

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Удмуртский федеральный исследовательский центр  
Уральского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

Гильмутдинов Виталий Фаатович

**МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В  
КВАЗИДВУМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ И ИХ ВЗАИМНОЕ  
ВЛИЯНИЕ**

01.04.07 — Физика конденсированного состояния

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание учёной степени

кандидата физико–математических наук

Научный руководитель: доктор  
физ.–мат. наук Аржников А.К.

Ижевск – 2019

# Оглавление

<b>Список сокращений</b> . . . . .	3
<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>Глава 1. Литературный обзор</b> . . . . .	15
1.1. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка . . . . .	15
1.2. Скошенное спиральное магнитное упорядочение в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . . . . .	25
1.3. Взаимное влияние магнетизма и сверхпроводимости . . . . .	27
1.4. Выводы к главе 1 . . . . .	42
<b>Глава 2. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка</b> . . . . .	44
2.1. Постановка задачи . . . . .	44
2.2. Формализм . . . . .	45
2.3. Результаты . . . . .	51
2.4. Выводы к главе 2 . . . . .	63
<b>Глава 3. Скошенное магнитное упорядочение в <math>\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4</math></b> . . . . .	64
3.1. Постановка задачи . . . . .	64
3.2. Формализм . . . . .	65
3.3. Результаты . . . . .	73
3.4. Выводы к главе 3 . . . . .	77
<b>Глава 4. Конкуренция магнетизма и сверхпроводимости</b> . . . . .	78
4.1. Постановка задачи . . . . .	78
4.2. Формализм . . . . .	79
4.3. Результаты . . . . .	84
4.4. Выводы к главе 4 . . . . .	89
<b>Заключение</b> . . . . .	91
<b>Список публикаций</b> . . . . .	93
<b>Список литературы</b> . . . . .	97

## Список сокращений

ВТСП	Высокотемпературная сверхпроводимость
АФ (AF)	Антиферромагнитный, антиферромагнетик
ФМ (FM)	Ферромагнитный, ферромагнетик
ПМ (PM)	Парамагнитный, парамагнетик
ВСП (SDW)	Волна спиновой плотности
БКШ	Теория Бардина–Купера–Шриффера
ПП	Параметр порядка
СПП	Сверхпроводящий параметр порядка
LDA	Приближение локальной плотности
RPA	Приближение хаотических фаз
DMFT	Теория динамического среднего поля
GTB	Обобщённая модель сильной связи
NMR	Ядерный магнитный резонанс
ARPES	Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением
SQUID	Сверхпроводящий квантовый интерферометр
$\mu$ SR	Мюонный спиновый резонанс (релаксация)
<i>RE</i>	Редкоземельный элемент (rare-earth)
PS	Фазовое расслоение

## Введение

**Актуальность работы.** Явление высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) было открыто более 30 лет назад [1], однако интерес к изучению соединений и сплавов, проявляющих высокие критические температуры перехода в сверхпроводящее состояние, сохраняется и по сей день.

К высокотемпературным сверхпроводящим материалам в настоящее время можно отнести соединения на основе оксидов меди  $\text{CuO}$ , пниктидов  $\text{FeAs}$  и халькогенидов  $\text{FeSe}$ ,  $\text{FeTe}$  железа, диборид магния  $\text{MgB}_2$ , некоторые органические сверхпроводники, фуллериды  $\text{Cs}_3\text{C}_{60}$ , соединения с тяжёлыми фермионами. Сверхпроводимость при высоких температурах недавно была обнаружена под давлением в сероводороде  $\text{H}_2\text{S}$  [2], а также в супер гидриде лантана  $\text{LaH}_{10}$  [3,4]. В данной диссертационной работе речь пойдёт о сверхпроводниках на основе соединений  $3d$ -металлов — оксидов меди и пниктидов и халькогенидов железа. Интерес к этим структурам обусловлен не только широкими перспективами практического применения соединений на их основе в науке и технике (сверхпроводящие провода в ускорителях элементарных частиц, установках для магнитного удержания плазмы ТОКАМАК; носители информации и микроэлектроника), но также и чрезвычайным многообразием явлений, наблюдаемых в них и имеющих огромное значение с точки зрения фундаментальных проблем современной физики конденсированного состояния. В качестве примера можно привести существенное взаимное влияние в пниктидах железа и купратах магнитного и сверхпроводящего порядков, которые, как оказывается, могут сосуществовать, хотя считаются антагонистами. Экспериментальные и теоретические исследования последних лет показывают, что магнетизм в этих сверхпроводниках играет если не главенствующую, то определяющую роль в возникновении сверхпроводимости.

Изучение конкуренции магнетизма и сверхпроводимости позволяет выявить физические эффекты, которые, с одной стороны, могут помочь выяснить

особенности возникновения ВТСП, а с другой — предложить новые направления их технического использования. Несмотря на то, что за последние десятилетия были достигнуты значительные успехи в изучении магнитных и проводящих свойств ВТСП материалов, до сих пор остаются спорными многие вопросы, касающиеся механизма сверхпроводимости квазидвумерных структур. Отсутствует единая теория, адекватно описывающая в целом данный класс веществ, а не только их отдельные свойства. Теоретическое описание свойств ВТСП соединений и условий формирования в них магнитного и сверхпроводящего упорядочений с различным типом симметрии параметра порядка является важной и актуальной задачей.

Открытие в 2008 году нового класса ВТСП соединений на основе пниктидов (например, системы  $\text{LaOFeP}$  [5],  $\text{LaOFeAs}$  [6],  $\text{SmFeAsO}$  [7, 8], бескислородные системы  $A_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  ( $A=\text{Sr}, \text{Ba}$ ) [9],  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  [10]) и халькогенидов железа (системы  $\text{FeSe}$  [11, 12],  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$  [13, 14],  $\text{FeTe}_{1-x}\text{S}_x$  [15],  $\text{Fe}_{1+x}\text{Se}$  [16],  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$  [17, 18]) вызвало дополнительный интерес к изучению явления ВТСП, тем более, что купраты и пниктиды имеют схожее строение и свойства. Системы обоих типов сильно анизотропны, а их электронные состояния квазидвумерны, проводимость у купратов обеспечивается медь–кислородными слоями, а у пниктидов — содержащими железо. Кроме того у тех и других в стехиометрическом составе обнаруживается антиферромагнитный порядок, представляющий собой в общем случае волну спиновой плотности (ВСП), который при допировании разрушается с последующим образованием сверхпроводящего состояния в силу формирования благоприятных условий для образования куперовских пар. Существует и ряд отличий: недопированные купраты являются сильнокоррелированными моттовскими антиферромагнитными диэлектриками, а соединения на основе железа — антиферромагнитными металлами (хотя последние исследования показывают, что для соединения  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , допированного К и Сг, при половинном заполнении зоны характерно проявление Мотт-изоляторного поведения [19], также см. халькогениды  $(\text{Tl}, \text{K}, \text{Rb})\text{Fe}_x\text{Se}_2$  [20]),

купраты являются однозонными металлами, а «железные» сверхпроводники — многозонными металлами с несколькими поверхностями Ферми электронного и дырочного типа [21].

Необходимо подчеркнуть, что рассматриваемые слоистые структуры имеют также схожие фазовые диаграммы в координатах температура-допирование  $(T, x)$ . Как на диаграммах сверхпроводников, основанных на железе [22, 23], так и у купратов [24, 25] при допировании магнитное упорядочение (коллинеарное и неколлинеарное, соизмеримое и несоизмеримое) сменяется областью сверхпроводимости, причём зависимость температуры от концентрации допанта в последнем случае имеет куполообразную форму с максимумом в точке оптимального допирования  $x_{opt}$ . Наибольший интерес представляет интервал допирования, где области магнитного и сверхпроводящего порядков перекрываются или находятся в непосредственной близости друг от друга. С середины 60-х годов прошлого столетия и на протяжении долгого времени существовала точка зрения, что магнетизм подавляет сверхпроводимость. Это подтверждалось как экспериментами на известных к тому времени сверхпроводниках, так и теорией. Например, в работах [26, 27] было показано, что ферромагнитные флуктуации подавляют сверхпроводимость. Однако, с открытием явления высокотемпературной сверхпроводимости в купратах стало понятно, что магнетизм в этих соединениях играет важную роль в формировании сверхпроводящего порядка. Экспериментальные и теоретические данные последних лет указывают на возможность того, что формирование куперовских пар в купратах происходит за счёт спиновых флуктуаций, которые обуславливают высокие значения температуры перехода в сверхпроводящее состояние [28]. Аналогия в свойствах структур позволила предположить тот же механизм формирования ВТСП и для пниктидов железа, что является предметом актуальных исследований [29–31]. С учётом близости точек формирования сверхпроводящего состояния и магнитного фазового перехода, а также экспериментального обнаружения склонности квазидвумерных слоистых систем к фазовому расслоению между сверхпроводя-

щей и магнитной фазами, актуальным является теоретическое изучение характера фазового перехода между магнитным и сверхпроводящим состояниями.

В 1957 году Бардиным, Купером и Шриффером была предложена теория сверхпроводимости (теория БКШ [32, 33]), основанная на предположении о неустойчивости нормального состояния металла по отношению к образованию связанного состояния электронов с противоположными спинами и импульсами (куперовской пары) и подразумевающая электрон-фононный механизм его образования. Она позволила описать формирование сверхпроводимости с изотропной  $s$ -симметрией параметра порядка (сверхпроводящий параметр порядка в этом случае не зависит от волнового вектора  $\mathbf{k}$  зоны Бриллюэна и является константой  $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0$ ) в обычных сверхпроводниках. С открытием новых слоистых сверхпроводников стало ясно, что предложенного в теории БКШ формализма недостаточно для удовлетворительного объяснения характера спаривания в системах, где взаимодействие электронов носит сложный характер: для фононного механизма спаривания максимальная величина критической температуры  $T_c$  не может превышать 40 К. Новая сверхпроводимость, называемая «нетрадиционной», так как симметрия сверхпроводящего параметра порядка (СПП) показывала зависимость от  $\mathbf{k}$ , требовала новых подходов, которые позволяли бы учитывать коррелированную природу взаимодействия электронов в соединениях  $3d$ -металлов. Такая модель была создана в 1963 году Хаббардом [34], и стала основной не только в описании зонного магнетизма и перехода металл-диэлектрик, но и высокотемпературной сверхпроводимости.

Другим важным вопросом, касающимся ВТСП, является симметрия СПП. Несмотря на то, что за последние десятилетия было проведено значительное количество исследований свойств квазидвумерных сверхпроводников, до сих пор остаётся спорным вопрос, какая именно симметрия соответствует сверхпроводникам на основе оксидов меди, а какая — пниктидам железа. Связано это со следующими причинами: 1) экспериментальные данные, имеющиеся в литературе, являются противоречивыми: одни свидетельствуют в пользу

$s$ -симметрии [29,35], другие —  $d_{x^2-y^2}$  [36,37]; 2) существует ряд теоретических работ, в которых показана возможность формирования состояний с промежуточной (смешанной) симметрией параметра порядка (например,  $s + id_{x^2-y^2}$  [38,39],  $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$  [40],  $p_x + ip_y$  [41] и др.); 3) сложный характер механизма формирования куперовских пар в нетрадиционных сверхпроводниках обуславливает большое многообразие проявлений свойств сверхпроводящей щели (например, её модуль и знак, а также нетривиальная симметрия), а методы экспериментального наблюдения её параметров являются в основном косвенными.

**Степень разработанности темы исследования.** К настоящему времени сосуществование АФ упорядочения и сверхпроводимости было экспериментально обнаружено в целом ряде материалов, например, в боридах  $\text{NdRh}_4\text{B}_4$  [42],  $\text{SmRh}_4\text{B}_4$  [43], в халькогенидах  $\text{TbMo}_6\text{S}_8$ ,  $\text{DyMo}_6\text{S}_8$  [44], тяжелофермионных системах [45], фуллеридах  $\text{Cs}_3\text{C}_{60}$  [46], купратах  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  [47],  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  [48] и т.д. В некоторых соединениях сверхпроводимость сосуществует не с антиферромагнетиком, а с несоизмеримыми магнитными структурами, например, в купратах  $\text{La}_x\text{Ba}_{2-x}\text{CuO}_4$  [49],  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$  [50],  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  [51, 52] или «железных» сверхпроводниках  $\text{Fe}_{1+y}\text{Se}_x\text{Te}_{1-x}$  [53],  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  [54],  $(\text{Ba},\text{K},\text{Sr},\text{Na},\text{Ca})\text{Fe}_2\text{As}_2$  [55]. В ряде материалов наблюдается расслоение на магнитную и сверхпроводящую фазы, т.е. одновременно существуют магнитная и сверхпроводящая фазы, пространственно разделенные на мезоскопическом масштабе, например, в  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  [56],  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  и  $\text{CaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$  [57,58],  $\text{K}_{0.75}\text{Fe}_{1.75}\text{Se}_2$  [59], в  $\text{A}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  ( $\text{A} = \text{Rb}, \text{K}$ ) [60],

Для теоретического описания конкуренции магнетизма и сверхпроводимости квазидвумерных структур широко используются как микроскопический (гамилтонианы типа БКШ, Хаббарда [61],  $t - J$  модель [62,63]), так и феноменологический (теория Гинзбурга-Ландау [64,65]) подходы. Наиболее близкими к описанию электронных систем реальных объектов являются приближение локальной плотности + теория динамического среднего поля (LDA+DMFT), см., например [66], и приближение локальной плотности + обобщенная модель силь-

ной связи (LDA+GTV) [67, 68].

**Целью диссертационной работы** являлось теоретическое изучение условий формирования сверхпроводящих состояний с различной симметрией параметра порядка и их конкуренции с ферро-, антиферромагнитным и спиральным спиновым упорядочениями в квазидвумерных структурах. В соответствии с целью работы были поставлены следующие **задачи**:

1. Изучить условия формирования сверхпроводящих состояний с  $s$ -,  $d$ - и промежуточной  $s+id$ -симметриями параметра порядка в основном состоянии и при конечных температурах с помощью микроскопической модели, учитывающей притяжение электронов, находящихся на соседних узлах.
2. Проанализировать взаимосвязь между особенностями Ван Хова плотности электронных состояний, амплитудой сверхпроводящей щели и температурой сверхпроводящего перехода.
3. Исследовать условия формирования скошенного спирального магнитного упорядочения в трёхмерной анизотропной модели Хаббарда при параметрах, характерных для соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ .
4. Рассмотреть возможность макроскопического фазового расслоения и микроскопического сосуществования спиральных магнитных состояний с различными волновыми векторами и сверхпроводимости с различными типами симметрии параметра порядка в двумерной расширенной модели Хаббарда.
5. Провести анализ поведения амплитуд магнитного и сверхпроводящего параметров порядка в двумерной расширенной модели Хаббарда с учётом притяжения электронов, находящихся на соседних узлах.

**Научная новизна результатов**, полученных в диссертационной работе:

1. Впервые построены фазовые диаграммы сверхпроводящих состояний двумерной однозонной модели с притяжением электронов, находящихся на соседних узлах, которая учитывает не только состояния с чистой  $s$ - или  $d$ -симметрией сверхпроводящего параметра порядка, но и возможность формирования промежуточного между ними состояния  $s + id$ , в котором соотношение  $s$ - и  $d$ -состояний не является постоянным, а зависит от параметров модели.
2. В трёхмерной анизотропной модели Хаббарда предложен альтернативный Дзялошинскому–Мория подход в описании формирования скошенного спирального магнитного упорядочения.
3. Впервые построены фазовые диаграммы магнитных и сверхпроводящих состояний двумерной расширенной модели Хаббарда, в которой рассматривается конкуренция состояний с различной симметрией сверхпроводящего параметра порядка и спирального магнитного упорядочения с различным волновым вектором спирали с учётом фазового расслоения и сосуществования обоих порядков.

**Теоретическая и практическая значимость работы** состоит в получении и анализе новых результатов исследований, которые касаются конкуренции магнетизма и сверхпроводимости квазидвумерных структур. Полученные результаты являются значимыми как для развития теоретического описания фундаментальных свойств высокотемпературных сверхпроводников и наблюдаемых в них явлений, так и возможного их применения на практике. Полученные в работе результаты расширяют представление о симметрии сверхпроводящей щели высокотемпературных сверхпроводников, их магнитных состояниях и взаимном влиянии магнитного и сверхпроводящего состояний.

**Методология и методы исследования.** В настоящей диссертационной работе для исследования условий формирования и взаимного влияния сверхпроводимости и магнетизма в квазидвумерных слоистых структурах используются

три микроскопические однозонные двумерные модели. Одна из них включает в себя кинетическую энергию свободных электронов и притяжение  $V_0$  между электронами, находящимися на соседних узлах. Учёт такого притягивающего взаимодействия позволяет описывать формирование сверхпроводящих состояний с  $s$ -,  $d$ - и  $s + id$ -симметриями сверхпроводящего параметра порядка. Другая — модель Хаббарда, традиционно используется для описания сверхпроводимости и магнетизма соединений  $3d$ -металлов. Учёт кулоновского отталкивания электронов (хаббардовский параметр  $U$ ), находящихся на одном узле, позволяет рассматривать спиральные магнитные состояния. Наконец, совместный учёт обоих потенциалов  $U$  и  $V_0$  в расширенном гамильтониане Хаббарда делает возможным описание и анализ характера конкуренции между магнитными и сверхпроводящими состояниями. Приближение среднего поля является основным, используемым в работе. Анализ имеющихся в литературе данных позволяет сделать вывод, что этого приближения оказывается достаточно для качественного описания магнитных и сверхпроводящих фаз, реально наблюдаемых в высокотемпературных сверхпроводниках.

**Положения и результаты, выносимые на защиту диссертационной работы:**

1. Фазовые диаграммы сверхпроводящих состояний в двумерной модели с притяжением электронов, находящихся на соседних узлах, учитывающие как чистые  $s$ - и  $d$ -, так и промежуточное  $s + id$ -состояния сверхпроводника в широком диапазоне параметров при нулевой и конечных температурах.
2. Максимальные значения амплитуды сверхпроводящего параметра порядка и температуры сверхпроводящего перехода достигаются вблизи допирования, соответствующего особенностям Ван Хова плотности электронных состояний. Полученный результат свидетельствует о том, что оптимальное допирование зависит от положения особенности Ван Хова и может определяться свойствами кристаллической решётки, а не специфическим

механизмом образования куперовских пар.

3. Описание скошенной спиральной спиновой структуры, наблюдаемой экспериментально в соединении  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , возможно в трёхмерной анизотропной модели Хаббарда, не учитывающей спин-орбитального взаимодействия, которое традиционно считается ответственным за такой магнитный порядок.
4. Фазовые диаграммы магнитных и сверхпроводящих состояний в двумерной расширенной модели Хаббарда, учитывающей сверхпроводимость с различной симметрией параметра порядка и спиральные магнитные состояния с произвольным волновым вектором, а также их макроскопического фазового расслоения и микроскопического сосуществования.
5. Одновременный учёт магнитного и сверхпроводящего состояний в двумерной расширенной модели Хаббарда позволяет воспроизвести наблюдаемую экспериментально куполообразную форму зависимости температуры сверхпроводящего перехода от допирования.

**Достоверность** результатов, представленных в диссертационной работе, обеспечивается применением методов, широко апробированных при описании магнетизма и сверхпроводимости квазидвумерных соединений (приближение среднего поля, модели БКШ и Хаббарда), обоснованным выбором приближений и параметров моделей, соответствующих реальным системам, согласием полученных результатов с частично имеющимися результатами теоретических и экспериментальных исследований других авторов, в которых в том числе применялись более сложные методы и подходы.

**Апробация результатов работы.** Материалы, вошедшие в диссертационную работу, опубликованы в 18 работах, из которых 6 статей в журналах, рекомендованных ВАК, и 12 тезисов в сборниках докладов и трудов конференций. Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях

и симпозиумах: XX Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных ВНКСФ-20, Ижевск (2014); XV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества «СПФКС-XV», Екатеринбург (2014); XVI Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества «СПФКС-XVI», Екатеринбург (2015); XXXVII Собрание по физике низких температур (НТ-37), Казань (2015); VI Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism» (EASTMAG-2016), Красноярск (2016); XVII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества «СПФКС-XVII», Екатеринбург, (2016); Moscow International Symposium on Magnetism MISM-2017, Москва (2017); XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества «СПФКС-XVIII», Екатеринбург (2017); International Symposium Spin Waves 2018, Санкт-Петербург (2018); XI Всероссийская школа-конференция молодых ученых «КоМУ-2018», Ижевск (2018).

**Личный вклад соискателя.** Автором лично и в соавторстве с научным руководителем получены представленные в диссертационной работе результаты. Самостоятельно проведены анализ литературных источников, численные и аналитические расчеты. Совместно с научным руководителем и старшим научным сотрудником к.ф.-м.н. Тимиргазиным М.А. осуществлены постановка задачи, выбор методов её решения, обсуждение полученных результатов и их представление в виде докладов конференций и статей в научных журналах.

**Структура и объём диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, обзора литературы, 3 глав, в которых представлены оригинальные результаты, заключения, списка публикаций и библиографии. Общий объём работы 115 страниц, из них 96 страниц текста, включая 20 рисунков и 3 таблицы. Библиография включает 168 наименований на 19 страницах.

**Работа выполнена в рамках** темы НИР УдмФИЦ УрО РАН «Теоретические исследования электронных, магнитных, решеточных и транспортных свойств слоистых систем и наноструктурированных систем»

АААА-А17-117022250041-7, тем УрО РАН № 15-8-2-12 «Несоизмеримые магнитные структуры и фазовое расслоение в слоистых системах на основе переходных металлов» и № 18-2-2-12 «Квантово-механические расчеты и компьютерное моделирование электронных и решеточных свойств систем с пониженной размерностью» и регионального проекта РФФИ № 16-42-180516 «Взаимное влияние, сосуществование и фазовое расслоение несоизмеримых спиральных спиновых структур и сверхпроводимости».

## Глава 1

# Литературный обзор

В данной главе приведён обзор современного состояния вопросов, касающихся условий формирования неколлинеарных магнитных состояний и сверхпроводимости с различной симметрией параметра порядка в квазидвумерных соединениях на основе пниктидов (халькогенидов) железа и оксидов меди. Приводятся сведения, касающиеся кристаллической структуры рассматриваемых систем, возможных типов симметрии сверхпроводящего параметра порядка, особенностей магнитной структуры  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , взаимного влияния магнитного и сверхпроводящего параметров порядка в высокотемпературных сверхпроводниках.

### 1.1. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка

#### 1.1.1. Кристаллическая структура и типы симметрии СПП

Во введении уже было упомянуто, что соединения на основе пниктидов железа и купратов являются квазидвумерными структурами: проводимость осуществляется в слоях  $\text{FeX}$  ( $X=\text{As}, \text{Se}, \text{Te}$ ) и  $\text{CuO}$  соответственно.

