Р. 1211.
- 108. Allen, P. B. Theory of superconducting T_c [Текст] / P. B. Allen, B. Mitrovic // Solid State Physics: Advances in Research and Applications. Vol. 37 / ed. by H. Erenreich, F. Zeitz, D. Turnbull. — New York : Academic, 1982. — P. 1—92.
- 109. Extended s_{\pm} scenario for the nuclear spin-lattice relaxation rate in superconducting pnictides [Tekct] / D. Parker [et al.] // Phys. Rev. B. 2008. Oct. Vol. 78, issue 13. P. 134524.
- 110. Specific Heat Measurements of Ba_{0.68}K_{0.32}Fe₂As₂ Single Crystals: Evidence for a Multiband Strong-Coupling Superconducting State [Текст] / P. Popovich [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2010. July. Vol. 105, issue 2. P. 027003.
- 111. Eliashberg approach to infrared anomalies induced by the superconducting state of Ba_{0.68}K_{0.32}Fe₂As₂ single crystals [Teкct] / A. Charnukha [et al.] // Phys. Rev. B. 2011. Nov. Vol. 84, issue 17. P. 174511.
- 112. Lifting of nodes by disorder in extended- s -state superconductors: Application to ferropnictides [Текст] / V. Mishra [et al.] // Phys. Rev. B. — 2009. — Mar. — Vol. 79, no. 9. — Р. 094512.

- 113. Anderson, P. Theory of dirty superconductors [Текст] / P. Anderson // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1959. Vol. 11, no. 1. P. 26—30.
- 114. Morosov, A. I. Static impurities in a highly anisotropic superconductor [Текст] / А. I. Morosov // Fiz. Tverd. Tela. — 1979. — Vol. 21, no. 12. — P. 3598—3600.
- 115. Onari, S. Violation of Anderson's Theorem for the Sign-Reversing s-Wave State of Iron-Pnictide Superconductors [Текст] / S. Onari, H. Kontani // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Oct. — Vol. 103, issue 17. — P. 177001.
- 116. Golubov, A. A. Effect of magnetic and nonmagnetic impurities on highly anisotropic superconductivity [Tekct] / A. A. Golubov, I. I. Mazin // Phys. Rev. B. — 1997. — June. — Vol. 55, issue 22. — P. 15146—15152.
- 117. Abrikosov, A. A. Contributon to the theory of supercondicting alloys with paramagnetic impurities [Tekct] / A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov // Sov. Phys. JETP. 1961. Vol. 12, no. 6. P. 1243—1253 ; J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) 39, 1781 (1960).
- 118. Neutron-irradiation effects in polycrystalline LaFeAsO_{0.9}F_{0.1} superconductors [Текст] / А. Е. Karkin [et al.] // Phys. Rev. B. — 2009. — Nov. — Vol. 80, issue 17. — P. 174512.
- 119. Contrasting impurity scattering and pair-breaking effects by doping Mn and Zn in Ba_{0.5}K_{0.5}Fe₂As₂ [Текст] / P. Cheng [et al.] // Phys. Rev. B. — 2010. — May. — Vol. 81, issue 17. — P. 174529.
- 120. Effect of a Zn impurity on T_c and its implications for pairing symmetry in LaFeAsO_{1-x}F_x [Tekct] / Y. Li [et al.] // New Journal of Physics. 2012. Vol. 12, no. 8. P. 083008.
- 121. Suppression of the critical temperature of superconducting Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂ by point defects from proton irradiation [Текст] / Y. Nakajima [et al.] // Phys. Rev. B. 2010. Dec. Vol. 82, issue 22. P. 220504.
- 122. Effect of Electron Irradiation on Superconductivity in Single Crystals of $Ba(Fe_{1-x}Ru_x)_2As_2$ (x = 0.24) [Tekct] / R. Prozorov [et al.] // Phys. Rev. X. 2014. Nov. Vol. 4, issue 4. P. 041032.

- 123. Zn-impurity effect and interplay of s_{\pm} and s_{++} pairings in iron-based superconductors [Tekct] / Z.-J. Yao [et al.] // Phys. Rev. B. — 2012. — Nov. — Vol. 86, issue 18. — P. 184515.