Соединения на основе оксидов меди имеют тетрагональную или орторомбическую структуру — пространственные группы симметрии кристалла  $D_{4h}$  и  $D_{2h}$ . В первом случае атомы меди образуют квадратную решётку с группой симметрии  $C_{4v}$ , а в последнем — прямоугольную с группой симметрии  $C_{2v}$ , являющейся частным случаем  $C_{4v}$ . Ионы меди окружены атомами кислорода, а медь-кислородные слои чередуются со слоями, содержащими атомы Y и Ba, La и Sr, Nd и Ce [69].

Сверхпроводники на основе соединений железа также имеют тетрагональную структуру с группой симметрии кристаллической решётки  $D_{4h}$ . У

$REOFeAs$ -соединений ( $RE$  — редкоземельный элемент) кристаллическая структура представлена чередующимися слоями  $FeAs$  и  $REO$ . Атомы  $Fe$  образуют квадратную решётку с группой симметрии  $C_{4v}$ , сверху и снизу которой расположены квадратные решётки атомов  $As$ , причём каждый атом  $Fe$  окружён тетраэдром из атомов  $As$ . Соединения  $AFe_2As_2$  так же представляют собой чередующиеся слои  $FeAs$ , разделённые атомами  $A$ .

В отличие от  $FeAs$ -соединений между плоскостями  $FeSe$  ( $FeTe$ ) атомов нет. Атомы  $Fe$  образуют квадратную решётку с пространственной группой  $C_{4v}$ , причём каждый атом  $Fe$  находится в тетраэдрическом окружении атомов  $Se$  (или  $Te$ ) [70].

Параметр порядка должен преобразовываться как базисные функции неприводимого представления соответствующей точечной группы симметрии кристалла. Группе  $D_{4h}$  соответствует пять неприводимых представлений, из которых четыре — одномерные неприводимые представления, которые являются чётными при операции инверсии и соответствуют синглетному спариванию:  $A_{1g}$  (базисные функции  $1, x^2 + y^2, z, s$ -симметрия),  $A_{2g}$  (базис  $xy(x^2 - y^2)$ ,  $g$ -симметрия),  $B_{1g}$  (базис  $x^2 - y^2, d_{x^2-y^2}$ -симметрия) и  $B_{2g}$  (базис  $xy, d_{xy}$ -симметрия) [35]. Используя перечисленные базисные функции, можно записать щелевые функции  $\Delta_{\mathbf{k}}$  для каждой симметрии сверхпроводящего спаривания, где  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  — волновой вектор зоны Бриллюэна квадратной решётки. В данной работе будут учитываться только синглетные  $s_{x^2+y^2}$ -симметрия (также её называют «расширенная  $s$ -симметрия») сверхпроводящего параметра порядка с щелевой функцией  $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0(\cos k_x + \cos k_y)$  и  $d_{x^2-y^2}$ -симметрия сверхпроводящего параметра порядка с щелевой функцией  $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0(\cos k_x - \cos k_y)$ . В дальнейшем для краткости будем называть состояния « $s$ -симметрия» и « $d$ -симметрия» соответственно.

За исключением обычного изотропного  $s$ -состояния, у остальных параметров порядка базисные функции имеют линии нулей (узлов), число и расположение которых зависит от топологии поверхности Ферми, а также зонного запол-

нения. На рисунке 1.1 изображено распределение знаков щелевых функций расширенной  $s$ - и  $d$ -симметрий сверхпроводящего параметра порядка в пределах первой зоны Бриллюэна. Наличие линий нулей в  $\mathbf{k}$ -пространстве делает энергетически выгодным нетрадиционное  $d_{x^2-y^2}$ -спаривание в случае спин-флуктуационного механизма взаимодействия [28].

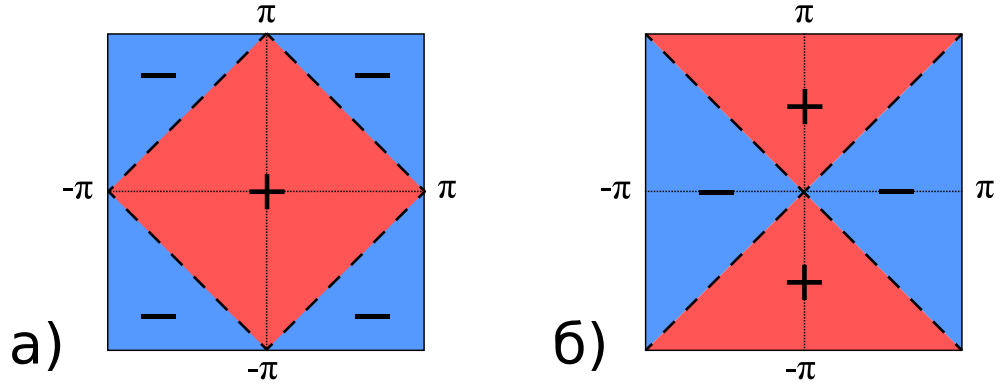


Рис. 1.1. Распределение знаков щелевых функций куперовского спаривания в пределах I зоны Бриллюэна в случае а) расширенной  $s$ -симметрии СПП и б)  $d_{x^2-y^2}$ -симметрии СПП. Пунктирными линиями обозначены линии нулей щелевой функции  $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$ :  $k_y = \pi \pm k_x$  в случае  $s_{x^2+y^2}$ -симметрии и  $k_y = \pm k_x$  в случае  $d_{x^2-y^2}$ -симметрии.

Важно отметить, что обычную  $s$ - ( $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0$ ) и расширенную  $s$ - ( $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0(\cos k_x + \cos k_y)$ ) волновые функции куперовского спаривания сложно различать на симметричном уровне, для этого нужны техники, позволяющие определить распределение сверхпроводящей щели в пространстве квазиимпульсов [71, 72].

Авторы работы [73] утверждали, что в приближении слабой связи симметрия СПП безузельных состояний не вырождена и должна соответствовать симметрии решётки. Однако если  $\Delta_{\mathbf{k}}$  имеет узлы как функция волнового вектора зоны Бриллюэна  $\mathbf{k}$ , то состояние является вырожденным и не должно обязательно соответствовать симметрии кристалла.

На данный момент является общепринятым, что купратам соответствует  $d$ -симметрия СПП [35]. Для них в работе [61] в приближении хаотических фаз (Random phase approximation, RPA) модели Хаббарда было показано, что спаривающий потенциал вблизи неустойчивости волны спиновой плотности при-

водит к  $d_{x^2-y^2}$ -спариванию, которое имеет узлы в диагональных направлениях  $(\pm 1, \pm 1)$  и достигает своего максимума вдоль направлений  $(0, \pm 1)$  и  $(\pm 1, 0)$ . В случае сильной связи симметрия сверхпроводящей щели определяется формой притягивающего потенциала  $V$  и зонной структурой, причём потенциал  $V$  должен быть расширен в базисных функциях, удовлетворяющих точечной группе симметрии кристалла.

Исследования сверхпроводников на основе железа указывают на формирование в них сверхпроводящей щели с обычной  $s$ -симметрией, расширенной  $s$ -симметрией, а также знакопеременной  $s^\pm$ -симметрией ( $\Delta_{\mathbf{k}} \sim (\cos k_x \cos k_y)$ ) имеющей разный знак на разных поверхностях Ферми («+» на дырочной и «-» на электронных) [74]. Тем не менее, существует большое количество исследований, которые приводят противоречивые данные, касающиеся как механизма, так и симметрии сверхпроводящей щели ВТСП соединений; во многом это связано с тем, что и расширенная  $s$ -симметрия, и  $d$ -симметрия имеют линии узлов параметра порядка.

### 1.1.2. Экспериментальные данные. Медь-кислородные ВТСП

В ранней работе [73] обсуждалась симметрия СПП сверхпроводников купратов. Авторами был приведён краткий обзор имеющихся на тот момент данных исследований теоретических моделей и экспериментов по ядерному магнитному резонансу (NMR), фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), измерению глубины проникновения  $\lambda$ , туннелированию, Рамановскому и нейтронному рассеянию. Утверждалось, что в семействе купратных ВТСП могут формироваться как  $s$ -, так и  $d$ -симметрия СПП. Результаты NMR по сдвигу Найта на соединении типа  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  обнаружили степенную зависимость коэффициента спиновой решёточной релаксации  $W_{1\alpha} \sim T^3$ , характерную для  $d$ -симметрии СПП и наличия линий узлов на поверхности Ферми, хотя расчёт в приближении RPA показал, что полученные данные можно объяснить как  $s$ -, так и  $d$ -симметрией. Величина остаточного сопротивления

$\rho_0 \sim 20 - 40 m\Omega$  см свидетельствовала в пользу  $s$ -спаривания, так как в случае  $d$ -симметрии СПП она должна быть ниже. Данные ARPES на  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  показали сильную анизотропию параметра порядка, уместную для  $d$ -симметрии СПП, но так как ARPES позволяет измерять  $|\Delta_{\mathbf{k}}|^2$ , но не знак  $\Delta_{\mathbf{k}}$ , результаты могут удовлетворять  $s$ -симметрии, тем более что амплитуда параметра порядка  $\Delta_0$  принимала своё максимальное значение вблизи точек  $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ , где в случае симметрии  $d$ -типа она должна исчезать. Эксперименты по измерению глубины проникновения  $\Delta\lambda = \lambda(T) - \lambda(0)$  на  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  указывали на её степенную зависимость от температуры и  $d$ -симметрию СПП. В то же время для допированного электронами  $\text{Nd}_{1,85}\text{Ce}_{0,15}\text{CuO}_4$  эта зависимость оказалась экспоненциальной, что указывало на  $s$ -симметрию. Измерения туннельных токов на  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ,  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  свидетельствовали в пользу не только  $s$ - и  $d$ -спаривания, но и возможности формирования с  $s + id$ -симметрией СПП, на что указывала разница в осцилляциях критического тока  $I_c$  на двух SQUID Nb- $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$   $160^\circ \pm 30^\circ$ . Эксперименты по рамановскому рассеянию на  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  и  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  показали, что в  $B_{1g}$ -симметрии низкочастотный спектр изменяется как  $\omega^3$ , что соответствует анизотропной  $d$ -симметрии СПП. Данные по нейтронному рассеянию на  $\text{La}_{1,86}\text{Sr}_{0,14}\text{CuO}_4$  показали, что  $\chi''(q, \omega)$  ( $\chi(q, \omega)$  — спиновая восприимчивость) не зависит от  $q$  и не имеет максимума при  $q$  порядка волнового вектора нестинга, что указывает на  $s$ -симметрию СПП.

Результаты экспериментов по наблюдению джозефсоновских туннельных токов на структуре Pb/изолятор/ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  ( $\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ) в продольном направлении, измеренные величины глубины проникновения магнитного поля  $\lambda_{ab}$  и температурной зависимости  $\lambda_{ab}(T)$ , приведённые в работе [75], ставят под сомнение тот факт, что для купратов характерна  $d$ -симметрия. Авторы обнаружили вполне определённую Джозефсоновскую связь для туннелирования вдоль оси  $c$ , хотя в случае  $d$ -сверхпроводника такой связи с обычным сверхпроводником наблюдаться не должно.

Авторы работы [76] утверждают, что, хотя механизм антиферромагнитных флуктуаций обычно ведёт к  $d$ -спариванию в одном слое и исключает электрон-фононное спаривание, в двухслойных ВТСП он может приводить к  $s$ -симметрии с разным знаком в каждой зоне. Условием для этого являются сильные антиферромагнитные флуктуации между соседними слоями, что было обнаружено в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . Авторы подчёркивают, что поддержкой высказываемому ими предположению может служить экспериментальный факт, свидетельствующий о том, что соединения  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  и  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$  ведут себя как традиционные проводники с  $s$ -симметрией СПП (см., например, [36]).

В работе [77] приведён анализ экспериментов по ARPES, сканирующей туннельной спектроскопии (STS) и измерению низкотемпературной теплопроводности на  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ . Оказалось, что полученные результаты не согласуются с  $d$ -симметрией СПП, но находятся в количественном согласии с  $s$ -симметрией. Полученная из разных экспериментов по ARPES и STS зависимость величины сверхпроводящей щели от угла  $\Delta(\theta)$  хорошо описывалась авторами характерной для  $s$ -симметрии зависимостью  $|\Delta(\theta)| = |\Delta(\cos 4\theta + s) + A \cos(8\theta)|$  ( $\theta$  — угол, отмеренный от направления связи Cu–O). В то же время точкам, полученным из STS, также удовлетворяла щелевая функция  $d$ -симметрии  $|\Delta(\theta)| = |\Delta_M[(1 - B) \cos 2\theta + B \cos 6\theta]|$ , но в этом случае значение максимальной щели 39,9 мэВ оказывалось нефизичным, так как верхний предел щели ограничивался положением пика в спектре и составлял 35 мэВ. Кроме того, оценка низкотемпературной электронной теплопроводности  $\kappa^\circ/T$  показала, что в случае  $d$ -симметрии предсказанная величина  $\kappa^\circ/T$  почти в 2–4 раза превышает наблюдаемую в экспериментах ARPES и по туннелированию, в то время как в случае  $s$ -спаривания погрешность составляет всего лишь 10%.

Эксперименты по ARPES в  $\text{La}_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}_4$  [78] показали наличие сверхпроводящего когерентного пика вне узельных направлений, а вокруг антиузлов — его сильное подавление и усиление  $\mathbf{k}$ -зависимости щели как в состоянии сверхпроводимости, так и псевдощелевом, что свидетельствует о сильном отклонении

симметрии СПП от традиционной  $d$ -симметрии.

В работе [79] был проведён анализ касающихся сверхпроводимости купратов экспериментальных данных по NMR, сдвигу Найта, глубине проникновения и туннелированию с точки зрения микроскопического (однозонная модель Хаббарда, приводящая в пределе сильной связи к гамильтониану  $t - J$  модели) и феноменологического подходов. Пользуясь вариационным методом Монте-Карло, авторы показали, что состояние со смесью  $s$ - и  $d$ -спариваний  $s + id$  является более выгодным, чем чистые  $s$ - и  $d$ -состояния для изученных значений плотности дырок ( $\delta \simeq 0,125, 0,250, 0,375$ ), а состояния с  $s + d$ -,  $s + id$ - и  $s + e^{i\phi}d$ -симметриями обладают неразличимой энергией. Кроме того, сравнивая отношение скоростей релаксации  $(1/T_1)_c/(1/T_1)_O$  меди Cu(2) и кислорода O(2,3), полученных из NMR на  $YBa_2Cu_3O_7$ , и рассчитанных теоретически в приближении РРА гамильтониана электрон-ядерной связи в плоскости  $CuO_2$ , авторы получили, что эксперименту удовлетворяет только  $s + id$ -симметрия параметра порядка. Данные по сдвигу Найта говорили о безузельной щелевой функции, что не согласуется с  $d$ -симметрией, но может быть объяснено с точки зрения  $s + id$ -спаривания.

### 1.1.3. Экспериментальные данные. Железосодержащие ВТСП

Исследования сверхпроводников на основе железа также показали возможность формирования у них как  $s$ -, так и  $d$ -симметрии СПП. Ранее делалось предположение, что соединения типа  $LaFeAsO_{1-x}F_x$  являются нетрадиционными сверхпроводниками, в которых за формирование куперовских пар отвечают спиновые флуктуации [29], а параметр порядка имеет расширенную  $s$ -симметрию и меняет знак между разными листами поверхности Ферми. Нетрадиционный характер спаривания, определяемого антиферромагнитными флуктуациями, был также показан в работе [80] на примере соединения  $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ . В теоретическом исследовании [81] с помощью РРА была построена минимальная пятizonная микроскопическая модель, учитывающая спиновые флуктуации. Ав-

торами было показано, что в соединении  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  возможна реализация не только  $s$ -, но и  $d$ -симметрии СПП, в зависимости от зонного заполнения и наличия или отсутствия дырочного кармана в точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна. Расчёты зонной структуры показали, что для удовлетворительного описания сверхпроводимости в  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  необходимы все 5 Fe- $d$  орбиталей. Измерения глубины проникновения  $\lambda(T)$  на соединении  $\text{LaFePO}$  показали её степенную температурную зависимость, близкую к  $T^{1,2}$ , что указывало на линии узлов СПП на поверхности Ферми [82].

Результаты исследований ARPES на семействе соединений  $\text{A}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  ( $\text{A}=\text{Ca}, \text{K}$ ) [83–85] показали отсутствие у них дырочного кармана в центре зоны Бриллюэна, и наличие карманов одного типа — электронных. В соответствии с этими данными авторами работы [37] в рамках RPA для обобщённой многозонной модели Хаббарда было показано, что такая структура поверхности Ферми должна вести к  $d$ -симметрии СПП. Более того, исчезновение электронных карманов в точке  $X$  зоны Бриллюэна в режиме сильного допирования соединения  $\text{K}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Fe}_2\text{As}_2$  также указывало на спаривание  $d$ -типа [86].

#### 1.1.4. Теоретические исследования

В обзоре [87] приводится первое обширное теоретическое исследование конкуренции между  $s$ - и  $d$ -состояниями. Стабилизация сверхпроводящих состояний с различной симметрией была изучена в теории БКШ при конкретных значениях интегралов перескока на первую и вторую координационные сферы  $t$  и  $t'$ . Было обнаружено, что  $d$ -состояние стабилизируется вблизи половинного заполнения зоны, в то время как расширенная  $s$ -симметрия является выгодной на краях зоны.

Возможность реализации состояния, при котором сверхпроводящая щель обладает смешанной симметрией  $s + d$  или  $s + id$  высказывалась в работах [38, 39]. Котляром [39] в подходе резонансных валентных связей было показано, что в случае ВТСП при низких температурах в спектре квазичастиц возможно

открытие щели со смесью  $s$ - и  $d$ -волновых функций куперовского спаривания, и это состояние является выгодным вблизи половинного заполнения.

Обобщённая  $s + e^{i\Theta}d$ -симметрия СПП рассматривалась в работе [88]. Было показано, что при отсутствии орторомбического искажения решётки такое состояние стабильно только в случае, если  $\Theta = \pi/2$ .

Авторами работы [89] рассматривалась двумерная Ферми-жидкость с возможностью формирования  $s$ - и  $d$ -симметрий СПП. В пределе слабой связи было показано, что между  $s$ - и  $d$ -состояниями возможен переход через промежуточную фазу со смешанной симметрией  $s + id$ , а оба перехода между чистыми и смешанным состояниями являются фазовыми переходами второго рода. Кроме того, было показано, что  $s + d$  состояние является энергетически не выгодным.

Температурные фазовые диаграммы для случая электронного переноса на соседние узлы были построены в работе [41]. Было обнаружено формирование триплетного  $p_x + ip_y$ -состояния в промежуточной области между  $s$ - и  $d$ -состояниями.

Конкуренция между чистыми  $s$ - и  $d$ -состояниями и формирование смешанной симметрии СПП в сверхпроводниках на основе железа рассматривались в работе [64]. Анализируя свободную энергию Гинзбурга-Ландау, авторы показали, что, вследствие понижения температуры после формирования при критической температуре  $T_c$  состояния с  $s$ -симметрией, возможно появление  $s + id$ -состояния с нарушением симметрии обращения времени.

Конкуренция между  $s$ - и  $d$ -состояниями с возможностью формирования фазы  $s + id$  так же рассматривалась авторами работы [90] в приближении сильной связи. Ими было показано, что смешанное  $s + id$ -состояние стабилизируется в определённом диапазоне относительной величины взаимодействия, отвечающей за формирование  $s$ - и  $d$ -состояний, а переходы между всеми тремя состояниями являются фазовыми переходами второго рода.

Следует упомянуть, что формирование сверхпроводящего параметра порядка со смесью симметрий  $s$ - и  $d$ -типа (их сосуществование) в купратах под-

тверждалась экспериментально [91–93]. В эксперименте по Андреевскому отражению на границе  $\text{Au}/\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  было обнаружено, что спектр кондактанса соответствует  $d + is$ -симметрии СПП, причём амплитуда  $is$  компоненты усиливается при увеличении прозрачности контакта [91]. Измерение джозефсоновского тока и пика кондактанса с нулевым смещением показало наличие глубокого его расщепления, что свидетельствовало в пользу формирования СПП со смешанной симметрией [92].

Авторы работы [94] в рамках функционала ренорм-группы и приближения среднего поля показали, что конкуренция между  $s$ - и  $d$ -состояниями в пниктидах железа ведёт к смешанному  $s + id$ -состоянию в режиме допирования электронами. Также в работах [95–97] авторы указывали на вырожденность  $s$ - и  $d$ -симметрий сверхпроводящего ПП и склонность квазидвумерных систем к формированию смешанного состояния.

Фазовые диаграммы сверхпроводящих состояний двумерной модели Хаббарда, учитывающей как синглетное, так и триплетное спаривание, были построены в работах [40, 98–102]. Для однозонной и трёхзонной ( $d - p$ ) моделей в приближении слабой связи [98] и с помощью квантового метода Монте-Карло [99] были построены их фазовые диаграммы в переменных  $t'/t$  и  $n$ . Результаты расчётов показали, что  $d$ -спаривание является выгодным в широкой области параметров модели, особенно вблизи половинного заполнения зоны и вблизи дна зоны при  $t'/t > 0,5$ . Также было обнаружено, что максимум амплитуды сверхпроводящей щели  $\Delta_0$  достигается вблизи особенностей Ван Хова. Спин-флуктуационный механизм формирования куперовских пар был изучен авторами работ [40, 100–102] в пределе слабой связи ( $U \ll W$ ,  $U$  — параметр кулоновского отталкивания,  $W$  — ширина зоны) модели Хаббарда при  $T = 0$ . Построенные в работах полные фазовые диаграммы включают богатое разнообразие синглетных и триплетных сверхпроводящих состояний, а  $d$ -симметрия СПП остается основным состоянием вблизи половинного заполнения.

В статье [103] в формализме вспомогательных бозонов Котляра и Рукен-

штайна на решётке Андерсона с конечным  $U$  рассматривалось появление сверхпроводимости с расширенной  $s$ - и  $d$ -симметриями СПП как функции кулоновского отталкивания для случая тяжёлофермионных систем. Результаты расчётов показали, что сверхпроводимость сохраняется с ростом параметра  $U$ , если притягивающее взаимодействие не слишком слабое, и преобладает для всех значений зонного заполнения. Подавление сверхпроводимости происходит при высоких  $U$  только вблизи половинного заполнения (в частности для  $d$ -симметрии).

Несмотря на то, что в последние десятилетия конкуренции сверхпроводящих состояний с  $s$ - и  $d$ -симметриями СПП и их возможному сосуществованию уделялось значительное внимание экспериментальных и теоретических исследований, данные, касающиеся этого вопроса, до сих пор недостаточно систематизированы. Имеющиеся фазовые диаграммы теоретических моделей построены для отдельных параметров либо не учитывают «смешанных» (промежуточных) симметрией состояний.

## 1.2. Скошенное спиральное магнитное упорядочение в



Купрат лантана  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  имеет слоистую структуру, образованную чередующимися слоями лантана и оксида меди. Его магнитные свойства тесно связаны со сверхпроводящими, которые возникают при допировании стронцием. Это обуславливает интерес к его магнитной структуре.

Основным структурным компонентом высокотемпературных проводников на основе купратов является  $\text{CuO}_2$ -плоскость. Весь перенос тока осуществляется внутри слоёв оксида меди, а обменное взаимодействие между ближайшими соседними плоскостями пренебрежимо мало, по сравнению со взаимодействием внутри слоя.

Традиционно ответственным за высокотемпературную сверхпроводимость в купратах считается взаимодействие между носителями заряда и магнитными

флуктуациями. Магнитная структура формирует окружение для движения дырок, и определение ее характеристик и их зависимости от допирования является очень важной задачей объяснения механизма сверхпроводимости.

Проводники на основе  $\text{CuO}_2$ , такие как, например,  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , являются квазидвумерными гейзенберговскими антиферромагнетиками. При допировании атомами Sr магнитная структура  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  претерпевает значительные изменения. Наличие дополнительных дырок способствует образованию несоизмеримых волн спиновой плотности. Эксперимент по рассеянию нейтронов на  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  показывает существование соизмеримых и несоизмеримых магнитных структур в непосредственной близости от половинного заполнения (при величине допирования дырками  $x < 0,02$ ) [104]. При  $x \sim 0,02$  система переходит в несоизмеримое состояние (спиновое стекло) с волновым вектором магнитной структуры  $\mathbf{Q} = (\pi - \delta, \pi - \delta)$ , параметр несоизмеримости  $\delta$  увеличивается с увеличением параметра допирования дырками  $x$ . При  $x > 0,06$  магнитная структура с волновым вектором  $\mathbf{Q} = (\pi - \delta, \pi)$  заменяет диагональную несоизмеримую фазу [105], при этом параметр  $\delta$  примерно пропорционален параметру допирования дырками до  $x \sim 0,12$  [106].

Величина обменного взаимодействия между атомами меди внутри плоскости, как показали эксперименты по упругому нейтронному [107] и Рамановскому рассеянию, как правило, составляет  $J_{\perp} \sim 0,1$  эВ. Слабое взаимодействие между слоями  $\text{CuO}_2$  (обменное взаимодействие оценивается как  $J_{\perp} \sim 10^{-5} J_{\parallel}$  [108]) приводит к формированию трёхмерного дальнедействующего неелевского упорядочения ( $T_N \approx 325$  K) [109, 110]. Кроме того, каждая плоскость  $\text{CuO}$  имеет слабый поперечный магнитный момент, и межплоскостное обменное взаимодействие ориентирует эти моменты антиферромагнитно (рис. 1.2).

Магнитные моменты оказываются скошены на угол  $0,17^\circ$  по отношению к плоскости  $xy$  [112]. Показано, что скашивание сохраняется при небольшом допировании Sr ( $x = 0 - 0,03$ ) [113]. Авторы работы [113] отмечают необычную анизотропию восприимчивости, наблюдаемую при допировании, что может быть

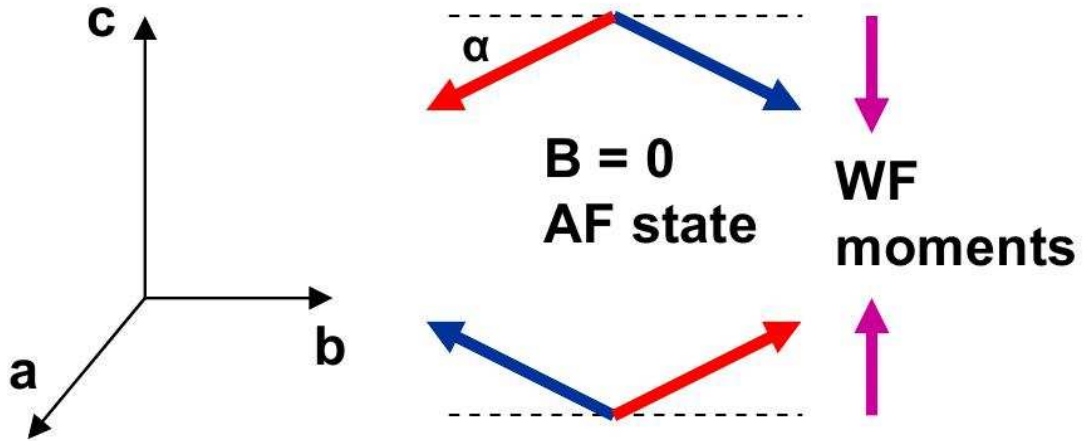


Рис. 1.2. Схематическое изображение магнитных моментов в двух слоях CuO. Магнитные моменты, лежащие в плоскости b-c, скошены под углом  $\alpha$  к оси b. Правее стрелками, направленными вдоль оси c, обозначены слабые магнитные моменты, упорядоченные антиферромагнитно (см. статью [111]).

объяснено наличием магнитной структуры типа волны спиновой плотности.

### 1.3. Взаимное влияние магнетизма и сверхпроводимости

#### 1.3.1. Теоретические исследования

Традиционно для описания магнетизма и сверхпроводимости соединений на основе  $3d$ -металлов используется модель Хаббарда [34]. С её помощью Скалапино и др. показали в рамках приближения случайных фаз, что магнитное упорядочение типа волны спиновой плотности, возникающее в связи с нестингом поверхности Ферми, приводит к возникновению условий, благоприятных для сверхпроводимости  $s$ - и  $d$ -типа, причём система оказывается чувствительной к зонной структуре и её заполнению [61, 114]. Спин-флуктуационный механизм формирования куперовских пар был изучен авторами работы [100] в пределе слабой связи модели Хаббарда при  $T = 0$ . Построенные в работе фазовые диаграммы включают богатое разнообразие синглетных и триплетных сверхпроводящих состояний, а  $d$ -симметрия сверхпроводящего параметра порядка остается основным состоянием вблизи половинного заполнения.

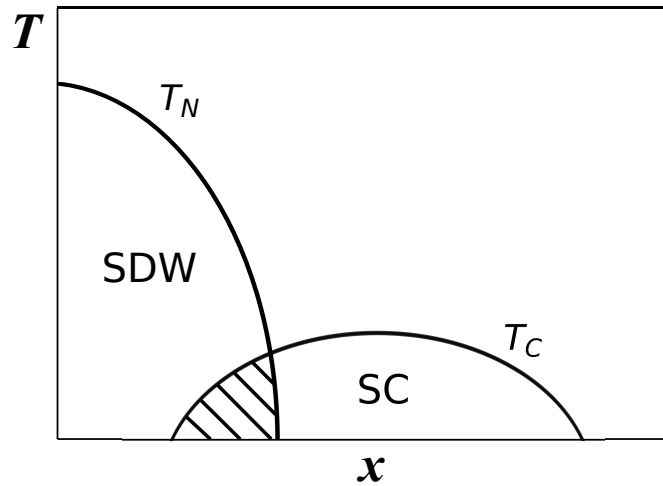


Рис. 1.3. Общий вид фазовых диаграмм, построенных в переменных температура-допирование  $(T, x)$ , характерный для высокотемпературных сверхпроводников на основе соединений железа и оксидов меди. Сплошными линиями обозначены температуры перехода  $T_N$  и  $T_C$  в SDW (BCP) и сверхпроводящее состояния соответственно. Штриховкой обозначена область перекрытия обоих упорядочений.

На рисунке 1.3 изображена типичная фазовая диаграмма на плоскости  $(T, x)$ , характерная для ВТСП систем. Отличительной чертой этих диаграмм является наличие области перекрытия магнитного и сверхпроводящего упорядочений (заштрихованная область), либо их непосредственная близость, что вызывает интерес к исследованию их взаимного влияния.

Хотя теоретические и экспериментальные исследования сверхпроводников с квазидвумерным характером электронным состояний ведутся уже несколько десятилетий, до сих пор остаётся открытым вопрос о том, каким образом в них реализуется конкуренция магнитного и сверхпроводящего состояний. В некоторых экспериментальных работах показано, что переход между ними является фазовым переходом первого рода [56–58, 60] и должен вести к фазовому расслоению, в других — возможность формирования квантовой критической точки [115, 116] и сосуществования магнитного и сверхпроводящего состояний [47–55].

## Исследования в модели БКШ

Авторы работы [117] описывали сверхпроводимость, обусловленную фононным механизмом спаривания, в присутствии магнитной решётки. Было показано, что эффективные фононные и кулоновские взаимодействия могут приводить к появлению сверхпроводимости. Влияние ферромагнитных спиновых флуктуаций на сверхпроводимость с традиционным механизмом спаривания изучалось в ранней работе [27]. Путём первопринципных расчётов авторы показали, что ферромагнитные спиновые флуктуации, порождаемые кулоновским взаимодействием валентных электронов, ведут к усилению синглетного отталкивания и подавлению спин-синглетного спаривания за счёт появления полюса в парамагнитной восприимчивости  $\chi(q, \omega)$  при  $q, \omega \rightarrow 0$  в условиях ферромагнитной неустойчивости. Область сосуществования сверхпроводящей фазы и геликоидального упорядочения локализованных спинов была обнаружена в рамках изотропной БКШ модели свободных электронов и локализованных спинов для тройных соединений  $\text{ErRh}_4\text{V}_4$  и  $\text{M}_x\text{Mo}_6\text{S}_8$  в работе [118].

## Исследования в модели Хаббарда

Взаимное влияние ВСП упорядочения и сверхпроводимости с различной симметрией параметра порядка изучалось в приближении среднего поля модели Хаббарда с дополнительным слагаемым, учитывающим спаривающее взаимодействие, на квадратной решётке [119]. Сообщалось, что однозонная модель Хаббарда, рассматриваемая в рамках теории Хартри–Фока, приводит к основному магнитному состоянию типа ВСП, а сверхпроводящее спаривание, инициируемое АФ спиновыми или флуктуациями коллективных мод ВСП состояния, приводит к возникновению сверхпроводимости  $d$ -типа. Авторами предполагалось, что сверхпроводимость обусловлена обобщенным притягивающим потенциалом без указания на какое-либо конкретное происхождение, что позволило провести сравнительное исследование сосуществования сверхпроводимости и

состояния ВСП. Учитывались изотропная и анизотропная  $s$ -, расширенная  $s$ -,  $d$ - и смешанная  $s + d$ -симметрии СПП, параметры модели составляли  $U = t$  и  $V = 1,5t$ . Было найдено, что фазовая диаграмма, построенная в переменных амплитуд соответствующих параметров порядка сверхпроводящего  $\Delta_{SC}$  и ВСП  $\Delta_{SDW}$  состояний и заполнения зоны, аналогична диаграммам высокотемпературных купратов только тогда, когда параметр порядка сверхпроводящей фазы имеет  $d$ -симметрию. Сосуществование двух параметров порядка было обнаружено для изотропного  $s$ -,  $d$  и  $s + d$ -спариваний, причём если в первом случае магнетизм и сверхпроводимость сменяют друг друга, то в последних двух сверхпроводимость возникает между двумя областями ВСП упорядочения. Кроме того, авторы отмечали, что в рассматриваемой ими модели ВСП состояние является более стабильным, чем сверхпроводимость, в силу нестинга поверхности Ферми.

Приближение среднего поля двумерной расширенной модели Хаббарда применялось также в теоретическом исследовании [120] для описания конкуренции сверхпроводящего состояния с  $d$ -симметрией СПП и АФ состояния типа ВСП, притом природа формирования сверхпроводимости не учитывалась. Гамильтониан модели включал хаббардовское взаимодействие, стабилизирующее несоизмеримое АФ упорядочение в приближении Хартри–Фока, и феноменологическое взаимодействие, стабилизирующее куперовское спаривание  $d$ -типа. Было показано, что магнитное и сверхпроводящее упорядочения сосуществуют, и энергия основного состояния ВСП усиливается куперовским спариванием, если взаимодействие  $d$ -типа является притягивающим и не равно нулю. Сверхпроводимость исчезает при половинном заполнении из-за появления щели АФ упорядочения. Самосогласованное решение уравнений на АФ и сверхпроводящую щель позволило определить число сверхпроводящих электронов  $x$  и магнитный момент на узле  $S$ . Плотность сверхпроводящих электронов  $x$  растёт с допированием, что приводит к уменьшению спинового момента  $S$ . Подчёркивалось, что перечисленные эффекты наблюдались в экспериментальных исследованиях

ВТСП купратов.

Вариационный метод Монте–Карло, позволяющий достоверно описывать широкий диапазон параметров коррелированных систем, использовался для изучения взаимовлияния между антиферромагнетизмом и сверхпроводимостью в двумерной модели Хаббарда в работах [121, 122]. Использовалась волновая функция типа Джастроу  $\Psi_{d-} = P_Q P_G \Phi_{d-}$ , где  $P_G$  — оператор Гутцвиллера,  $P_Q$  — оператор дублон-голонной связи. В исследовании [121] была построена фазовая диаграмма модели на плоскости переменных диагональный перенос–допирование  $(t'/t, \delta)$  в случае сильных электронных корреляций  $U \sim 30t$ , что в два раза больше ширины зоны  $W$ . В рассматриваемом интервале допирования  $0 \leq \delta \leq 0,3$  было показано как формирование чистых сверхпроводящего с  $d$ -симметрией СПП и АФ состояний, так и сосуществование обоих параметров порядка в областях, соответствующих допированию дырками  $-0,225 \leq t'/t \leq 0$  и электронами  $0 \leq t'/t \leq 0,375$ . АФ упорядочение стабилизировалось вблизи половинного заполнения зоны, с ростом допирования основным становилось сверхпроводящее состояние. Для величины диагонального переноса  $t'/t = -0,3$  магнитное и сверхпроводящее состояние полностью взаимоисключали друг друга и сосуществования не обнаруживалось, в отличие от  $t - J$  модели, в которой при данном значении  $t'/t$  состояние сосуществования занимало широкую область диаграммы [123]. Исследование влияния параметров модели  $4 \leq U/t \leq 30$ ,  $t'/t$  и  $\delta$  [122] показало, что АФ упорядочение стабилизируется в широком интервале величин  $U/t$  и  $t'/t$  при низком допировании и сосуществует со сверхпроводимостью в недодопированном электронами режиме при  $U > U_{co}$ , где  $U_{co} \sim 10t$  — точка кроссовера от слабой сверхпроводимости БКШ типа для  $U < U_{co}$  (слабые корреляции) к нетрадиционному для  $U > U_{co}$  (сильные корреляции), в котором пары формируются через локальный обмен или дублон-голонный процесс. При увеличении  $t'/t$  сверхпроводимость подавляется в фазе сосуществования, и АФ состояние доминирует. В области допирования дырками сверхпроводимость сильная в передопированном режиме и ослабляется при небольшом допирова-

нии. В передопированной области  $\delta > 0,15$  при  $U/t < 30$  формируется чистое сверхпроводящее состояние, а область сосуществования почти исчезает.

Авторы работы [124] рассматривали конкуренцию магнетизма и сверхпроводимости в рамках приближения среднего поля и ренормгруппового анализа двумерной модели Хаббарда со средней величиной взаимодействия, учитывая возможность формирования несоизмеримого спирального магнитного упорядочения. Исследование проводилось для фиксированных значений  $U/t = 3$  и  $t'/t = -0,15$ , а также  $t'/t = 0$ . Основным выводом работы является утверждение о том, что несоизмеримое магнитное состояние с волновым вектором  $\mathbf{Q} = (\pi \pm 2\pi\eta, \pi) = (Q, \pi)$ , где  $\eta$  — параметр несоизмеримости, может сосуществовать со сверхпроводимостью с  $d$ -симметрией параметра порядка всюду, кроме линии половинного заполнения  $n = 1$ , где магнитное состояние с  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  является соизмеримым и уровень Ферми оказывается в щели. Кроме того, интересным является факт, что при заполнении, соответствующем особенности Ван Хова  $n_{vH} = 0,87$ , сосуществования тоже нет, так как магнитный порядок полностью подавляется, а амплитуда сверхпроводящей щели достигает максимума (оптимальное допирование). Также было обнаружено, что магнитный момент появляется скачком, претерпевает слабый переход первого рода при  $n = 0,73$  и монотонно растёт до  $n = 1$  (исчезая только вблизи особенности Ван Хова). Для дырочного допирования значения амплитуды сверхпроводящего параметра порядка оказываются выше, чем для электронного, где несоизмеримый магнитный и сверхпроводящий порядки конкурируют слабо и значительно подавляют друг друга.

В работе [125] были построены фазовые диаграммы двумерной модели Хаббарда при  $T = 0$ , в которой конкуренция АФ упорядочения и сверхпроводимости  $d$ -типа исследовалась с помощью квантового метода Монте–Карло. Зависимости химического потенциала от допирования  $\mu(x)$  и величин магнитного и сверхпроводящего параметров порядка от допирования  $m(x)$  и  $\Delta(x)$  показали появление с ростом допирования сначала состояния сосуществования

обоих упорядочений, затем фазового расслоения между ними и формирования чистой  $d$ -сверхпроводимости. Фазовые диаграммы оказались одинаковыми на качественном уровне как для допирования дырками, так и электронами: в последнем случае АФ упорядочение сохраняется для более высоких значений параметра  $x$ , так как электроны формируют карманы в точке  $(\pi, 0)$  и высокая плотность состояний стабилизирует магнитное упорядочение. Авторы отмечали, что сценарий фазового расслоения, найденного в рамках их подхода, следует трактовать как общую тенденцию рассматриваемой системы к формированию микроскопически неоднородных фаз.

Конкуренция между антиферромагнетизмом и сверхпроводимостью рассматривалась в двумерной модели Хаббарда путём комбинирования функционала ренормгруппы с теорией среднего поля при спонтанном нарушении симметрии [126]. Учитывался перенос на вторую координационную сферу  $t' < 0$  и значение заполнения зоны от половинного и ниже. Показано, что АФ и сверхпроводимость  $d$ -типа подавляют друг друга, оставляя только небольшую область в пространстве параметров модели, где оба упорядочения могут сосуществовать со значительной величиной параметра порядка у каждого. Были построены графики зависимости амплитуд магнитного и сверхпроводящего параметров порядка от химического потенциала  $\mu$  и электронной плотности для  $U/t = 2,5$  и  $t'/t = -0,15$ . При половинном заполнении наблюдалась максимальная АФ щель, а амплитуда СПП равнялась нулю. При уменьшении числа электронов магнитный момент монотонно убывал, а сверхпроводящая щель оставалась нулевой. Когда дырочные карманы становились достаточно большими (при заполнении  $n < 0,92$ ), появлялось сверхпроводящее состояние, сосуществующее с АФ упорядочением. Когда химический потенциал достигал значения, соответствующего особенности Ван Хова  $\mu_{vH}$ , магнитный момент быстро исчезал и оставался нулевым при всех  $\mu < \mu_{vH}$ , в то время как сверхпроводящая щель монотонно убывала, но оставалась конечной. Авторы подчёркивали, что система является сверхпроводником  $d$ -типа для существенно малых  $U$ , что было отображено на

фазовой диаграмме  $(U, \mu)$ , а при больших  $U$  вблизи половинного заполнения проявляет АФ свойства, становясь сверхпроводником при определённых значениях  $\mu$ .

Свойства коррелированных АФ и сверхпроводящего  $d$ -типа состояний изучались в  $t - t' - U$  модели Хаббарда на квадратной решётке с использованием вариационного метода Монте-Карло [127]. Было показано, что в недодопированном режиме в случае допирования дырками возможно формирование фазового расслоения между соизмеримым АФ состоянием и сверхпроводимостью  $d$ -типа.

### Исследования в $t - J$ модели

Нестабильность сверхпроводящей системы по отношению к антиферромагнитному упорядочению и фазовому расслоению между сверхпроводящей и магнитной фазами была показана в  $t - J$ -модели с использованием проекторов Гутцвиллера [128]. Было получено, что в данном подходе фазовое расслоение сохраняется для более высокого допирования, чем чистое АФ упорядочение. При  $t/J = 3$  однородная смесь АФ и сверхпроводимости всегда нестабильна по отношению к фазовому расслоению. Авторами отмечалось, что сосуществование магнетизма и сверхпроводимости не реализуется как однородное состояние, вместо этого при допировании ниже соответствующего фазовому расслоению выгодно разделение на две фазы: не допированное АФ состояние с дальним порядком без сверхпроводимости и допированный сверхпроводник без магнитного состояния. Было получено, что с ростом отталкивания на соседних узлах область фазового расслоения сужается и почти исчезает при величине хаббардовского отталкивания  $U/t \approx 3 - 4J$ , при которой подавляется сверхпроводимость.

Сосуществование антиферромагнетизма и сверхпроводимости  $d$ -типа в рамках статистически согласованного приближения Гутцвиллера, применённого к  $t - J - U$  модели, обсуждалось в работе [129]. Было показано, что для типичной величины  $J/|t| = 13$  сосуществование антиферромагнетизма и сверх-

проводимости появляется только для  $U/|t| > 10,6$  и в очень узком диапазоне допирования ( $\delta \lesssim 0,006$ ) вблизи состояния моттовского изолятора.

Ниже следует обзор экспериментальных и теоретических исследований взаимовлияния сверхпроводимости и магнетизма в ВТСП на основе оксидов меди и слоистых соединений железа.

### 1.3.2. Медь-кислородные ВТСП

#### Экспериментальные исследования

В работе [50] приведены результаты исследований ВСП упорядочения с помощью нейтронного рассеяния на сверхпроводящем монокристалле  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ , претерпевающим переход в сверхпроводящее состояние при температуре  $T_c = 42\text{ К}$ . Было получено, что упругое магнитное рассеяние при низких температурах несоизмеримо с параметром решётки и характеризуется дальним порядком в  $\text{CuO}$ -плоскости. Наличие магнитного пика при той же температуре, при которой появляется сверхпроводимость, говорит о корреляции между двумя явлениями и свидетельствует о сохранении влияния АФ упорядочения на сверхпроводимость при допировании соединения от состояния изолятора к сверхпроводящему.

В экспериментах по упругому нейтронному рассеянию [48] соизмеримое АФ упорядочение было обнаружено в соединении  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,5}$ . Анализ результатов по  $\mu\text{SR}$ -спектроскопии показал, что шахматная намагниченность, наблюдаемая в этом соединении, на самом деле не статическая, а флуктуирует на наносекундном временном масштабе, что, по мнению авторов, указывает на сосуществование сверхпроводимости и магнитного порядка. Фазовые диаграммы соединений  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  на плоскости  $(T, x)$  были представлены в работах по  $\mu\text{SR}$  и измерению намагниченности [51] и нейтронной спектроскопии [52]. Авторы исследования [51] подчёркивают, что сосуществование АФ и сверхпроводимости происходит на нанометровом масштабе в узком диапазоне допирования

кислородом.