- 124. Disorder effects in multiorbital s_{\pm} -wave superconductors: Implications for Zn-doped BaFe₂As₂ compounds [Tekct] / H. Chen [et al.] // Phys. Rev. B. 2013. Nov. Vol. 88, issue 18. P. 184509.
- 125. Коршунов, М. М. Примеси в многозонных сверхпроводниках [Текст] / М. М. Коршунов, Ю. Н. Тогушова, О. В. Долгов // Успехи физических наук. — 2016. — Т. 186, № 12. — С. 1315—1347.
- 126. Transition from Sign-Reversed to Sign-Preserved Cooper-Pairing Symmetry in Sulfur-Doped Iron Selenide Superconductors [Текст] / Q. Wang [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2016. — May. — Vol. 116, issue 19. — P. 197004.
- 127. Tracing the s_± symmetry in iron pnictides by controlled disorder [Текст] / M. B. Schilling [et al.] // Phys. Rev. B. 2016. May. Vol. 93, issue 17. P. 174515.
- 128. Disorder-Driven Transition from s_± to s₊₊ Superconducting Order Parameter in Proton Irradiated Ba(Fe_{1-x}Rh_x)₂As₂ Single Crystals [Текст] / G. Ghigo [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2018. Sept. Vol. 121, issue 10. P. 107001.
- 129. Mattuk, R. D. A guide to Feynman diagrams in the many-body problem [Текст] / R. D. Mattuk. New York : Dover Publications, Inc., 1992. 441 р.
- 130. Unconventional superconductivity in Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ from inelastic neutron scattering [Tekct] / A. D. Christianson [et al.] // Nature. 2008. Dec. Vol. 456, no. 7224. P. 930—932.
- 131. Argyriou, D. N. Incommensurate itinerant antiferromagnetic excitations and spin resonance in the FeTe_{0.6}Se_{0.4} superconductor [Tekct] / D. N. Argyriou [et al.] // Phys. Rev. B. — 2010. — June. — Vol. 81, no. 22. — P. 220503.
- 132. Lumsden, M. D. Magnetism in Fe-based superconductors [Текст] / M. D. Lumsden, A. D. Christianson // Journal of Physics: Condensed Matter. 2010. Vol. 22, no. 20. P. 203203.

- 133. Neutron scattering resonance and the iron-pnictide superconducting gap [Текст] / Т. А. Maier [et al.] // Phys. Rev. B. — 2009. — Apr. — Vol. 79, issue 13. — Р. 134520.
- 134. Evidence for two-gap nodeless superconductivity in SmFeAsO_{1-x}F_x from point-contact Andreev-reflection spectroscopy [Tekct] / D. Daghero [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. Aug. Vol. 80, issue 6. P. 060502.
- 135. Multigap Superconductivity and Strong Electron-Boson Coupling in Fe-Based Superconductors: A Point-Contact Andreev-Reflection Study of Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂ Single Crystals [Teкст] / M. Tortello [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Dec. — Vol. 105, issue 23. — P. 237002.
- 136. Multiple Andreev Reflections Spectroscopy of Two-Gap 1111- and 11 Fe-Based Superconductors [Текст] / Y. G. Ponomarev [и др.] // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2013. — Сент. — Т. 26, № 9. — C. 2867—2871.
- 137. Lower critical field and SNS-Andreev spectroscopy of 122-arsenides: Evidence of nodeless superconducting gap [Tekct] / M. Abdel-Hafiez [et al.] // Phys. Rev. B. 2014. Aug. Vol. 90, issue 5. P. 054524.
- 138. Estimation of Intraband and Interband Relative Coupling Constants from Temperature Dependences of the Order Parameter for Two-Gap Superconductors [Tekcr] / S. A. Kuzmichev [et al.] // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2016. — Apr. — Vol. 29, no. 4. — P. 1111—1116.
- 139. Investigation of LiFeAs by means of "break-junction" technique [Текст] / S. A. Kuzmichev [et al.] // JETP Letters. 2012. July. Vol. 95, no. 10. Р. 537—543.