Эксперимент по упругому нейтронному рассеянию на нескольких монокристаллах  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  показал наличие внутри сверхпроводящей фазы двух пар магнитных пиков, соответствующих несоизмеримым спиновым модуляциям [105]. Авторы указывали на возможность сосуществования или фазового расслоения сверхпроводящей и магнитной фаз на микроскопическом или мезоскопическом уровне.

Сосуществование ферромагнитного упорядочения и сверхпроводимости было обнаружено в монокристалле  $\text{Bi}_{2-x}\text{Pb}_x\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-y}\text{Dy}_y\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$ , для которого сверхпроводимость существует до температуры  $T_c \sim 80$  К, а магнитный порядок существует вплоть до комнатных температур [130]. Экспериментальные данные по рентгеновской дифракции и абсорбции рентгеновских лучей, инфракрасной спектроскопии, электронной зондирующей микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии с высоким разрешением показали отсутствие тенденции к фазовому расслоению, и что сосуществование магнитного и сверхпроводящего упорядочений присуще всему образцу, а не отдельным фазам или изолированным примесям.

В работах [131, 132] приводятся результаты NMR на «пятислойном» соединении  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_4\text{Cu}_5\text{O}_y$ . Результаты измерений сдвига Найта, ядерной спинрешёточной релаксации и внутреннего поля  $H_{int}$  [131] свидетельствовали о сосуществовании магнетизма и сверхпроводимости на разных CuO-слоях: АФ упорядочение формируется на трёх внутренних слоях, а объёмная сверхпроводимость — на внешних. Авторы [132] отмечали, что АФ упорядочение формируется на всех пяти CuO-слоях, а микроскопическое сосуществование магнитного порядка и объёмной сверхпроводимости реализуется на внешних слоях.

Конкуренция магнетизма и сверхпроводимости изучалась на плёнках электрон-допированных купратов  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  [47] в эксперименте по угловому магнетосопротивлению. Построенная в работе  $(T, n)$ -фазовая диаграмма показала наличие сосуществования статического и квазистатического АФ упорядо-

чения со сверхпроводимостью в интервале допирования  $0,12 \leq x \leq 0,15$ .

## Теоретические исследования

Авторы работы [133] рассматривали конкуренцию несоизмеримого АФ упорядочения и сверхпроводимости с точки зрения термодинамики смеси жидкостей, которые могут обладать различными основными состояниями — макроскопического анализа функционала свободной энергии Гинзбурга-Ландау для двух связанных параметров  $\vec{S}$  и  $\Delta$ , представляющих антиферромагнитный и сверхпроводящий параметры порядка. Авторы отмечали, что в зависимости от параметров модели магнитное и сверхпроводящее состояния могут конкурировать или усиливать друг друга. В приближении среднего поля были получены фазовые диаграммы в координатах температура-допирование. Диаграммы включали в себя как реализацию чистых АФ или  $d$ -сверхпроводящего состояний, так и их сосуществование. На основании полученных результатов приводилась интерпретация результатов спектроскопических исследований для соединений  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  и  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ .

Влияние статических магнитных флуктуаций на плотность сверхтекучести  $\rho_s(T)$  было рассчитано для сверхпроводников  $d$ -типа в полуфеноменологическом подходе приближения среднего поля двумерной расширенной модели Хаббарда [134]. Авторы работы делают вывод, что наблюдаемый коллапс  $\rho_s$  при  $x \simeq 0,35$  в недодопированном  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  может свидетельствовать о сосуществовании ВСП и сверхпроводимости. Также были построены фазовые диаграммы модели в переменных амплитуд параметров порядка ( $m$  и  $\Delta$ ) и независимого параметра  $w$ , ренормализующего квазичастичную дисперсию, с учётом диагонального и АФ упорядочения и  $d$ -сверхпроводимости. Показано, что несоизмеримый магнитный порядок может сосуществовать со сверхпроводимостью с небольшим снижением амплитуды спаривания, в отличие от соизмеримого, когда сверхпроводимость быстро подавляется. В случае несоизмеримого магнитного упорядочения с уменьшением  $w$  происходит фазовый переход вто-

рого рода из сверхпроводящей фазы с симметрией параметра порядка  $d$ -типа в фазу сосуществования сверхпроводимости и шахматного ВСП упорядочения, за которым следует фазовый переход первого рода в область сосуществования с сверхпроводимости и диагонального спирального спинового упорядочения. Для соизмеримой ВСП магнитное и сверхпроводящее упорядочения полностью подавляют друг друга, оставляя лишь небольшую область сосуществования, которая зависит от параметров модели.

В работе [135] в приближении среднего поля расширенной модели Хаббарда, в которой сверхпроводимость и магнетизм сосуществуют, в пределе слабой связи изучалось влияние примесей на сверхпроводимость с  $d$ -симметрией СПП в присутствии АФ корреляций и проводится обсуждение результатов экспериментов по NMR на ядрах примеси Zn в сверхпроводящем состоянии соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ . Авторы сообщали, что отклик коррелированной электронной системы на локальное возмущение может обеспечить важную информацию об основном состоянии чистой системы. Было показано, что рассматриваемая модель хорошо описывает эксперименты NMR на оптимально допированном  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ .

### 1.3.3. Железосодержащие ВТСП

#### Экспериментальные исследования

Фазовые диаграммы на плоскости  $(T, x)$  для соединения  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ , учитывающие магнитное упорядочение и сверхпроводимость, были построены в работах [22, 116, 136]. Измерения термодинамических и транспортных свойств позволили сделать вывод, что при низких температурах сверхпроводимость появляется и в орторомбической, и в тетрагональной фазах [22]. Полученные величины сопротивления, восприимчивости и удельной теплоёмкости показали, что допирование Co подавляет высокотемпературный фазовый переход, который ассоциируется обычно со структурным (тетрагональная-орторомбическая)

и АФ (парамагнетик-АФ) переходами в  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , а при  $x \geq 0,038$  появляется сверхпроводимость. Авторы утверждали, что на построенной фазовой диаграмме область перекрытия магнитного и сверхпроводящего состояний вплоть до оптимального допирования  $x = 0,07$  является либо областью существования сверхпроводимости в орторомбической (АФ) фазе, либо образец разделяется на тетрагональную (сверхпроводящую) и орторомбическую (не сверхпроводящую) фазы. Аналогичная диаграмма была построена в работе [116] на основании величин сдвига Найта и спин-решёточной релаксации, полученных из NMR. Данные эксперимента показали, что допирование Co подавляет однородную спиновую восприимчивость и спиновые флуктуации, а сверхпроводящий «купол» реализуется над квантовой критической точкой, которая была обнаружена между несоизмеримым ВСП и сверхпроводящим состояниями вблизи оптимального допирования  $x = 0,08$ , которое соответствует полному подавлению склонности системы к формированию дальнедействующего АФ упорядочения. Похожие результаты были получены в работе [136], где приводятся результаты систематических измерений сопротивления, теплоёмкости, восприимчивости и коэффициента Холла: авторы подчёркивали возможное сосуществование сверхпроводимости с ВСП состоянием с нарушенной симметрией в недодопированной области диаграммы и наличие квантовой критической точки. Сосуществование сверхпроводимости и несоизмеримого магнитного порядка типа ВСП в соединении  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  было обнаружено также в экспериментах по NMR [54], ARPES [137]. Кроме того, в ряде экспериментов по мюонной спиновой релаксации ( $\mu\text{SR}$ ) на  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  ( $x = 0,06$ ) и  $\text{CaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$  ( $x = 0,075-0,15$ ) [30, 55, 58] и магнито-силовой микроскопии и рентгеновской дифракции порошков на  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  [56] было продемонстрировано наличие макроскопического фазового расслоения на сверхпроводящую и магнитную фазы.

В работе [138] приводятся результаты систематических исследований на монокристаллах  $(\text{Li,Fe})\text{OHFeSe}$  с температурами сверхпроводящего перехода

$20 \text{ K} \lesssim T_c \lesssim 41 \text{ K}$ . Для некоторых образцов было обнаружено резкое падение намагниченности при почти одной и той же температуре магнитного фазового перехода  $T_{afm} \sim 125 \text{ K}$ , что является общим свойством для магнитных фазовых расслоений. Было обнаружено сосуществование антиферромагнитного и сверхпроводящего или нормального состояний в масштабе от мезоскопического до макроскопического. Авторы объяснили такое сосуществование электронным фазовым расслоением, похожим на то, которое наблюдается в арсенидах железа и купратах.

## Теоретические исследования

Конкуренция магнитного и сверхпроводящего упорядочений в соединениях на основе FeAs и FeSe изучалась также в теоретических работах [65, 80, 139–142]. Результаты этих исследований так или иначе подчеркнули ряд экспериментальных аспектов, характерных для сверхпроводников на основе железа: анизотропия СПП, его знакопеременность, свидетельства в пользу нетрадиционного (спин-флуктуационного) механизма формирования куперовских пар и другие. В работе [139] рассматривались фазовые переходы и возможное сосуществование ВСП и расширенной  $s$ -типа ( $s^{++}$ ) симметрии СПП в рамках приближения среднего поля двузонной микроскопической модели на примере соединений железа типа  $RELaAsO$  и  $AFe_2As_2$  ( $RE = \text{rare-earth}$ , редкоземельный элемент). Было показано, что, в зависимости от параметров, переход между этими двумя состояниями является либо фазовым переходом первого рода, либо включает промежуточную фазу, в которой два упорядочения сосуществуют. Отмечалось, что такое сосуществование возможно, когда ВСП упорядочение является несоизмеримым.

Авторы [65] рассматривали взаимное влияние сверхпроводимости и ВСП упорядочения в пниктидах железа путём анализа свободной энергии Гинзбурга-Ландау. Было показано, что на характер конкуренции магнитного и сверхпроводящего состояний в значительной степени влияют допирование и топология

поверхности Ферми. Если эллиптичность дырочного кармана, или разница  $\delta\mu$  электронного  $\mu_e$  и дырочного  $\mu_h$  хим. потенциалов невелики и есть идеальный нестинг, то переход между сверхпроводящим и соизмеримым и несоизмеримым ВСП порядками является фазовым переходом первого рода (как в случае знакопеременной  $s^\pm$ , так и обычной  $s^{++}$ -симметрий СПП, не зависящих от  $\mathbf{k}$ ). Сосуществование же магнитного и сверхпроводящего упорядочений возможно в том случае, если эллиптичность и разница  $\delta\mu$  реализуются одновременно.

Авторы работ [80, 140] рассматривали конкуренцию АФ упорядочения и сверхпроводимости с  $s^{++}$ - и  $s^\pm$ -симметрией СПП в приближении среднего поля гамильтониана слабой связи, учитывающего магнитное и спаривающее электронные взаимодействия, результаты сопоставлялись с измерениями нейтронной дифракции на  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ . Сравнивались фазовые диаграммы, построенные в переменных температура-допирование  $(T, x)$  отдельно для случаев  $s^{++}$  и  $s^\pm$  спариваний. В эксперименте в состоянии сосуществования двух упорядочений при  $T = T_c$  наблюдался пик магнитного параметра порядка, величина которого впоследствии уменьшалась при  $T < T_c$ , а при допировании  $x = 0,059$  заново появлялась парамагнитная фаза, когда магнитный дальнедействующий порядок уже был полностью подавлен. Теоретические расчёты показали возможность сосуществования двух упорядочений, если СПП имеет  $s^\pm$ -симметрию и спаривание носит нетрадиционный характер, а также повторное появление парамагнитной фазы, как это наблюдалось в эксперименте. В случае электрон-фононного взаимодействия и  $s^{++}$ -симметрии магнитный и сверхпроводящий порядки исключали друг друга, показывая гетерогенное сосуществование в узком диапазоне, а переход между ними являлся переходом первого рода. Фазовая диаграмма, построенная теоретически для случая  $s^\pm$ -симметрии оказалась в хорошем согласии с диаграммой, построенной экспериментально. Было показано, что  $d$ -симметрия, которая может реализовываться в пниктидах железа, менее конкурентоспособная с АФ порядком, чем  $s^\pm$ .

Конкуренция магнетизма и сверхпроводимости пниктидов железа изуча-

лась в работе [142] в приближении среднего поля трёхзонной  $t - J_1 - J_2$  модели. В переменных  $(T, n)$  была построена фазовая диаграмма модели, учитывающая антиферромагнитное ВСП упорядочение, имеющее страйповую структуру, и сверхпроводимость с  $s^\pm$ -симметрией СПП ( $s_{x^2y^2} \propto \cos k_x \cos k_y$  и  $s_{x^2+y^2} \propto \cos k_x + \cos k_y$ ). Результаты исследования показали, что сверхпроводимость и магнетизм могут сосуществовать при низких температурах в недодопированной области фазовой диаграммы, что находится в согласии с экспериментами на нескольких семействах пниктидов железа, а характер конкуренции носит орбитально-селективный характер. Авторами работы также отмечалось, что на стабильность ВСП и сверхпроводимости существенно влияет выбор констант обменного взаимодействия  $J_1$  и  $J_2$  и хундовской связи  $J_H$ .

Сосуществование АФ и сверхпроводимости в пниктидах железа изучалась в приближении среднего поля гамильтониана сильной связи для двух- и трёхорбитальных моделей в работе [141] с учётом кулоновской  $U$  и хундовской  $J$  связей. Было обнаружено, что как  $s^\pm$ -, так и  $s^{++}$ -симметрия СПП могут сосуществовать с АФ упорядочением.

## 1.4. Выводы к главе 1

Приведённый выше анализ литературных данных по конкуренции сверхпроводимости и магнетизма в высокотемпературных сверхпроводниках на основе пниктидов и халькогенидов железа и оксидов меди свидетельствует о существенной роли магнитного порядка, свойственного стехиометрическим составам соединений, в формировании куперовского спаривания, а также его конкуренции со сверхпроводящим состоянием. Результаты экспериментальных и теоретических исследований показывают, что в определённом интервале допирования и температур возможна стабилизация как микроскопического сосуществования обоих упорядочений, так и их макроскопического фазового расслоения. Распространённым ограничением существующих теоретических работ является то, что

они, как правило, не учитывают весь набор спиральных магнитных структур, которые могут реализоваться на квадратной решётке, не учитывают симметрии сверхпроводящего состояния вообще, либо не рассматривают возможность реализации смешанной симметрии СПП, хотя формирование и тех, и других было показано в большом количестве исследований. С этой точки зрения актуальной является задача построения фазовых диаграмм теоретических моделей, учитывающих сосуществование и фазовое расслоение между несоизмеримым магнитным порядком с различным волновым вектором спирали и сверхпроводимостью с различной симметрией СПП.

## Глава 2

# Симметрия сверхпроводящего параметра порядка

## 2.1. Постановка задачи

Несмотря на то, что исследованию конкуренции  $s$ - и  $d$ -спаривания в последние десятилетия уделялось значительное внимание, до сих пор не были построены полные фазовые диаграммы микроскопических моделей сверхпроводимости, учитывающие наряду с чистыми  $s$ - и  $d$ -симметриями СПП и их смесь при различных величинах параметра притяжения электронов и температуры. В некоторых работах конкуренция сверхпроводящих состояний с различной симметрией СПП исследована для выделенных параметров модели, другие не учитывают реализации состояний с промежуточной симметрией СПП, третьи не рассматривают характер фазового перехода между различными состояниями. В то же время данные экспериментальных исследований последних лет свидетельствуют в пользу формирования смешанных сверхпроводящих состояний. С учётом вышесказанного, актуальной задачей является рассмотрение формирования сверхпроводящих состояний с  $s$ - и  $d$ -симметриями СПП и реализации промежуточного  $s + id$ -состояния в широком диапазоне допирования, величины отношения интегралов переноса на вторую и первую координационные сферы  $t'/t$ , температуры и параметра взаимодействия, отвечающего за формирование куперовских пар.

Ниже рассматриваются условия стабилизации сверхпроводящих состояний с  $s$ -,  $d$ - и  $s + id$ -симметрией СПП квазидвумерных структур в рамках приближения среднего поля однозонной модели, учитывающей притяжение находящихся на соседних узлах электронов  $V_0$ , конечную температуру  $T$  и перескоки электронов на ближайших и вторых соседей с интегралами переноса  $t$  и  $t'$ , соответствен-

но. Результаты, представленные в этой главе, опубликованы в работах [143–145].

## 2.2. Формализм

### 2.2.1. Гамильтониан и параметр порядка

Гамильтониан рассматриваемой модели включает в себя кинетическую энергию переноса электронов с узла на узел и притягивающее взаимодействие пар электронов, находящихся на соседних узлах:

$$\mathcal{H} = \sum_{j,j',\sigma} t_{j,j'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} - \mu \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - V_0 \sum_{j,j'} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow}, \quad (2.1)$$

где  $t_{j,j'}$  — матричный элемент переноса электронов с узла  $j$  на узел  $j'$ ,  $c_{j,\sigma}^\dagger$  и  $c_{j,\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов на узле  $j$  со спином  $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ ,  $V_0$  — параметр, характеризующий притяжение электронов,  $\mu$  — химический потенциал. Мы считаем, что электроны могут испытывать перескоки только на первые и вторые ближайшие узлы с интегралами переноса  $-t$  и  $t'$  соответственно. Представим  $c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger$  в виде суммы  $\langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \rangle + \delta \left( c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \right)$ , где  $\langle \dots \rangle = \langle 0 | \dots | 0 \rangle$  — квантовомеханическое усреднение по основному состоянию гамильтониана, а  $\delta$  — флуктуации вблизи среднего значения. Считая флуктуации малыми, получим вид гамильтониана (2.1) в приближении Хартри–Фока (среднего поля):

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{j,j',\sigma} t_{j,j'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} - \mu \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - \\ & - V_0 \sum_{j,j'} \left( c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \langle c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} \rangle + \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \rangle c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} - \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} \rangle \right). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Введём параметр порядка с фазовым множителем  $V_0 \langle c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} \rangle \equiv \Delta_0 \frac{e^{i\phi_{j,j'}}}{2}$ , где  $\phi_{j,j'}$  — фазовый множитель,  $\Delta_0$  — вещественная амплитуда параметра порядка. Предполагая, что взаимодействие  $V_0$  происходит только на соседних узлах, а

фазовый множитель однороден и зависит только от расстояния между соседними узлами  $\mathbf{r}_{j'} - \mathbf{r}_j = \vec{\delta}$ , из (2.2) получим следующий гамильтониан:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{j,j',\sigma} t_{j,j'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} - \mu \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{j,\vec{\delta}} \left( \Delta_0 e^{i\phi_{\vec{\delta}}} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j+\vec{\delta},\downarrow}^\dagger + \Delta_0 e^{-i\phi_{\vec{\delta}}} c_{j+\vec{\delta},\downarrow} c_{j,\uparrow} \right) + \frac{N\Delta_0^2}{V_0}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Произведём преобразование Фурье

$$\begin{aligned} c_{j,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}, \\ c_{j,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где  $N$  — число узлов в системе, и введём обозначение  $\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \Delta_0 \sum_{\vec{\delta}} e^{i\mathbf{k}\vec{\delta}} e^{i\phi_{\vec{\delta}}}$ . В

таком случае гамильтониан (2.3) примет вид:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left( \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \right) + \frac{N\Delta_0^2}{V_0}, \quad (2.5)$$

где  $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$  — энергия, приходящаяся на одну частицу, отсчитываемая от уровня Ферми,  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y$  — закон дисперсии для квадратной решётки. Выбирая фазовый множитель в виде

$$\phi_{\vec{\delta}} = \begin{cases} \pi\alpha, & \vec{\delta} = (\pm\delta_x, 0), \\ -\pi\alpha, & \vec{\delta} = (0, \pm\delta_y), \end{cases} \quad (2.6)$$

где  $\delta_x$  и  $\delta_y$  — проекции  $\vec{\delta}$  на координатные оси, получим:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0[(\cos k_x + \cos k_y) \cos \pi\alpha + i(\cos k_x - \cos k_y) \sin \pi\alpha] \equiv \Delta_0 \eta_{\mathbf{k},\alpha}, \quad (2.7)$$

$$\Delta_0 = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k},\alpha}^* \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle.$$

Во ведённой параметризации относительные амплитуды  $s$ - и  $d$ -сверхпроводящих щелей могут быть определены как  $\Delta_0^s = \Delta_0 \cos \pi\alpha$  и  $\Delta_0^d = \Delta_0 \sin \pi\alpha$ . Из (2.7) видно, что  $\alpha = 0$  соответствует  $s$ -симметрии параметра порядка с  $\Delta_{\mathbf{k}}^{s-wave} = \Delta_0 (\cos k_x + \cos k_y)$ ,  $\alpha = 0,5$  —  $d$ -симметрии СПП с  $\Delta_{\mathbf{k}}^{d-wave} = \Delta_0 (\cos k_x - \cos k_y)$ , а при промежуточных значениях  $\alpha$  реализуется смешанное состояние  $s + id$ . Подчеркнём, что используемое нами обозначение « $s + id$ » является условным: соотношение амплитуд  $s$ - и  $d$ -состояний не является постоянным, конкретная величина  $\alpha$  изменяется в зависимости от параметров модели.

Формирование  $s + id$ -состояния обычно связывается с нарушением симметрии по отношению к операции обращения времени [146]. В работе [147] высказывалось предположение, что ответственным за такой эффект является Андреевское отражение. Однако, в данном случае  $s + id$ -симметрия не нарушает симметрию гамильтониана по отношению к обращению времени. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

Пусть  $\mathcal{T}$  — антиунитарный оператор обращения времени. Для многокомпонентной системы он определяется комплексным сопряжением и действием унитарного оператора  $\mathcal{B}$  (см., например, [148]):

$$\mathcal{T}\psi(t) = \mathcal{B}\overline{\psi(-t)}, \quad (2.8)$$

где комплексное сопряжение обозначается чертой сверху (в случае, если волновая функция  $\psi(t)$  не является многокомпонентной, то  $\mathcal{T}\psi(t) = \overline{\psi(-t)}$ ). Оператор инвариантен относительно операции обращения времени в том случае, если

он коммутирует с антиунитарным оператором обращения времени  $\mathcal{T}$ . Запишем коммутатор оператора  $\mathcal{T}$  с гамильтонианом  $\mathcal{H}$ :

$$[\mathcal{T}, \mathcal{H}]\psi(t) = (\mathcal{T}\mathcal{H} - \mathcal{H}\mathcal{T})\psi(t) = \overline{\mathcal{B}\mathcal{H}\psi(-t)} - \mathcal{H}\overline{\mathcal{B}\psi(-t)} = (\overline{\mathcal{B}\mathcal{H}} - \mathcal{H}\overline{\mathcal{B}})\overline{\psi(-t)}. \quad (2.9)$$

Пусть  $\mathcal{H} = \mathcal{A}\mathcal{H}'\mathcal{A}^{-1}$ , где  $\mathcal{H}'$  — вещественная диагональная матрица (самосопряжённый оператор всегда можно диагонализировать, причём собственные значения будут действительны), а  $\mathcal{A}$  — оператор, приводящий гамильтониан  $\mathcal{H}$  к диагональному виду  $\mathcal{H}'$ , тогда:

$$\overline{\mathcal{B}\mathcal{H}} - \mathcal{H}\overline{\mathcal{B}} = \overline{\mathcal{B}\mathcal{A}\mathcal{H}'\mathcal{A}^{-1}} - \mathcal{A}\mathcal{H}'\mathcal{A}^{-1}\overline{\mathcal{B}}. \quad (2.10)$$

Видно, что это выражение становится равно нулю, если  $\overline{\mathcal{B}} = \mathcal{A}\overline{\mathcal{A}}^{-1}$ . Таким образом, гамильтониан (2.1) инвариантен по отношению к операции обращения времени, которая определяется оператором (2.8).

Гамильтониан (2.5) можно привести к диагональному виду, воспользовавшись преобразованием Боголюбова [149]

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k},\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger, \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger &= -v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.11)$$

значит, оператор  $\mathcal{A}$  имеет вид:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Численные коэффициенты  $u_{\mathbf{k}}$  и  $v_{\mathbf{k}}$  выбраны так, что  $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ , а  $\gamma_{\mathbf{k}}$  — новые фермиевские операторы, описывающие элементарные квазичастичные возбуждения, возникающие в сверхпроводящей системе. Для того, чтобы гамильтониан принял диагональный по операторам  $(\gamma_{\mathbf{k}0}, \gamma_{\mathbf{k}1})$  вид, необходимо, чтобы

коэффициенты перед недиагональными членами были равны нулю. Отсюда получаем:

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (2.13)$$

$$E_{\mathbf{k}} = (\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2)^{1/2},$$

где  $E_{\mathbf{k}}$  — спектр квазичастичных возбуждений. Следовательно, оператор  $\mathcal{B}$  имеет вид:

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} \frac{E_{\mathbf{k}}(\Delta_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^*) - \xi_{\mathbf{k}}(\Delta_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^*)}{2E_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}}^*} & \frac{(E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}})^2}{2E_{\mathbf{k}}|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}(\Delta_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^*) \\ \frac{(E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}})^2}{2E_{\mathbf{k}}|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}(\Delta_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^*) & \frac{E_{\mathbf{k}}(\Delta_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^*) + \xi_{\mathbf{k}}(\Delta_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^*)}{2E_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

С учётом преобразования (2.11) в диагональном представлении гамильтониан (2.5) принимает вид:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}1}) + \frac{N\Delta_0^2}{V_0}. \quad (2.15)$$

Рассмотрим систему в двух отдельных случаях: при нуле температур  $T = 0$  и в случае конечных температур  $T \neq 0$ .

### 2.2.2. $T = 0$

При температуре системы  $T = 0$  К квазичастичные возбуждения отсутствуют и тогда получим:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) + \frac{N\Delta_0^2}{V_0}. \quad (2.16)$$

Для определения основного состояния системы необходимо минимизировать полную энергию системы  $E(n, \mu, \Delta_0) = \langle 0 | \mathcal{H} | 0 \rangle$  по отношению к параметру  $\alpha$  при заданном значении химпотенциала (энергии Ферми)  $\mu$ . Концентрация электронов  $n(\mu)$  и величина щели  $\Delta_0(\mu)$  определяются самосогласованно по

формулам

$$\begin{aligned}
n &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( 2|v_{\mathbf{k}}|^2 + (|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) \langle \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}1} + \gamma_{\mathbf{k}0}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}0} \rangle \right) \stackrel{T \rightarrow 0}{=} \\
&= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \tag{2.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta_0 &= \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}, \alpha}^* \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle, \\
\langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle &= \langle (-v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger + u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1}) (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger) \rangle = \\
&= u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \langle 1 - \gamma_{\mathbf{k}0}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}0} - \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}1} \rangle \stackrel{T \rightarrow 0}{=} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}, \tag{2.18} \\
\Rightarrow \Delta_0 &= \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}, \alpha}^* \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} |\eta_{\mathbf{k}, \alpha}|^2 \frac{\Delta_0}{2E_{\mathbf{k}}}.
\end{aligned}$$

### 2.2.3. Конечные температуры

В случае конечных температур для вычисления всех необходимых параметров, характеризующих сверхпроводящую систему, необходимо перейти к большому каноническому ансамблю и рассмотреть термодинамический потенциал системы:

$$\Omega = -T \ln \text{Tr} e^{-\langle \mathcal{H} \rangle / T}, \tag{2.19}$$

где  $T$  – температура,  $\text{Tr}$  – след матрицы. Гамильтониан (2.5) имеет диагональную форму, что позволяет записать термодинамический потенциал в простом виде:

$$\Omega = \frac{N \Delta_0^2}{V_0} + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - 2T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 + e^{-E_{\mathbf{k}}/T} \right). \tag{2.20}$$

Теперь минимизировать нужно не полную энергию, а термодинамический потенциал (2.20), и система самосогласованных уравнений на электронную плотность (2.17) и амплитуду сверхпроводящей щели (2.18) принимает вид:

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}}}{2T} \right], \quad (2.21)$$

$$\Delta_0 = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}, \alpha}^* \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} |\eta_{\mathbf{k}, \alpha}|^2 \frac{\Delta_0}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}}}{2T}. \quad (2.22)$$

Описанная процедура является более общей в сравнении с традиционным методом поиска  $\Delta_0^s$  и  $\Delta_0^d$  из системы самосогласованных уравнений (смотри, например, [88, 150]), и для многих протестированных наборов параметров даёт те же самые результаты.

### 2.3. Результаты

Минимизация гамильтониана (2.15) по отношению к параметру смешивания  $\alpha$  позволяет построить фазовые диаграммы основного состояния модели. На первом этапе исследований был рассмотрен случай нулевой температуры. На рис. 2.1, 2.2 и 2.3 представлены диаграммы при  $T = 0$  в переменных  $t'/t$  и  $n$  для значений  $V_0/t = 0,25, 0,5$  и  $1$ . Границы между фазами определялись на мелкой сетке параметров  $t'/t$  и  $\mu$ . Вычисление интегралов по зоне Бриллюэна проводилось на адаптивной сетке, что позволило вычислить  $\Delta_0/t$  с точностью порядка  $10^{-6}$ . Сверхпроводящим состояниям со значениями  $\Delta_0/t < 10^{-6}$ , для которых точность вычислений не позволяет определить параметры основного состояния, соответствуют заштрихованные области. Необходимо при этом подчеркнуть, что формирование нормального состояния ( $\Delta_0 = 0$ ) в рамках данной модели невозможно, так как любое сколь угодно малое притягивающее взаимодействие делает систему нестабильной по отношению к куперовскому спариванию [151].

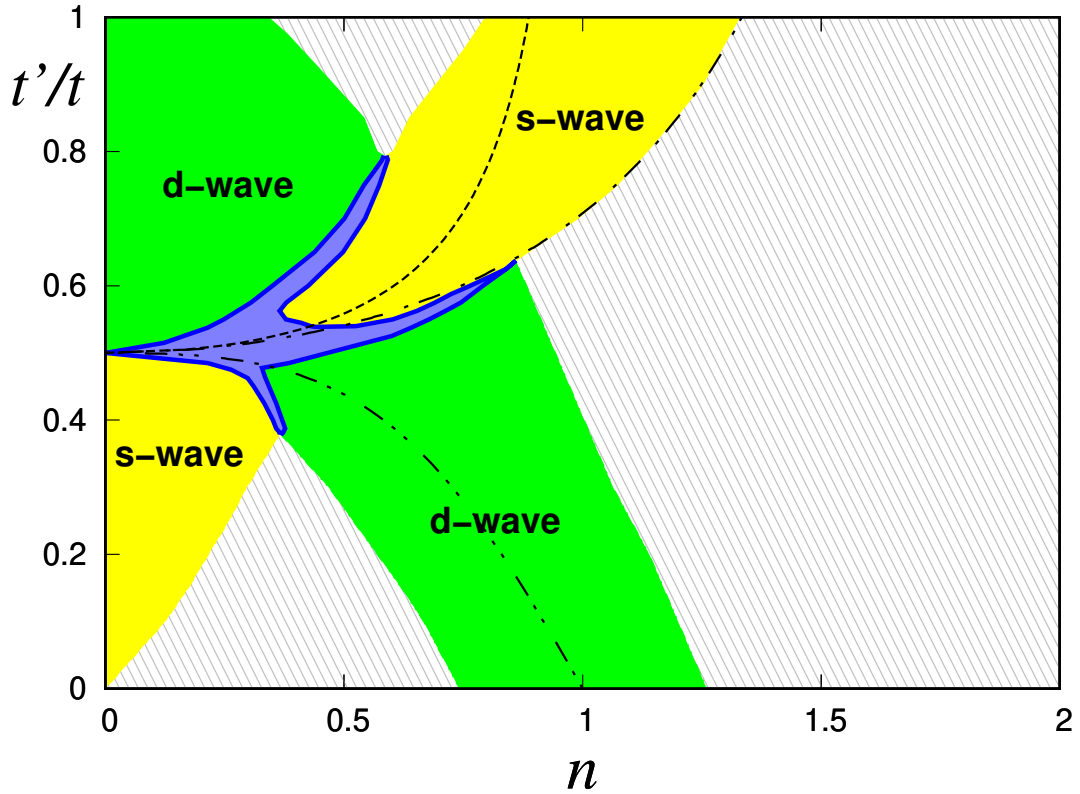


Рис. 2.1. Фазовая диаграмма сверхпроводящих состояний модели для квадратной решётки при  $T/t = 0$  и  $V_0/t = 0,25$ . Зелёным цветом закрашена область с  $d$ -симметрией сверхпроводящего параметра порядка, жёлтым — с  $s$ -симметрией, синим — со смешанной  $s + id$ -симметрией. Синими сплошными линиями обозначены линии фазового перехода второго рода. Штриховкой обозначена область, в которой точность расчётов не позволяет определить основное состояние, так как  $\Delta_0/t < 10^{-6}$ .

При всех рассмотренных значениях  $V_0/t$  формируются как состояния с чистыми  $s$ - или  $d$ -симметриями СПП, так и промежуточное  $s + id$ -состояние. Область, которую занимает  $s + id$ -фаза, увеличивается с ростом параметра притяжения  $V_0/t$ , а также с ростом  $t'/t$  и достигает максимальной ширины в интервале  $t'/t$  от 0,4 до 0,8. В этом же интервале  $t'/t$  чистое  $s$ -состояние формируется только вблизи потолка зоны  $n \rightarrow 2$  и занимает довольно узкую часть диаграммы. Наиболее широкие области  $s$ -состояния формируются в левом нижнем и правом нижнем углах диаграммы (дно и потолок зоны) при  $t'/t < 0,5$ , а также при  $t'/t \gtrsim 0,75$  вблизи половинного заполнения. Следует обратить внимание на особенность области фазовой диаграммы  $0,5 < t'/t < 0,75$  и  $0 < n < 1,25$ . Здесь смешанное состояние  $s + id$  разделяет две области с  $d$ -симметрией СПП,

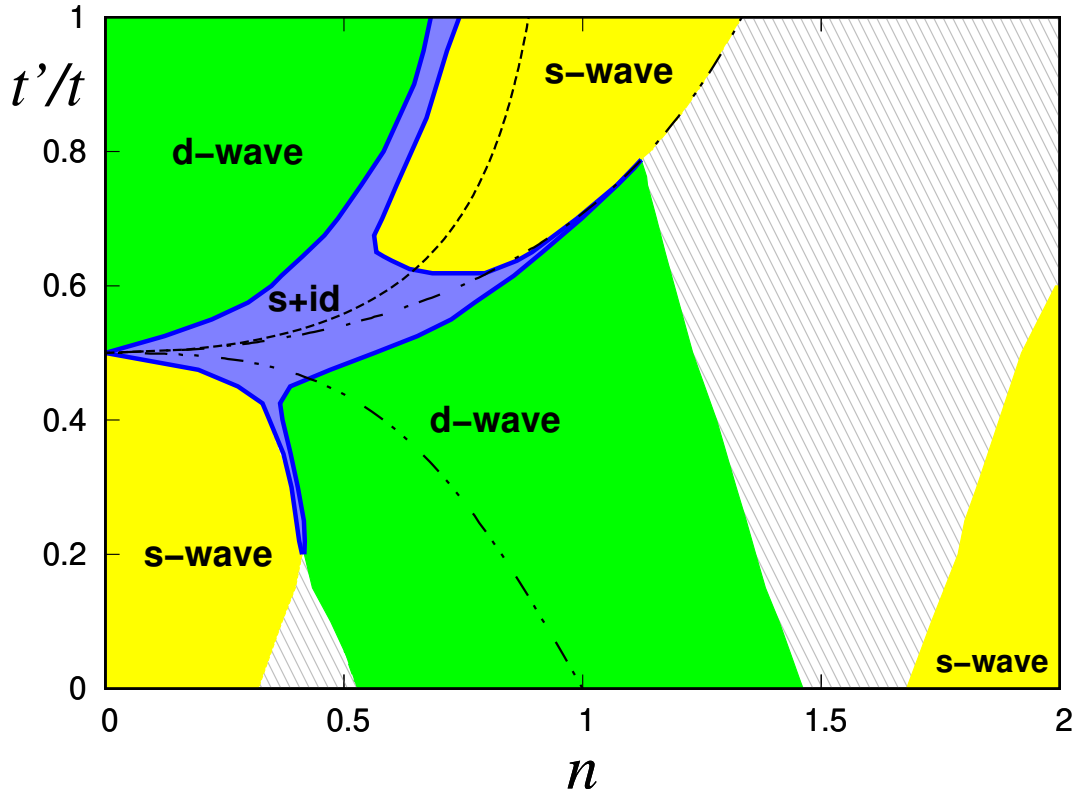


Рис. 2.2. Фазовая диаграмма сверхпроводящих состояний модели при  $T/t = 0$  и  $V_0/t = 0,5$ .

а не с  $s$  и  $d$ .

На диаграммах отсутствуют прямые переходы из состояния с  $s$ -симметрией сверхпроводящего параметра порядка в  $d$ . В противном случае, переход между двумя фазами сопровождался бы скачкообразной сменой симметрии, и можно было бы говорить о фазовом переходе первого рода и фазовом расслоении, что невозможно между двумя сверхпроводящими фазами. Наши расчёты показывают, что переход из одной фазы в другую во всей области рассмотренных параметров модели является непрерывным через промежуточную фазу  $s + id$  с плавным изменением  $\Delta_0$  и  $\alpha$ , то есть все фазовые переходы на полученных диаграммах являются переходами второго рода.

На диаграммах черными линиями отмечены сингулярности ван Хова — это особенности в плотности одночастичных состояний невзаимодействующих электронов

$$\rho(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \oint \frac{1}{4\pi^2} \frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}}|} \quad (2.23)$$

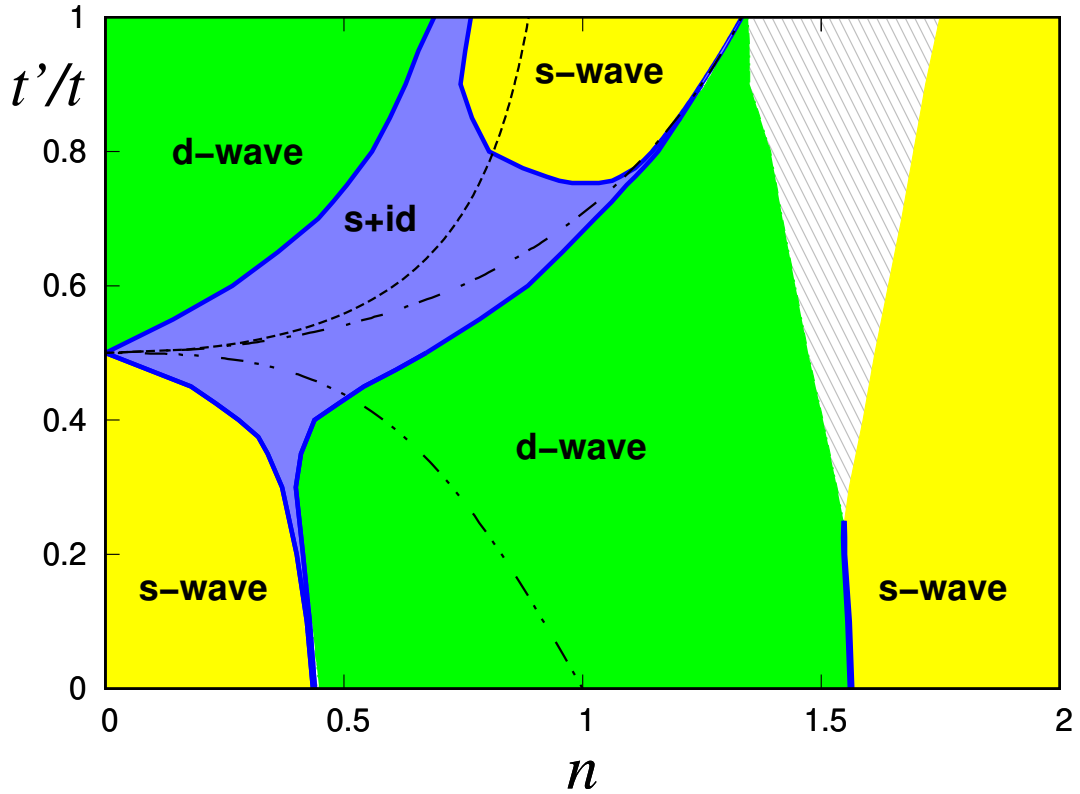


Рис. 2.3. Фазовая диаграмма сверхпроводящих состояний модели при  $T/t = 0$  и  $V_0/t = 1$ .

в которых электронная скорость  $\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}$  обращаются в нуль, где  $ds$  — элемент площади на изоэнергетической поверхности  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  в пространстве квазиимпульсов  $\mathbf{k}$ . Особенности будут определяться системой уравнений относительно волнового вектора  $\mathbf{k}$  зоны Бриллюэна  $\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$ . В случае квадратной решётки возможны три особенности: одна при  $t'/t < 0,5$  ( $\mu = -4t'$ ) и две при  $t'/t > 0,5$  ( $\mu = -4t + 4t'$  и  $\mu = -1/t'$ ). При  $t'/t = 0,5$  все три особенности сливаются в одну и располагаются на дне зоны  $n \rightarrow 0$ . Пунктирная линия обозначает концентрацию электронов для особенности при  $\mu = -1/t'$ , штрих-пунктирная — при  $\mu = -4t + 4t'$ , дважды штрих-пунктирная — при  $\mu = -4t'$ .

На рисунке 2.4 изображено распределение амплитуды СПП  $\Delta_0$  на диаграмме для  $V_0/t = 1$ . Видно, что максимум  $\Delta_0$  достигается при концентрациях, соответствующих сингулярностям Ван Хова, что согласуется со сценарием высокотемпературной сверхпроводимости, основанном на сингулярностях Ван Хова [152]. Максимальные величины  $\Delta_0$  для различных значений  $V_0/t$  приведены в таблице 2.1. Во всех трех случаях максимум  $\Delta_0$  соответствует состоянию

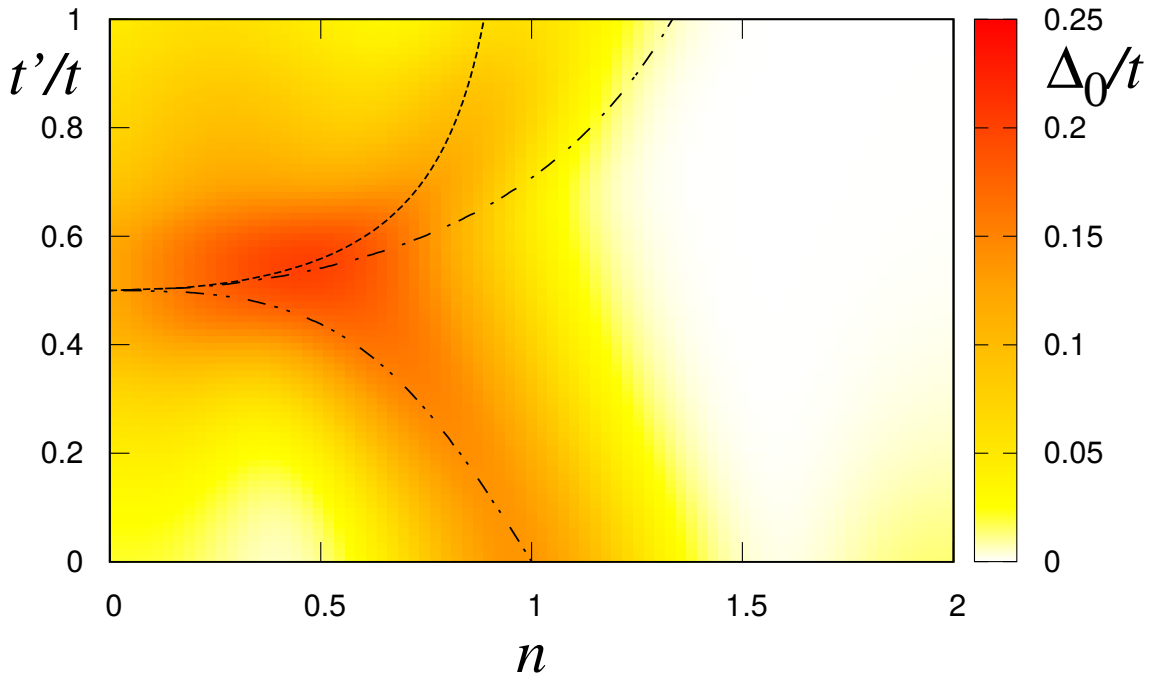


Рис. 2.4. Распределение амплитуды сверхпроводящей щели  $\Delta_0$ . Чёрные линии соответствуют сингулярностям Ван Хова.

с  $s + id$ -симметрией параметра порядка.

На рисунке 2.5 изображена зависимость относительной амплитуды  $s$ -состояния  $\cos \pi\alpha$  для  $t' = 0,7t$ . Пропорция  $s$ -состояния в  $s + id$ -фазе увеличивается с ростом концентрации, однако быстро уменьшается при приближении к границе с чистым  $d$ -состоянием. На границах между чистым  $d$ - и смешанным  $s + id$ -состоянием  $\Delta_0$  и  $\cos \pi\alpha$  меняются непрерывно, но их производные разрывны, это значит, что фазовые переходы между ними являются переходами второго рода. Это согласуется с результатами работ [89] и [90], в которых было показано наличие фазовых переходов второго рода между чистыми и смешанным  $s + id$ -состояниями.