- 140. Multiple andreev reflections spectroscopy of superconducting LiFeAs single crystals: Anisotropy and temperature behavior of the order parameters [Текст] / S. A. Kuzmichev [et al.] // JETP Letters. 2014. Feb. Vol. 98, no. 11. P. 722—730.
- 141. Momentum dependence of the superconducting gap in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ [Tekct] / D. V. Evtushinsky [et al.] // Phys. Rev. B. — 2009. — Feb. — Vol. 79, issue 5. — P. 054517.

- 142. Onari, S. Structure of neutron-scattering peaks in both s₊₊-wave and s_±-wave states of an iron pnictide superconductor [Tekct] / S. Onari, H. Kontani, M. Sato // Phys. Rev. B. 2010. Feb. Vol. 81, issue 6. P. 060504.
- 143. Onari, S. Neutron inelastic scattering peak by dissipationless mechanism in the s₊₊-wave state in iron-based superconductors [Текст] / S. Onari, H. Kontani // Phys. Rev. B. — 2011. — Oct. — Vol. 84, issue 14. — P. 144518.
- 144. Momentum dependence of superconducting gap, strong-coupling dispersion kink, and tightly bound Cooper pairs in the high- T_c (Sr,Ba)_{1-x}(K,Na)_xFe₂As₂ superconductors [Tekct] / L. Wray [et al.] // Phys. Rev. B. 2008. Nov. Vol. 78, issue 18. P. 184508.
- 145. Superconductivity without Nesting in LiFeAs [Текст] / S. V. Borisenko [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Aug. — Vol. 105, issue 6. — P. 067002.
- 146. One-Sign Order Parameter in Iron Based Superconductor [Текст] / S. V. Borisenko [et al.] // Symmetry. — 2012. — Vol. 4, no. 1. — P. 251—264.
- 147. Unconventional Anisotropic s-Wave Superconducting Gaps of the LiFeAs Iron-Pnictide Superconductor [Текст] / К. Umezawa [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Jan. — Vol. 108, issue 3. — Р. 037002.
- 148. Fermi surface nesting induced strong pairing in iron-based superconductors [Tekct] / K. Terashima [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2009. — Vol. 106, no. 18. — P. 7330—7333.
- 149. High-resolution ARPES study of electron-doped Fe-based superconductor BaFe1.85Co0.15As2 [Tekct] / T. Kawahara [et al.] // Physica C: Superconductivity and its Applications. — 2010. — Vol. 470. — S440—S442.
- 150. Experimental elucidation of the origin of the 'double spin resonances' in $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ [Tekct] / M. Wang [et al.] // Phys. Rev. B. 2016. May. Vol. 93, issue 20. P. 205149.
- 151. Symmetry of spin excitation spectra in the tetragonal paramagnetic and superconducting phases of 122-ferropnictides [Tekct] / J. T. Park [et al.] // Phys. Rev. B. 2010. Oct. Vol. 82, issue 13. P. 134503.
- 152. Two-dimensional resonant magnetic excitation in BaFe_{1.84}Co_{0.16}As₂ [Текст] / M. D. Lumsden [et al.]. 2009. Маг.

- 153. Nanoscale superconducting-gap variations and lack of phase separation in optimally doped BaFe_{1.86}Co_{0.14}As₂ [Teкст] / F. Massee [et al.] // Phys. Rev. B. 2009. June. Vol. 79, issue 22. P. 220517.
- 154. Effect of Fermi Surface Nesting on Resonant Spin Excitations in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ [Tekct] / J.-P. Castellan [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2011. Oct. Vol. 107, issue 17. P. 177003.
- 155. Evidence of a Spin Resonance Mode in the Iron-Based Superconductor Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ from Scanning Tunneling Spectroscopy [Текст] / L. Shan [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2012. — May. — Vol. 108, issue 22. — P. 227002.
- 156. Out-of-Plane Momentum and Symmetry-Dependent Energy Gap of the Pnictide Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ Superconductor Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy [Tekct] / Y. Zhang [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Sept. — Vol. 105, issue 11. — P. 117003.
- 157. Orbital-Independent Superconducting Gaps in Iron Pnictides [Текст] / Т. Shimojima [et al.] // Science. — 2011. — Vol. 332, no. 6029. — Р. 564—567.