Таблица 2.1. Максимальные значения  $\Delta_0$  и соответствующие им значения  $n$  при разных величинах  $V_0/t$  ( $t'/t = 0,5$ ).

$V_0/t$	$n$	$\Delta_0/t$	$\alpha$
0,25	0,189	0,031	0,340
0,5	0,293	0,084	0,480
1,0	0,383	0,226	0,580

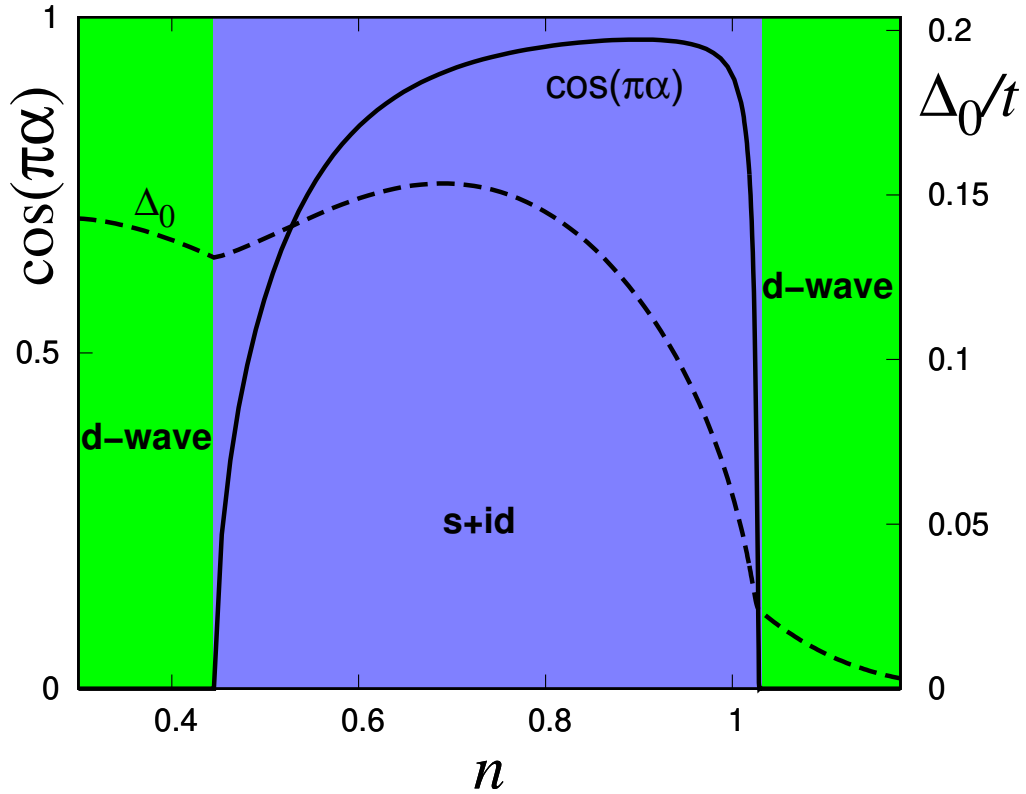


Рис. 2.5. Зависимость  $\cos \pi\alpha$  от концентрации  $n$  для  $t' = 0,7t$  (сплошная линия). Пунктирные линии обозначают амплитуду  $\Delta_0$ .

Полученные диаграммы качественно согласуются с диаграммами, построенными в работах [40, 98–100, 102] в рамках приближений слабой связи и RPA модели Хаббарда, учитывающей спиновые флуктуации. Это говорит о том, что симметрия решения, по-видимому, присуща модели и определяется геометрией решетки, а не механизмом сверхпроводимости.

На втором этапе исследований нами были проведены расчёты основного состояния модели при конечных температурах. Результаты расчётов представлены на диаграммах 2.6, 2.8, 2.10 и 2.7, 2.9, 2.11 для значений  $t'/t = 0,2$  и  $t'/t = 0,7$  соответственно. Данные значения интеграла переноса электронов на вторых ближайших соседей выбраны нами из следующих соображений:  $t'/t = 0,2$  соответствует высокотемпературным сверхпроводникам на основе оксидов меди [153], а  $t'/t = 0,7$  соответствует широкой области смешанной фазы  $s + id$  при  $V_0/t = 1$  (рис. 2.3), а также некоторым органическим сверхпроводникам [154]. В отличие диаграмм для  $T = 0$ , в случае конечных температур

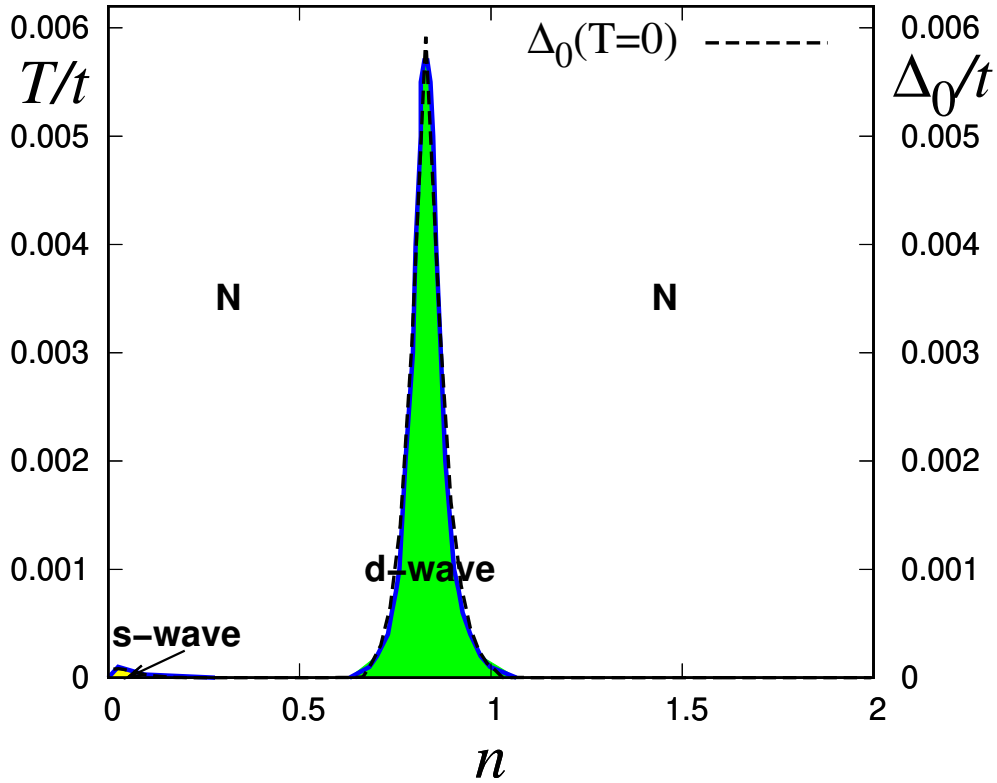


Рис. 2.6. Фазовая диаграмма модели в переменных  $(T, n)$  при  $t'/t = 0,2$  и  $V_0/t = 0,25$ . Обозначения сверхпроводящих состояний и характера переходов между ними соответствуют используемым на диаграммах основного состояния модели (см. рис. 2.1, 2.2, 2.3), однако, на температурных диаграммах присутствует не закрашенная область «N», соответствующая нормальному состоянию металла, а пунктирной линией обозначена зависимость  $\Delta_0(n, T = 0)$  величины сверхпроводящей щели  $\Delta_0$  от числа электронов на узле  $n$  при  $T = 0$  для иллюстрации соотношения БКШ  $\Delta_0 \sim T_c$ .

возможно появление нормального состояния.

Помимо фазовых границ на диаграммах изображены зависимости амплитуды сверхпроводящей щели  $\Delta_0$  основного состояния при  $T = 0$  от концентрации. Видно, что критическая температура перехода из сверхпроводящего в нормальное состояние коррелирует с величиной  $\Delta_0$ . Известно, что неустойчивость нормального Ферми-газа по отношению к куперовскому спариванию должна проявляться при  $\Delta_0 \sim T_c$  [155]. В теории БКШ, построенной на представлении об электрон-фононном механизме куперовского спаривания,  $\Delta_0 = 1,76T_c$ . В обзорах [156–158] приведены данные теоретических и экспериментальных исследований основных характеристик сверхпроводников на основе пниктидов железа и оксидов меди. В этих работах соотношение БКШ составляет для раз-

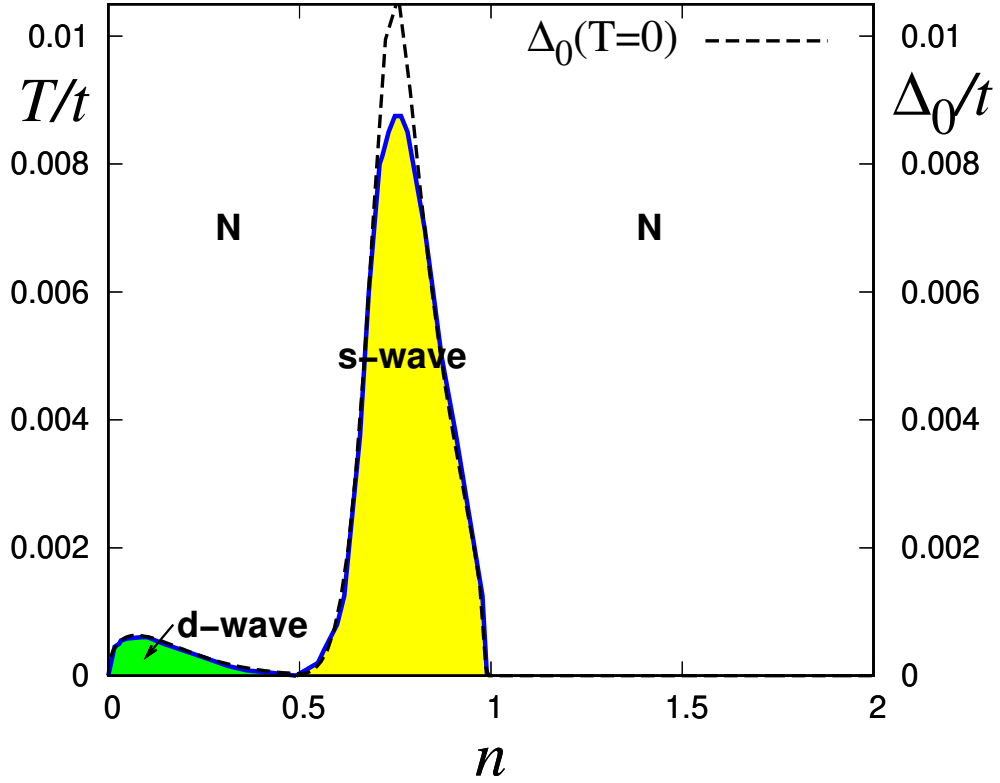


Рис. 2.7. Фазовая диаграмма модели в переменных  $(T, n)$  при  $t'/t = 0,7$  и  $V_0/t = 0,25$ .

ных систем на основе CuO  $\Delta_0/T_c \approx 0,5 \dots 7,0$  и для систем на основе FeAs  $\Delta_0/T_c \approx 0,5 \dots 3,0$ .  $\Delta_0$  как правило достигает единиц meV, реже десятков meV, критические температуры — десятки и сотни Кельвин. Из вида полученных фазовых диаграмм можно сделать вывод, что пропорциональное соотношение между амплитудой СПП и критической температурой справедливо и в рамках рассматриваемого в данной работе подхода, и составляет  $1 \leq \Delta_0/T_c \leq 1,4$ .

В наших расчётах энергетическая щель  $\Delta_0/t$  принимает значения по порядку величины от 0,001 и не более 0,1 (максимальное значение  $\Delta_0/t = 0,226$  в случае  $T/t = 0$ ,  $V_0/t = 1$ ,  $t'/t = 0,5$ ), температура  $T/t$  — в тех же пределах. Максимальные значения критической температуры и энергетической щели, а также параметра БКШ  $\Delta_0/t$  приведены в таблице 2.2.

Если принять величину интеграла переноса электронов на ближайшие соседние узлы  $t = 0,43$  eV [159], характерную для соединений на основе  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , а также принять во внимание, что  $1 \text{ eV} = 1,160 \cdot 10^4 \text{ K}$ , то величины примут значения, указанные в таблице 2.3.

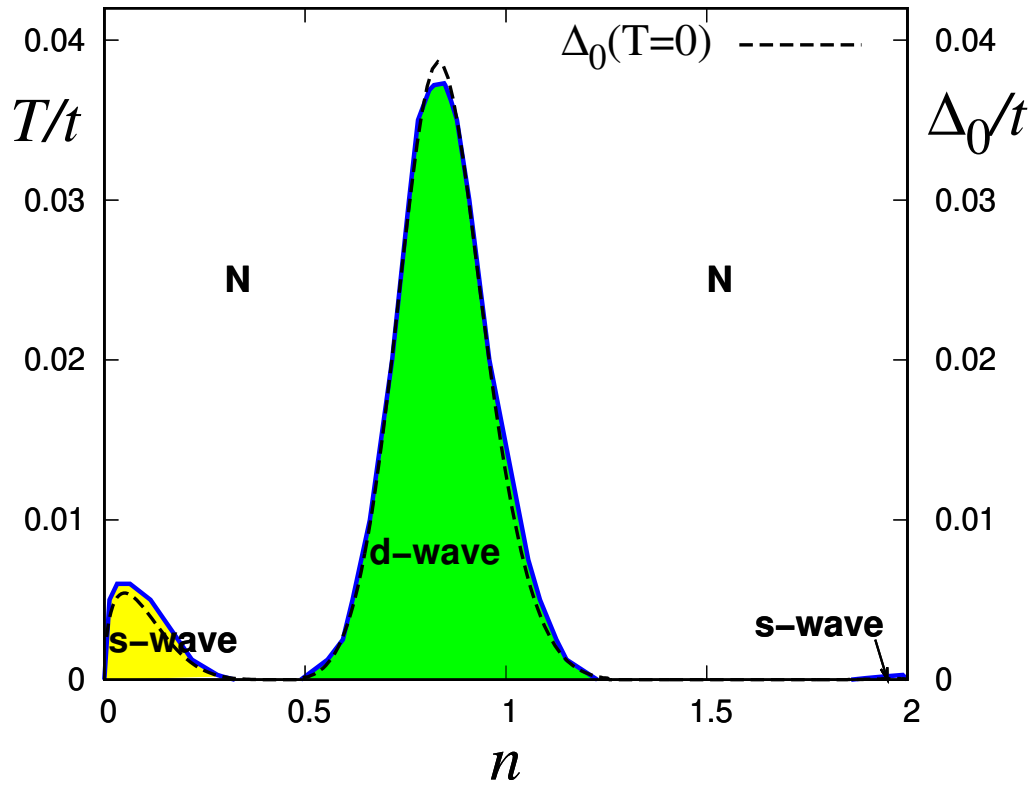


Рис. 2.8. Фазовая диаграмма модели в переменных  $(T, n)$  при  $t'/t = 0,2$  и  $V_0/t = 0,5$ .

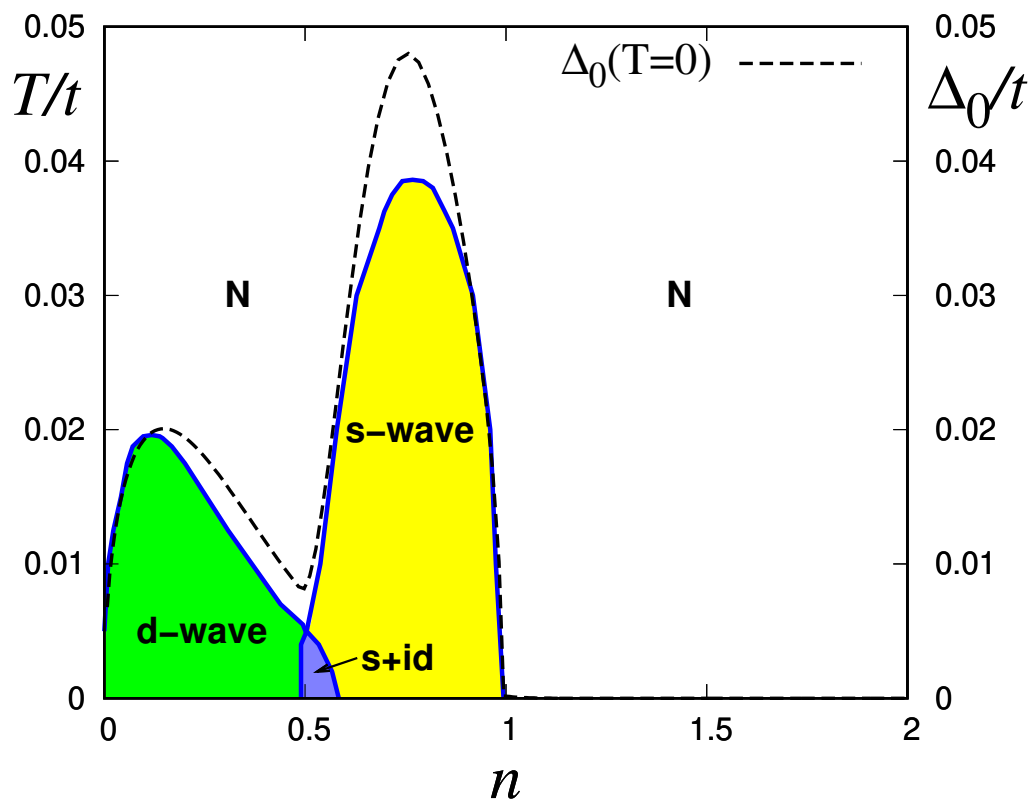


Рис. 2.9. Фазовая диаграмма модели в переменных  $(T, n)$  при  $t'/t = 0,7$  и  $V_0/t = 0,5$ .

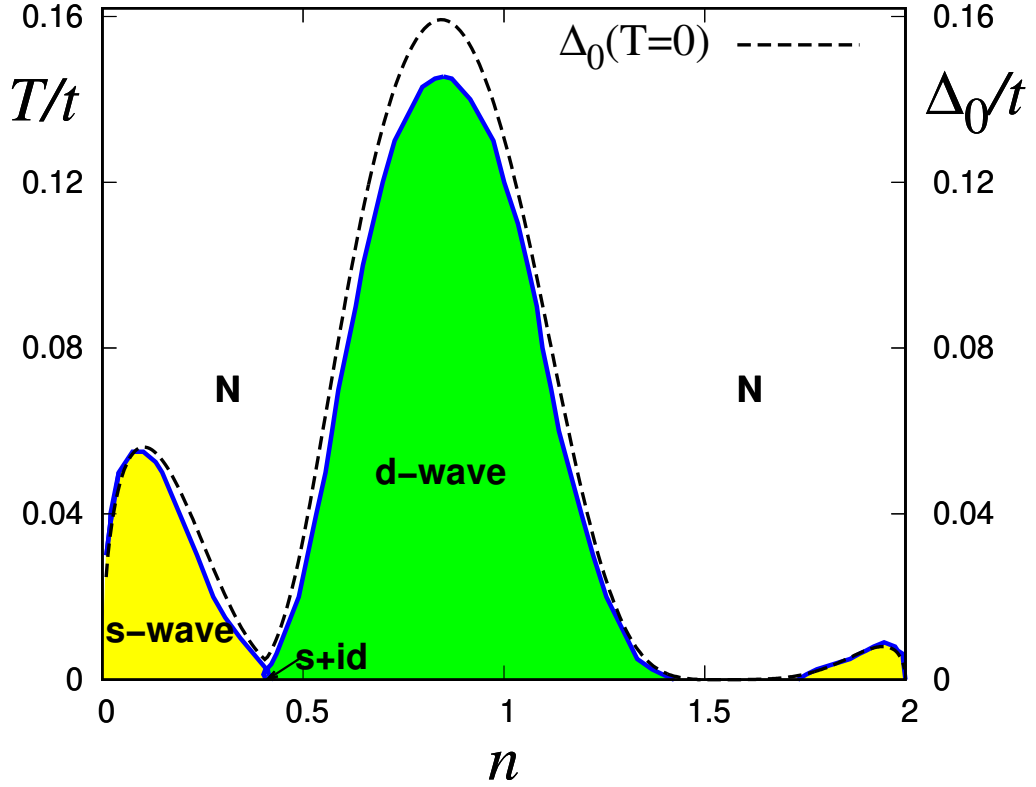


Рис. 2.10. Фазовая диаграмма модели в переменных  $(T, n)$  при  $t'/t = 0,2$  и  $V_0/t = 1,0$ .

Анализ приведённых данных позволяет сделать вывод, что реальным значениям энергетической щели и критической температуры сверхпроводящего перехода соответствуют параметры взаимодействия  $V_0 = 0,25t$  и  $V_0 = 0,5t$ , так как при них получаются сопоставимые с приведёнными в экспериментальных

Таблица 2.2. Максимальные значения  $\Delta_0/t$ ,  $T/t$  и соответствующие им  $n$  и коэффициенты БКШ  $\Delta_0/T_c$  для разных  $V_0/t$  и  $t'/t$ . Для  $V_0/t = 1,0$  указаны значения для двух пиков, соответствующих  $d$ - и  $s$ -симметрии, так как  $d_{x^2-y^2}$ -волновое спаривание для  $V_0/t = 1$  остаётся сильным при довольно высоких температурах.