- 158. Multiple Nodeless Superconducting Gaps in (Ba0.6K0.4)Fe2As2 Superconductor from Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy [Текст] / L. Zhao [et al.] // Chinese Physics Letters. 2008. Vol. 25, no. 12. P. 4402.
- 159. Evidence for Two Energy Gaps in Superconducting Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ Single Crystals and the Breakdown of the Uemura Plot [Tekct] / C. Ren [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2008. Dec. Vol. 101, issue 25. P. 257006.
- 160. Momentum-resolved superconducting gap in the bulk of Ba1-xKxFe2As2 from combined ARPES and μSR measurements [Teκcτ] / D. V. Evtushinsky [et al.] // New Journal of Physics. — 2009. — Vol. 11, no. 5. — P. 055069.
- 161. Strong interplay between stripe spin fluctuations, nematicity and superconductivity in FeSe [Tekct] / Q. Wang [et al.] // Nat Mater. 2016. Feb. Vol. 15, no. 2. P. 159—163 ; Letter.
- 162. Field-induced superconducting phase of FeSe in the BCS-BEC cross-over [Tekct] / S. Kasahara [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2014. — Vol. 111, no. 46. — P. 16309—16313.

- 163. Unusual Relationship between Magnetism and Superconductivity in FeTe_{0.5}Se_{0.5} [Tekct] / H. A. Mook [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2010. — May. — Vol. 104, issue 18. — P. 187002.
- 164. Effects of Ru Doping on the Transport Behavior and Superconducting Transition Temperature of NdFeAsO_{0.89}F_{0.11} [TeKcT] / S. C. Lee [et al.] // Journal of the Physical Society of Japan. — 2010. — Vol. 79, no. 2. — P. 023702.
- 165. Effect of magnetic field on the spin resonance in FeTe_{0.5}Se_{0.5} as seen via inelastic neutron scattering [Текст] / J. Wen [et al.] // Phys. Rev. B. 2010. Mar. Vol. 81, issue 10. Р. 100513.
- 166. Muon-spin-spectroscopy study of the penetration depth of FeTe_{0.5}Se_{0.5}
 [Текст] / Р. К. Biswas [et al.] // Phys. Rev. B. 2010. Mar. Vol. 81, issue 9. Р. 092510.
- 167. Anisotropic superconducting properties of single-crystalline FeSe_{0.5}Te_{0.5} [Текст] / М. Bendele [et al.] // Phys. Rev. B. 2010. June. Vol. 81, issue 22. Р. 224520.
- 168. Direct evidence of two superconducting gaps in FeSe0.5Te0.5: SnS-Andreev spectroscopy and the lower critical field [Текст] / Т. Е. Kuzmicheva [и др.] // JETP Letters. — 2016. — Дек. — Т. 104, вып. 12. — С. 852.
- 169. Antiferromagnetic spin fluctuations in LiFeAs observed by neutron scattering [Текст] / А. Е. Taylor [et al.] // Phys. Rev. B. — 2011. — June. — Vol. 83, issue 22. — P. 220514.
- Scanning Tunneling Spectroscopy of Superconducting LiFeAs Single Crystals: Evidence for Two Nodeless Energy Gaps and Coupling to a Bosonic Mode [Tekct] / S. Chi [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Aug. — Vol. 109, issue 8. — P. 087002.
- 171. Scanning tunneling microscopy/spectroscopy of vortices in LiFeAs [Текст] / T. Hanaguri [et al.] // Phys. Rev. B. — 2012. — June. — Vol. 85, issue 21. — P. 214505.
- 172. Two distinct superconducting phases in LiFeAs [Текст] / Р. К. Nag [et al.] // Scientific Reports. — 2016. — June. — Vol. 6. — Р. 27926.
- 173. Distinguishing s[±] and s⁺⁺ electron pairing symmetries by neutron spin resonance in superconducting NaFe_{0.935}Co_{0.045}As [Tekct] / C. Zhang [et al.] // Phys. Rev. B. 2013. Aug. Vol. 88, issue 6. P. 064504.