$t'/t$	$V_0/t$	$T_c/t$	$\Delta_0/t$	$n$	$\Delta_0/T_c$	
0,2	0,25	0,0055	0,006	0,830	1,091	$d$ -wave
	0,5	0,037	0,038	0,829	1,027	$d$ -wave
	1,0	0,143	0,158	0,849	1,104	$d$ -wave
0,7	0,25	0,00875	0,0105	0,758	1,2	$s$ -wave
	0,5	0,0386	0,0479	0,765	1,241	$s$ -wave
	1,0	0,123	0,143	0,211	1,162	$d$ -wave
	1,0	0,111	0,154	0,751	1,387	$s$ -wave

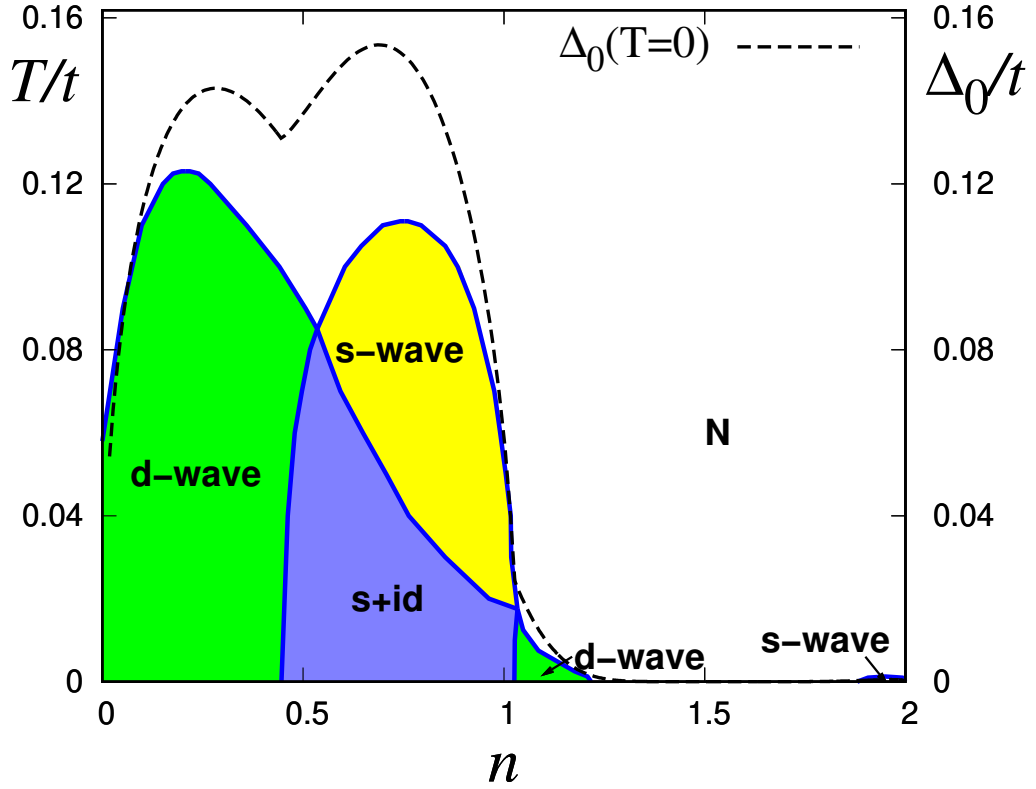


Рис. 2.11. Фазовая диаграмма модели в переменных  $(T, n)$  при  $t'/t = 0,7$  и  $V_0/t = 1,0$ .

работах данные. Например, при  $V_0 = 0,25t$  ( $V_0 = 0,11$  eV) данные примерно совпадают с результатами APRES для дырочно-допированного  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [160].

Максимальные значения  $T_c$  соответствуют фазам с наибольшей  $\Delta_0$  при  $T = 0$  для всех наборов  $t'/t$  и  $V_0/t$ , кроме  $V_0 = t$ ,  $t' = 0,7t$ . В этом случае наивысшая температура  $T_c$  достигается для  $d$ -симметрии СПП, в то время как наибольшей  $\Delta_0/t$  обладает  $s$ -состояние. С уменьшением параметра  $V_0/t$  эта особенность исчезает и  $T_c$  для  $d$ -состояния постепенно снижается.

Стабильность  $s$ -состояния при  $t' = 0,7t$  и  $d$ -состояния при  $t'/t = 0,2$  по отношению к уменьшению величины взаимодействия  $V_0/t$  может быть объясне-

Таблица 2.3. Максимальные значения  $\Delta_0, T$  в реальных единицах для  $t'/t = 0,2$ .

$t',$ eV	$V_0,$ eV	$T_c,$ eV	$T_c,$ K	$\Delta_0,$ eV	$n$	$\Delta_0/T_c$	
	0,11	0,0023	27,43	0,0026	0,830	1,091	$d$ -wave
0,86	0,215	0,016	185,6	0,016	0,829	1,027	$d$ -wave
	0,43	0,061	707,6	0,067	0,849	1,104	$d$ -wave

на близостью этих состояний к особенности Ван Хова. Для  $t'/t = 0,2$  особенность располагается при  $n_{vH} = 0,83$  и соответствует  $d$ -симметрии СПП, а для  $t'/t = 0,7$  их две: при  $n_{vH1} = 0,74$  и  $n_{vH2} = 0,98$ . В случае  $t'/t = 0,7$  максимум реализуется вблизи  $n_{vH1} = 0,74$  и соответствует  $s$ -симметрии СПП.

Диаграммы также показывают возможность смены симметрии при понижении температуры из чистого  $s$ - или  $d$ -состояния в промежуточное  $s + id$ . Такие переходы были обнаружены в одно- и двузонных системах и предлагались для интерпретации экспериментальных данных ВТСП на основе железа в работах [64,97], где для исследования конкуренции сверхпроводящих состояний применялись анализ свободной энергии Гинзбурга-Ландау и приближение RPA.

Важным следствием из построенных диаграмм является то, что область со смешанной  $s + id$ -симметрией СПП не граничит с областью нормального металла: переход в нормальное состояние всегда осуществляется из чистого  $s$ - или  $d$ -состояния. Данный результат находится в согласии с теорией фазовых переходов Ландау, согласно которой нормальная фаза может перейти только в такое состояние, которое преобразовывается по одному из неприводимых представлений точечной группы симметрии нормальной фазы. Это условие выполняется для чистых  $s$ - и  $d$ -фаз, но не выполняется для смешанного состояния, у которого нет инвариантности по отношению к комплексному сопряжению [155].

Следует также подчеркнуть, что для величины интеграла перескока на вторые соседние узлы  $t' = 0,2t$ , соответствующей ВТСП на основе оксидов меди, максимум критической температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  достигается при дырочном допировании  $\delta \sim 0,2$ , то есть лежит в области реального оптимального допирования. Это свидетельствует о том, что оптимальное допирование определяется положением особенности Ван Хова, а не специфическим механизмом формирования куперовских пар.

## 2.4. Выводы к главе 2

1. Впервые построены фазовые диаграммы сверхпроводящих состояний двумерной модели, учитывающей притяжение электронов, находящихся на соседних узлах, при нулевой температуре в широком диапазоне параметров.
2. Показано, что формирование сверхпроводящего состояния с промежуточной симметрией параметра порядка  $s + id$  может быть описано в рамках простого приближения Хартри–Фока. Состояния с  $s$ - и  $d$ -симметриями сверхпроводящего параметра порядка всегда разделены  $s + id$ -фазой, а переходы между всеми тремя состояниями являются фазовыми переходами второго рода с плавным изменением параметров  $\Delta_0$  и  $\alpha$ .
3. Впервые построены фазовые диаграммы модели при конечных температурах для различных значений отношения интегралов переноса  $t'/t$  и параметра притяжения  $V_0$  в широком диапазоне параметров.
4. Показано, что симметрия параметра порядка может меняться при изменении температуры.
5. Получено, что переход из нормального состояния в сверхпроводящее со смешанной  $s + id$ -симметрией параметра порядка невозможен: он всегда осуществляется через чистое  $s$ - или  $d$ -состояние.
6. Показано, что максимальные значения амплитуды сверхпроводящего параметра порядка  $\Delta_0$  и коррелирующей с ней температуры  $T_c$  сверхпроводящего перехода достигаются вблизи допирования, соответствующего особенностям Ван Хофа. Полученный результат свидетельствует о том, что оптимальное допирование зависит от положения особенности Ван Хофа и может определяться свойствами кристаллической решётки, а не специфическим механизмом образования куперовских пар.

## Глава 3

# Скошенное спиральное магнитное упорядочение в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

## 3.1. Постановка задачи

В Главе 1 описаны экспериментальные данные по магнитной структуре  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Это слоистое соединение, в котором межслойное обменное взаимодействие между плоскостями  $\text{CuO}$  значительно слабее внутрислойного взаимодействия. Магнитная структура соединения представляет собой неелевский антиферромагнитный порядок с дополнительным поперечным магнитным моментом с противоположным направлением на соседних слоях. Моменты, таким образом, оказываются скошены на угол  $0,17^\circ$  по отношению к плоскости  $xy$  (рис. 3.1,а). При допировании  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  стронцием скашивание сохраняется [113], а магнитный порядок внутри плоскости становится спиральным (см. главу 1). Результирующую магнитную структуру можно тогда представить в виде, изображенном на рис. 3.1,б.

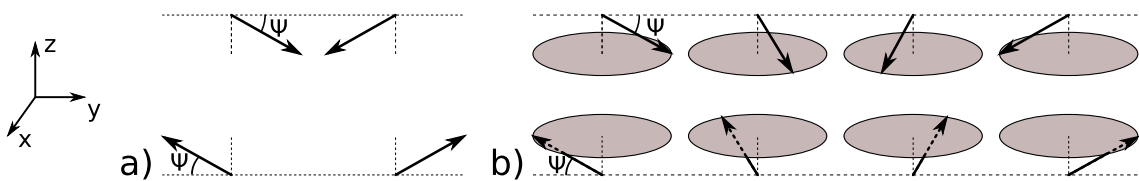


Рис. 3.1. Эскиз трёхмерной скошенной магнитной структуры: а) антиферромагнитной в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , б) спиральной в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Угол скашивания  $\psi$  по отношению к плоскостям  $xy$  слоёв  $\text{CuO}$  преувеличен.

Традиционно упорядочение такого типа связывается со взаимодействием Дзялошинского–Мория, которое порождается орторомбической структурой  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . В данной главе подобное магнитное упорядочение исследуется в рамках подхода, который основан лишь на простых приближениях модели Хаббарда и не учитывает спин-орбитального взаимодействия. Модель рассматривается

в трёхмерном случае в приближении Хартри–Фока с учётом спирального магнитного упорядочения. Величина интеграла внутрислойного переноса  $t_{xy}$  полагалась значительно превышающей величину межплоскостного  $t_z$ .

## 3.2. Формализм

Модель Хаббарда является традиционной при описании магнитных и проводящих свойств  $3d$ -металлов и соединений на их основе. Гамильтониан модели Хаббарда представляет собой сумму оператора кинетической энергии переноса свободных электронов с узла на узел  $\mathcal{K}$  и оператора потенциальной энергии кулоновского отталкивания электронов на узле  $\mathcal{U}$ :

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{K} + \mathcal{U}, \\ \mathcal{K} &= \sum_{j,j',\sigma} t_{j,j'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma}, \\ \mathcal{U} &= U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow},\end{aligned}\tag{3.1}$$

где  $t_{j,j'}$  — матричный элемент переноса электронов с узла  $j$  на узел  $j'$ ,  $c_{j,\sigma}^\dagger$  и  $c_{j,\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов на узле  $j$  со спином  $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ ,  $U$  — потенциал хаббардовского одноузельного отталкивания. Фактор Ланде и магнетон Бора принимаются равными единице. Для описания слоистой скошенной спиновой структуры слагаемые, входящие в гамильтониан (3.1), могут быть переписаны следующим образом:

$$\begin{aligned}\mathcal{K} &= \sum_{\alpha,\beta} \sum_{j,j',\sigma} t_{\alpha,\beta,j,j'} c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger c_{\beta,j',\sigma}, \\ \mathcal{U} &= U \sum_{\alpha,j} n_{\alpha,j,\uparrow} n_{\alpha,j,\downarrow},\end{aligned}\tag{3.2}$$

где введены номера плоскостей  $\alpha, \beta = 1, 2$ ,  $j, j'$  — номера соседних узлов внутри слоя,  $n_{\alpha,j,\sigma}$  — оператор числа электронов на узле  $j$  слоя  $\alpha$  со спином  $\sigma$ . С учётом

анизотропии свойств рассматриваемой системы выражение (3.2) может быть переписано путём отдельного учёта электронного переноса внутри и между плоскостями:

$$\mathcal{H} = t_{xy} \sum_{i,j,\sigma,\alpha} c_{\alpha,i,\sigma}^\dagger c_{\alpha,j,\sigma} + t_z \sum_{j,\sigma,\alpha,\beta} c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger c_{\beta,j,\sigma} + U \sum_{j,\alpha} n_{\alpha,j,\uparrow} n_{\alpha,j,\downarrow}, \quad (3.3)$$

где  $t_{xy}$  — матричный элемент перескока электронов с узла на узел внутри плоскости,  $t_z$  — между плоскостями. Мы предполагаем, что интеграл межплоскостного перескока электронов  $t_z$  по своей величине значительно мал по сравнению с интегралом перескока электронов внутри плоскости  $t_{xy}$ , а последний одинаковый для всех плоскостей. Производя преобразование Фурье (2.4), приходим к следующему виду оператора  $\mathcal{K}$ :

$$\mathcal{K} = \sum_{\alpha,\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{xy} c_{\alpha,\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\alpha,\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^z \left( c_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{2,\mathbf{k},\sigma} + c_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{1,\mathbf{k},\sigma} \right), \quad (3.4)$$

где

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{xy} = -2t_{xy} (\cos k_x + \cos k_y) + 4t'_{xy} (\cos k_x \cos k_y), \quad (3.5)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^z = -2t_z \cos k_z,$$

законы дисперсии внутри и между слоями, причём внутри слоя учитываются перескоки между ближайшими  $t_{xy}$  и вторыми  $t'_{xy}$  соседями. Рассмотрим зарядовую

$$n_{\alpha,j} = \sum_{\sigma} c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger c_{\alpha,j,\sigma} \quad (3.6)$$

и спиновую

$$\mathbf{S}_{\alpha,j} = \sum_{\sigma,\sigma'} c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma,\sigma'} c_{\alpha,j,\sigma'} \quad (3.7)$$

плотности на узле  $j$  слоя  $\alpha$  ( $\vec{\sigma}_{\sigma,\sigma'}$  — вектор матриц Паули):

$$\begin{aligned}
 n_{\alpha,j} &= n_{\alpha,j,\uparrow} + n_{\alpha,j,\downarrow}, \\
 S_{\alpha,j}^x &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma,\sigma'}^x c_{\alpha,j,\sigma'} = \frac{1}{2} \left( c_{\alpha,j,\uparrow}^\dagger c_{\alpha,j,\downarrow} + c_{\alpha,j,\downarrow}^\dagger c_{\alpha,j,\uparrow} \right), \\
 S_{\alpha,j}^y &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma,\sigma'}^y c_{\alpha,j,\sigma'} = \frac{1}{2i} \left( c_{\alpha,j,\uparrow}^\dagger c_{\alpha,j,\downarrow} - c_{\alpha,j,\downarrow}^\dagger c_{\alpha,j,\uparrow} \right), \\
 S_{\alpha,j}^z &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma,\sigma'}^z c_{\alpha,j,\sigma'} = \frac{1}{2} (n_{\alpha,j,\uparrow} - n_{\alpha,j,\downarrow}).
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Тогда с помощью тождества

$$n_{\alpha,j,\uparrow} n_{\alpha,j,\downarrow} = \frac{1}{4} (n_{\alpha,j,\uparrow} + n_{\alpha,j,\downarrow})^2 - \frac{1}{4} (n_{\alpha,j,\uparrow} - n_{\alpha,j,\downarrow})^2 \tag{3.9}$$

с учётом соотношений (3.8) оператор  $\mathcal{U}$  может быть переписан через операторы электронной и спиновой плотности:

$$\mathcal{U} = U \sum_{\alpha,j} \left( \frac{n_{\alpha,j}^2}{4} - S_{\alpha,j}^2 \right), \tag{3.10}$$

Обозначим  $\delta$  флуктуации оператора вблизи его среднего значения  $\langle \dots \rangle$ . Если считать зарядовые флуктуации малыми, то значения зарядовой плотности будут одними и теми же на всех узлах каждой подрешётки  $n = \langle n_{\alpha,j} \rangle$ . Тогда можно представить  $n_{\alpha,j}$  в виде  $n_{\alpha,j} = \langle n_{\alpha,j} \rangle + \delta n$  и

$$n_{\alpha,j}^2 \approx 2n n_{\alpha,j} - n^2. \tag{3.11}$$

Скошенная спиральная спиновая структура, изображённая на рисунке (3.1,б), в декартовых координатах может быть описана вектором

$$\mathbf{m}_{\alpha,j} = m \left( \cos \mathbf{Q}\mathbf{r}_j \cos \psi, \sin \mathbf{Q}\mathbf{r}_j \cos \psi, (-1)^{\alpha+1} \sin \psi \right) \equiv m \mathbf{e}_{\alpha,j}, \tag{3.12}$$

где  $\mathbf{Q}$  — волновой вектор спирали в плоскости  $xy$ ,  $\psi$  — его наклон по отношению к плоскости,  $m$  — средняя величина магнитного момента,  $\mathbf{e}_{\alpha,j}$  — ось квантования на узлах. Мы считаем, что спин на узле направлен вдоль оси квантования, то есть  $S_{\alpha,j}^z = \mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j}$ . Рассмотрим квадрат флуктуации спина на узле:

$$(\mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j} - m)^2 = (\mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j})^2 - 2m \mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j} + m^2. \quad (3.13)$$

Предполагая левую часть выражения малой, получим:

$$(\mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j})^2 \approx 2m \mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j} - m^2. \quad (3.14)$$

Пренебрежение флуктуациями операторов электронной и спиновой плотности второго порядка малости соответствует приближению Хартри–Фока, в котором, таким образом, оператор взаимодействия  $\mathcal{U}$  принимает вид:

$$\mathcal{U} = UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + 2U \sum_{\alpha,j} \left( \frac{n}{4} n_{\alpha,j} - m \mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j} \right), \quad (3.15)$$

Распишем явно скалярное произведение  $\mathbf{e}_{\alpha,j} \mathbf{S}_{\alpha,j}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{U} = & UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \frac{Un}{2} \sum_{\alpha,j} n_{\alpha,j} - \\ & - Um \sum_{\alpha,j} \left( S_{\alpha,j}^+ e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \cos \psi + S_{\alpha,j}^- e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \cos \psi + 2S_{\alpha,j}^z (-1)^{\alpha+1} \sin \psi \right), \end{aligned} \quad (3.16)$$

где  $S_{\alpha,j}^+ = S_{\alpha,j}^x + iS_{\alpha,j}^y = c_{\alpha,j,\downarrow}^\dagger c_{\alpha,j,\uparrow}$  и  $S_{\alpha,j}^- = S_{\alpha,j}^x - iS_{\alpha,j}^y = c_{\alpha,j,\uparrow}^\dagger c_{\alpha,j,\downarrow}$  — круговые спиновые операторы. Производя преобразования Фурье и переходя таким образом

в обратное пространство, получим к следующее представление оператора  $\mathcal{U}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{U} = & UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \frac{Un}{2} \sum_{\alpha, \mathbf{k}, \sigma} c_{\alpha, \mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\alpha, \mathbf{k}, \sigma} - \\ & -Um \sum_{\alpha, \mathbf{k}} (c_{\alpha, \mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\alpha, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow} \cos \psi + c_{\alpha, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow}^\dagger c_{\alpha, \mathbf{k}, \uparrow} \cos \psi + \\ & + (c_{\alpha, \mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\alpha, \mathbf{k}, \uparrow} + c_{\alpha, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow}^\dagger c_{\alpha, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow}) (-1)^{\alpha+1} \sin \psi). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Полный гамильтониан  $\mathcal{H} = \mathcal{K} + \mathcal{U}$  принимает вид квадратичной формы относительно операторов рождения и уничтожения  $c_{1, \mathbf{k}, \uparrow}$ ,  $c_{1, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow}$ ,  $c_{2, \mathbf{k}, \uparrow}$  и  $c_{2, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow}$ :

$$\mathcal{H} = UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}, \quad (3.18)$$

где вектор-строка  $\hat{\mathcal{C}}^\dagger = \left( c_{1, \mathbf{k}, \uparrow}^\dagger, c_{1, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow}^\dagger, c_{2, \mathbf{k}, \uparrow}^\dagger, c_{2, \mathbf{k}+\mathbf{Q}, \downarrow}^\dagger \right)$ , а  $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}$  представляет собой матрицу:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 - Um \sin \psi & -Um \cos \psi & \varepsilon_{\mathbf{k}}^z & 0 \\ -Um \cos \psi & \varepsilon_2 + Um \sin \psi & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^z \\ \varepsilon_{\mathbf{k}}^z & 0 & \varepsilon_1 + Um \sin \psi & -Um \cos \psi \\ 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^z & -Um \cos \psi & \varepsilon_2 - Um \sin \psi, \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_{\mathbf{k}}^{xy} + \frac{Un}{2}, \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{xy} + \frac{Un}{2} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Для диагонализации гамильтониана необходимо решить характеристическое уравнение четвёртой степени по  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ :

$$\det \left( \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{I} \right) = 0, \quad (3.21)$$

где  $\hat{I}$  — единичная матрица. Уравнение (3.21) можно представить в следующей форме:

$$A\varepsilon_{\mathbf{k}}^4 + B\varepsilon_{\mathbf{k}}^3 + C\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + D\varepsilon_{\mathbf{k}} + F = 0, \quad (3.22)$$

где

$$\begin{aligned} A &= 1, B = -(a + b + c + d), \\ C &= ab + ac + bc + ad + bd + cd - 2g^2 - z^2 - z_Q^2, \\ D &= -abc - abd - acd - bcd + ag^2 + \\ &+ bg^2 + cg^2 + dg^2 + bz^2 + dz^2 + az_Q^2 + cz_Q^2, \\ F &= abcd - abg^2 - cdg^2 + g^4 - \\ &- bdz^2 - 2g^2zz_Q - acz_Q^2 + z^2z_Q^2. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Здесь в свою очередь

$$\begin{aligned} a &= \varepsilon_1 - Um \sin \psi, \\ b &= \varepsilon_2 + Um \sin \psi, \\ c &= \varepsilon_1 + Um \sin \psi, \\ d &= \varepsilon_2 - Um \sin \psi, \\ z &= \varepsilon_{\mathbf{k}}^z, \\ z_Q &= \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^z, \\ g &= -Um \cos \psi. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Для решения уравнения использовался метод Феррари, суть которого заключается в понижении порядка уравнения и отыскания его кубической резольвенты. В свою очередь, для последнего была применена формула Кардано. Таким образом, были получены выражения для собственных чисел  $\varepsilon_{\mathbf{k},l}$  и собственных векторов  $T_{\mathbf{k},lm}$  в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Гамильтониан (3.18) в диагональном представ-

лении имеет вид:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}} = \\
&= UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{T}_{\mathbf{k}} \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \hat{T}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}} = \\
&= UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \hat{A}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \hat{A}_{\mathbf{k}},
\end{aligned} \tag{3.25}$$

где:

$$\begin{aligned}
\hat{A}^{\dagger} &= \hat{\mathcal{C}}^{\dagger} \hat{T}, \quad \hat{A} = \hat{T}^{\dagger} \hat{\mathcal{C}}, \\
\hat{\varepsilon} &= \hat{T}^{\dagger} \hat{\mathcal{H}} \hat{T}, \\
c_m^{\dagger} &= \sum_l A_l^{\dagger} T_{lm}^{\dagger}, \quad c_m = \sum_l T_{ml} A_l.
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Диагональное представление описывает невзаимодействующую систему, поэтому количество частиц в этом представлении подчиняется распределению Ферми–Дирака:

$$\begin{aligned}
n_{\mathbf{k},l}^A &= \langle A_{\mathbf{k},l}^{\dagger} A_{\mathbf{k},l} \rangle = f(\varepsilon_{\mathbf{k},l}), \\
f(\varepsilon_{\mathbf{k},l}) &= \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k},l} - \mu}{T}\right) + 1},
\end{aligned} \tag{3.27}$$

которое при  $T = 0$  вырождается в ступенчатую функцию Хевисайда  $\Theta(\varepsilon_{\mathbf{k},l} - \mu)$ .