- 174. Unconventional superconducting gap in NaFe_{0.95}Co_{0.05}As observed by angle-resolved photoemission spectroscopy [Tekct] / Z.-H. Liu [et al.] // Phys. Rev. B. 2011. Aug. Vol. 84, issue 6. P. 064519.
- 175. Measurement of a Double Neutron-Spin Resonance and an Anisotropic Energy Gap for Underdoped Superconducting NaFe_{0.985}Co_{0.015}As Using Inelastic Neutron Scattering [Tekct] / C. Zhang [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2013. Nov. Vol. 111, issue 20. P. 207002.
- 176. Anisotropic neutron spin resonance in underdoped superconducting NaFe_{1-x}Co_xAs [TeKCT] / C. Zhang [et al.] // Phys. Rev. B. 2014. Oct. Vol. 90, issue 14. P. 140502.
- 177. Anisotropic neutron spin resonance in superconducting BaFe_{1.9}Ni_{0.1}As₂ [Текст] / O. J. Lipscombe [et al.] // Phys. Rev. B. — 2010. — Aug. — Vol. 82, issue 6. — P. 064515.
- 178. Splitting of Resonance Excitations in Nearly Optimally Doped Ba(Fe_{0.94}Co_{0.06})₂As₂: An Inelastic Neutron Scattering Study with Polarization Analysis [Tekct] / P. Steffens [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2013. — Mar. — Vol. 110, issue 13. — P. 137001.
- 179. Korshunov, M. M. Three-orbital Model for Fe-Pnictides [Текст] / M. M. Korshunov, Y. N. Togushova, I. Eremin // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 2013. Т. 26, № 8. С. 2665—2668.
- 180. Bruus, H. Many-body quantum theory in condensed matter physics. An introduction [Текст] / H. Bruus, K. Flensberg. Oxford University Press, 2004. Р. 464.
- 181. Effect of nodes, ellipticity, and impurities on the spin resonance in iron-based superconductors [Tekct] / S. Maiti [et al.] // Phys. Rev. B. — 2011. — Oct. — Vol. 84, issue 14. — P. 144524.
- 182. Unexpected impact of magnetic disorder on multiband superconductivity [Текст] / М. М. Korshunov [et al.] // Phys. Rev. B. — 2014. — Oct. — Vol. 90, issue 13. — P. 134517.
- 183. Thermal pair-breaking in superconductors with strong electron-phonon interaction [Tekct] / A. Mikhailovsky [et al.] // Solid State Communications. — 1991. — Vol. 80, no. 7. — P. 511—515.

- 184. Korshunov, M. M. Superconducting state in iron-based materials and spin-fluctuation pairing theory [Tekct] / M. M. Korshunov // Physics-Uspekhi. — 2014. — Vol. 57, no. 8. — P. 813—819.
- 185. Comprehensive Eliashberg analysis of microwave conductivity and penetration depth of K-, Co-, and P-substituted BaFe₂As₂ [Tekct] / D. Torsello [et al.] // Phys. Rev. B. — 2019. — Apr. — Vol. 99, issue 13. — P. 134518.
- 186. Analysis of the London penetration depth in Ni-doped CaKFe₄As₄ [Текст] / D. Torsello [et al.] // Phys. Rev. B. 2019. Sept. Vol. 100, issue 9. P. 094513.
- 187. Electromagnetic response of unconventional superconductors [Текст] / R. A. Klemm [et al.] // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter. 1988. June. Vol. 72, issue 2. Р. 139.
- 188. Nam, S. B. Theory of Electromagnetic Properties of Superconducting and Normal Systems. I [Текст] / S. B. Nam // Phys. Rev. — 1967. — Апр. — Т. 156, вып. 2. — С. 470.
- 189. Nam, S. B. Theory of Electromagnetic Properties of Strong-Coupling and Impure Superconductors. II [Текст] / S. B. Nam // Phys. Rev. — 1967. — Апр. — Т. 156, вып. 2. — С. 487.
- 190. Superconductivity-induced optical anomaly in an iron arsenide [Текст] / A. Charnukha [et al.] // Nat. Comm. — 2011. — Vol. 2. — P. 219—224.