Тогда полная энергия:

$$\begin{aligned}
E &= UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \langle \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}} \rangle = UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \langle \sum_{\mathbf{k}} \hat{A}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \hat{A}_{\mathbf{k}} \rangle = \\
&= UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \langle \sum_{\mathbf{k},l} \varepsilon_{\mathbf{k},l} A_{\mathbf{k},l}^{\dagger} A_{\mathbf{k},l} \rangle = UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \sum_{\mathbf{k},l} \varepsilon_{\mathbf{k},l} f(\varepsilon_{\mathbf{k},l}).
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Концентрация электронов:

$$\begin{aligned}
 n &= \frac{1}{N} \sum_{\alpha,j,\sigma} \langle n_{\alpha,j,\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha,j,\sigma} \langle c_{\alpha,j,\sigma}^\dagger c_{\alpha,j,\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha,\mathbf{k},\sigma} \langle c_{\alpha,\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\alpha,\mathbf{k},\sigma} \rangle = \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},l,l',m} \langle A_{\mathbf{k},l}^\dagger T_{\mathbf{k},lm}^\dagger T_{\mathbf{k},ml'} A_{\mathbf{k},l'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},l} \langle A_{\mathbf{k},l}^\dagger A_{\mathbf{k},l} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},l} f(\varepsilon_{\mathbf{k},l}).
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

Проекция средней величины магнитного момента  $\mathbf{m}_{\alpha,j}$  на оси  $x$  и  $y$ :

$$\begin{aligned}
 m_{\alpha,j}^x &= \langle S_{\alpha,j}^x \rangle = m \cos \mathbf{Qr}_j \cos \psi, \\
 m_{\alpha,j}^y &= \langle S_{\alpha,j}^y \rangle = m \sin \mathbf{Qr}_j \cos \psi.
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

Среднее значение оператора  $S_{\alpha,j}^+$ :

$$\langle S_{\alpha,j}^+ \rangle = \langle S_{\alpha,j}^x \rangle + i \langle S_{\alpha,j}^y \rangle = m \cos \mathbf{Qr}_j \cos \psi + im \sin \mathbf{Qr}_j \cos \psi = m \cos \psi e^{i\mathbf{Qr}_j}. \tag{3.31}$$

Тогда получим отсюда уравнение для величины магнитного момента:

$$m = \frac{1}{N \cos \psi} \sum_{\alpha,j} \langle S_{\alpha,j}^+ \rangle e^{-i\mathbf{Qr}_j} = \frac{1}{N \cos \psi} \sum_{\alpha,j} \langle c_{\alpha,j,\uparrow}^\dagger c_{\alpha,j,\downarrow} \rangle e^{-i\mathbf{Qr}_j}. \tag{3.32}$$

Производя преобразование Фурье и учитывая (3.26), получим:

$$\begin{aligned}
 m &= \frac{1}{N \cos \psi} \sum_{\alpha,\mathbf{k}} \langle c_{\alpha,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\alpha,\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow} \rangle = \\
 &= \frac{1}{N \cos \psi} \sum_{\mathbf{k},l,l'} \langle T_{\mathbf{k},l1}^\dagger T_{\mathbf{k},2l'} A_{\mathbf{k},l}^\dagger A_{\mathbf{k},l'} + T_{\mathbf{k},l3}^\dagger T_{\mathbf{k},4l'} A_{\mathbf{k},l}^\dagger A_{\mathbf{k},l'} \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

Отсюда с учётом (3.27) следует:

$$\begin{aligned}
 m &= \frac{1}{N \cos \psi} \sum_{\mathbf{k},l} \left( T_{\mathbf{k},l1}^\dagger T_{\mathbf{k},2l} + T_{\mathbf{k},l3}^\dagger T_{\mathbf{k},4l} \right) f(\varepsilon_{\mathbf{k},l}) = \\
 &= \frac{1}{N \cos \psi} \sum_{\mathbf{k},l} \left( T_{\mathbf{k},1l}^* T_{\mathbf{k},2l} + T_{\mathbf{k},3l}^* T_{\mathbf{k},4l} \right) f(\varepsilon_{\mathbf{k},l}).
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Чтобы найти основное состояние системы при заданных параметрах  $n$ ,  $U$ ,  $t_{xy}$ ,  $t'_{xy}$ ,  $t_z$ , следует минимизировать полную энергию системы (3.28) по всем возможным  $\mathbf{Q}$  и  $\psi$ . Для этого необходимо самосогласованно решить систему уравнений относительно числа электронов  $n$  и магнитного момента  $m$ :

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, l} f(\varepsilon_{\mathbf{k}, l}), \\ m &= \frac{1}{N \cos \psi} \sum_{\mathbf{k}, l} (T_{\mathbf{k}, 1l}^* T_{\mathbf{k}, 2l} + T_{\mathbf{k}, 3l}^* T_{\mathbf{k}, 4l}) f(\varepsilon_{\mathbf{k}, l}). \end{aligned} \quad (3.35)$$

### 3.3. Результаты

Магнитная фазовая диаграмма основного состояния двумерной однозонной модели Хаббарда в приближении Хартри–Фока для  $t'/t = 0,2$ , что примерно соответствует  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , была построена в работе [161], и приведена на рисунке 3.2. Учитывались спиральные спиновые состояния с различными волновыми векторами без скошенности магнитной структуры (т. е. при  $\psi = 0$ ) и при отсутствии межслойного переноса  $t_z$ . В этом случае гамильтониан модели записывается для одного слоя (так как они все считаются эквивалентными) и имеет традиционный вид (3.1). Главный вывод работы заключается в том, что спиральные магнитные структуры являются основным состоянием в широком диапазоне параметров модели, причём вблизи половинного заполнения имеется тенденция к фазовому расслоению между состояниями с различными волновыми векторами спирали. Полученные результаты на качественном уровне с экспериментальными данными для зависимости магнитной структуры от уровня допирования в соединении  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Воспроизводится цепочка магнитных фазовых переходов, реально наблюдаемая в эксперименте (при  $U/t \approx 5$ , например):  $(Q, \pi) \rightarrow (Q, Q) + (Q, \pi) \rightarrow (Q, Q) \rightarrow (Q, Q) + \text{АФ}$ .

Диаграмма построена в переменных отношения величины хаббардовского отталкивания одноузельных электронов к интегралу переноса на первую координационную сферу  $U/t$  и электронной плотности на узле  $n$ . В дырочно-

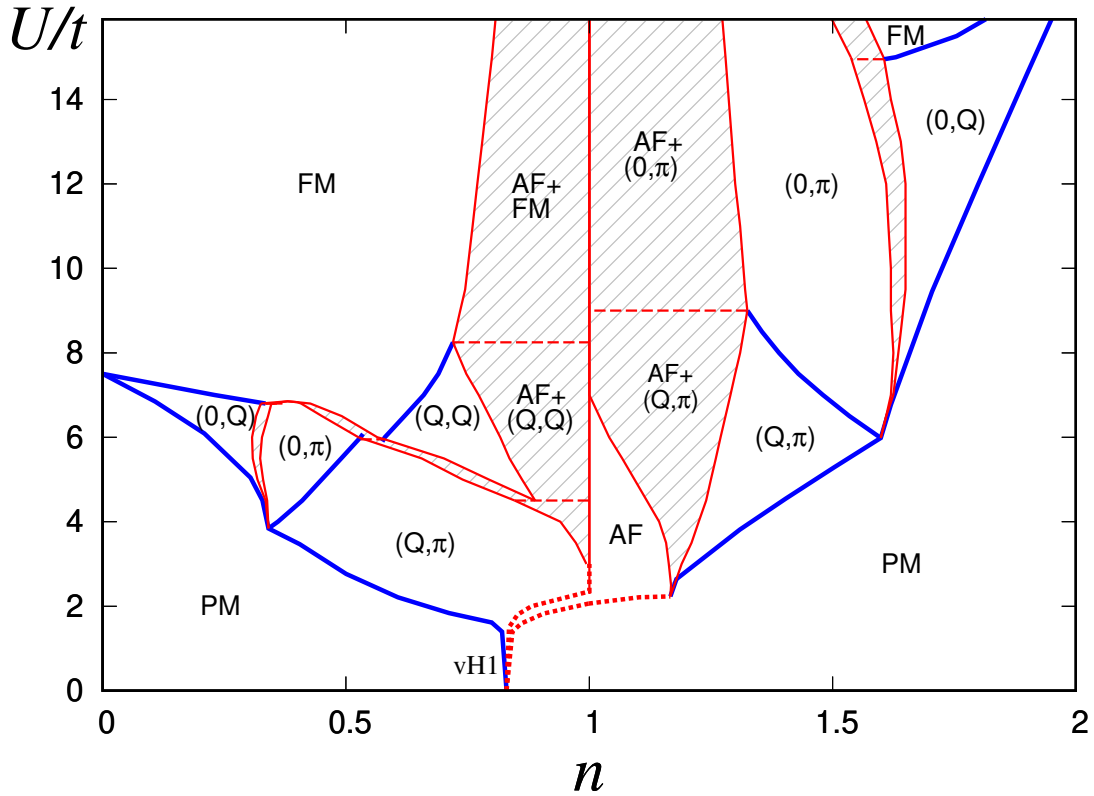


Рис. 3.2. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния двумерной модели Хаббарда в приближении Хартри–Фока для  $t'/t = 0,2$ , построенная в работе [162]. Синими линиями обозначены границы фазовых переходов второго рода, тонкими красными линиями обозначены границы областей фазового расслоения (заштрихованы) и фазовых переходов первого рода, жирными пунктирными красными линиями обозначены линии узких областей фазового расслоения и переходов первого рода. Горизонтальные пунктирные линии обозначают переходы между смешанными состояниями различных типов. Области расслоения на фазы  $\Phi 1$  и  $\Phi 2$  обозначены как « $\Phi 1 + \Phi 2$ ».

допированной части диаграммы обширную область при  $U/t > 6$  занимает ферромагнитное состояние, вблизи половинного заполнения реализуется широкая область фазового расслоения между неелевской антиферромагнитной и ферромагнитной фазами. Чистое антиферромагнитное состояние наблюдается только на линии половинного заполнения  $n = 1$ . При  $U/t < 6$  формируется большое число спиральных состояний:  $(0, Q)$ ,  $(0, \pi)$ ,  $(Q, \pi)$  и  $(Q, Q)$ , а также фазовое расслоение между ними и с антиферромагнитным упорядочением. Следует отметить, что при  $U/t \lesssim 2$  для  $n < 1$  антиферромагнитное состояние занимает широкий диапазон по  $n$  и не обнаруживается на линии половинного заполнения (существует критическое конечное значение  $U/t$  для неелевского антиферромаг-

нитного состояния при половинном заполнении).

В области диаграммы, соответствующей допированию электронами, ферромагнитное состояние реализуется только при достаточно высоких  $U/t \gtrsim 15$ , основную часть диаграммы занимают спиральные состояния, значительную часть занимает область парамагнитной фазы. При  $2 < U/t < 7$  вблизи половинного заполнения при  $1 \leq n \leq 1,2$  реализуется антиферромагнитная фаза. Для  $U/t > 3$  имеется область фазового расслоения антиферромагнитной и параллельной спиральных фаз ( $(Q, \pi)$  для  $3 < U/t < 8$  и  $(0, \pi)$  для  $U/t > 8$ ).

Наше исследование скошенной спиральной спиновой структуры было сфокусировано на дырочно-допированной области этой диаграммы, которая включает ферромагнитную, антиферромагнитную,  $(Q, Q)$  и  $(Q, \pi)$  магнитные фазы. Исследованные значения  $U/t$  примерно соответствовали реальным значениям для купратов, которые лежат в пределах от 5 до 20, в соответствии с первопринципными расчётами [163]. Значение параметра перескока  $t_z$  принималось равным  $0,1t_{xy}$ . Мы рассматривали как  $(Q, Q)$ , так и  $(Q, \pi)$  спиральные состояния, чтобы определить, может ли добавление слабого межплоскостного переноса электронов стабилизировать скошенное спиральное магнитное упорядочение. Технически это сводилось к поиску (для некоторых параметров  $U/t, n$ ) значения  $Q$  для каждого направления вектора  $\mathbf{Q}$ , при котором достигается минимальное значение энергии системы (3.28) при  $\psi = 0$ , и последующему определению угла  $\psi$ , который для этого  $Q$  минимизирует энергию (3.28).

Наше исследование показало, что скашивание энергетически не выгодно для состояния  $(Q, Q)$  для всех изученных параметров. Однако для состояния  $(Q, \pi)$  наблюдается другая ситуация. На рисунке 3.3 представлена зависимость полной энергии  $E$  от угла скашивания  $\psi$  при фиксированных параметрах  $U/t_{xy} = 10$ ,  $n = 0,9$ ,  $t'_{xy}/t_{xy} = 0,2$ ,  $t_z/t_{xy} = 0,1$ ,  $\mathbf{Q} = (0,65\pi, \pi)$ . Минимум энергии соответствует  $\psi = 0,14\pi$ , что означает, что скошенное спиральное состояние является наиболее выгодным среди состояний  $(Q, \pi)$ . Следует отметить, что это не основное состояние, а метастабильное, так как фазовое расслоение между АФ

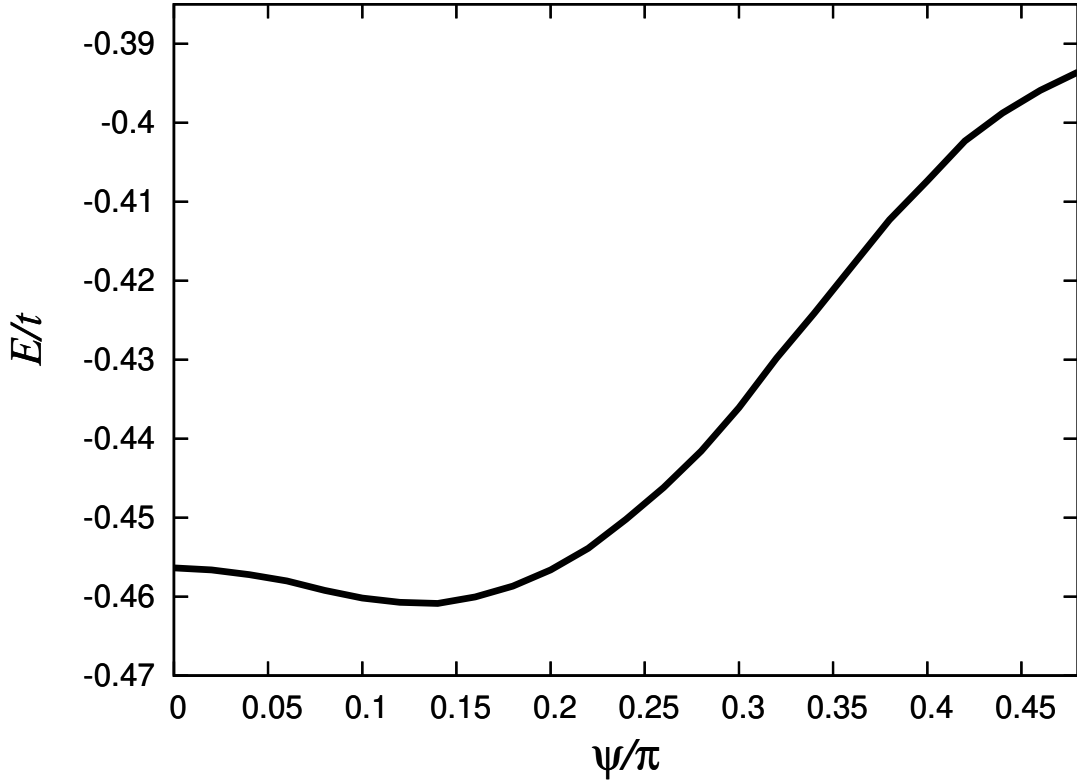


Рис. 3.3. Зависимость полной энергии  $E$  от угла скашивания  $\psi$  при  $U/t_{xy} = 10$ ,  $n = 0,9$ ,  $t'_{xy}/t_{xy} = 0,2$ ,  $t_z = 0,1/t_{xy}$ ,  $\mathbf{Q} = (0,65\pi, \pi)$ .

и ФМ фазами остаётся более выгодным, как в двумерном случае [161].

Найденный нами угол скашивания значительно превышает экспериментальный, который равен  $0,17^\circ$ . Проведенное нами исследование показывает, что значение  $\psi$  уменьшается при увеличении  $n$  либо уменьшении  $U/t$ . Можно, таким образом, добиться совпадения с экспериментальным углом подбором параметров модели. Данная задача, однако, не ставилась, потому что экспериментальный угол настолько мал, что точность расчетов не позволяет отличить его от нуля.

Наши результаты могут быть качественно соотнесены с результатами работы [164], где изучалась стабильность  $(Q, Q)$  и  $(Q, \pi)$  фаз по отношению к поперечным спиновым флуктуациям для малых  $t'/t$  и допирования. Было обнаружено, что из этих двух состояний только  $(Q, \pi)$  является неустойчивым и имеет тенденцию к образованию некомпланарной спиновой конфигурации.

Полученные результаты указывают на возможность стабилизации скошен-

ного спирального магнитного состояния в системе слабо связанных между собой слоев в простой модели Хаббарда без учёта спин-орбитального взаимодействия. Таким образом мы продемонстрировали альтернативный нерелятивистский механизм формирования магнитной структуры, наблюдаемой в соединениях типа  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , не учитывающий взаимодействия Дзялошинского–Мория.

### 3.4. Выводы к главе 3

1. В рамках приближения Хартри–Фока для трёхмерной однозонной модели Хаббарда с малым значением интеграла межслойного переноса показано, что в определённых областях параметров модели ( $U/t = 9 - 12$ ,  $n = 0.8 - 1.0$ ), характерных для соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , возможно формирование скошенного спирального магнитного состояния.
2. Рассмотренный механизм образования скошенной структуры является альтернативой взаимодействию Дзялошинского–Мория, обусловленному спин-орбитальным взаимодействием, которое традиционно считается ответственным за скошенный магнитный порядок.

## Глава 4

# Конкуренция магнетизма и сверхпроводимости в двумерной расширенной модели Хаббарда

## 4.1. Постановка задачи

Экспериментальные и теоретические исследования последних лет показывают, что между магнитным и сверхпроводящим состояниями в высокотемпературных сверхпроводниках есть существенное взаимное влияние. В ряде работ показано сосуществование и фазовое расслоение соизмеримого и несоизмеримого антиферромагнитного упорядочения со сверхпроводимостью  $d$ -типа на примере сверхпроводников купратов, в других — со сверхпроводимостью  $s$ -типа в случае пниктидов и халькогенидов железа. Хотя исследования конкуренции магнетизма и сверхпроводимости ведутся несколько десятилетий, до сих пор не были построены фазовые диаграммы, которые рассматривали бы как сосуществование, так и фазовое расслоение обоих порядков при учёте различной (в том числе смешанной) симметрии сверхпроводящего параметра порядка и полный набор волновых векторов спирального магнитного упорядочения.

Ниже рассматривается фазовое расслоение и сосуществование магнетизма и сверхпроводимости с учётом спиральных спиновых структур и смешанной симметрии параметра порядка в рамках приближения Хартри–Фока для расширенной модели Хаббарда, учитывающей как отталкивание одноузельных электронов  $U$ , так и притяжение электронов, находящихся на соседних узлах  $V_0$ .

Результаты, представленные в данной главе, опубликованы в работе [165].

## 4.2. Формализм

Для изучения взаимного влияния магнитного и сверхпроводящего порядков мы рассматриваем гамильтониан модели Хаббарда, дополненный слагаемым  $\mathcal{V}$ , описывающим притяжение электронов, находящихся на соседних узлах:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{K} + \mathcal{U} - \mathcal{V}, \\ \mathcal{K} &= \sum_{j,j',\sigma} t_{j,j'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} - \mu \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}, \\ \mathcal{U} &= U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} = U \sum_j c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\uparrow} c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow}, \\ \mathcal{V} &= V_0 \sum_{j,j'} n_{j,\uparrow} n_{j',\downarrow} = V_0 \sum_{j,j'} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow},\end{aligned}\tag{4.1}$$

где  $t_{j,j'}$  — матрица интегралов электронного переноса (здесь учитываются первые и вторые соседние узлы с интегралами  $-t$  и  $t'$  соответственно),  $c_{j,\sigma}^\dagger$  и  $c_{j,\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов на узле  $j$  со спином  $\sigma$ ,  $U$  — кулоновское отталкивание одноузельных электронов, формирующее магнитный порядок,  $V_0$  — притягивающий потенциал, отвечающий за формирование куперовского спаривания электронов, находящихся на соседних узлах,  $\mu$  — химический потенциал,  $n_{j,\sigma} = c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$  — оператор числа электронов на узле  $j$  со спином  $\sigma$ .

Рассмотрим сначала оператор сверхпроводящего взаимодействия  $\mathcal{V}$  и перейдем к приближению Хартри–Фока, которое в данном случае оправдано тем, что величина притягивающего потенциала предполагается малой по сравнению с хаббардовским отталкиванием

$$\mathcal{V} = V_0 \sum_{j,j'} \left( c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \langle c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} \rangle + \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \rangle c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} - \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} \rangle \right)\tag{4.2}$$

где  $\langle \dots \rangle$  обозначает стандартное статистическое усреднение согласно введённым в предыдущих главах обозначениям. Введём параметр порядка с фазовым

множителем  $V_0 \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger \rangle \equiv \Delta_0 \frac{e^{-i\phi_{j,j'}}}{2}$  (как в главе 2), тогда выражение (4.2) примет вид

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{j,j'} \left( \Delta_0 e^{i\phi_{j,j'}} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j',\downarrow}^\dagger + \Delta_0^* e^{-i\phi_{j,j'}} c_{j',\downarrow} c_{j,\uparrow} \right) - \sum_{\vec{\delta}} \frac{\Delta_0^2}{4V_0}. \quad (4.3)$$

Считая, что притяжение осуществляется только между электронами, находящимися на соседних узлах, а фазовый множитель однороден и зависит только от взаимного расположения узлов  $\phi_{j,j'} = \phi_{\vec{\delta}} (\mathbf{r}_{j'} - \mathbf{r}_j = \vec{\delta}, \mathbf{r}_j - \text{радиус-вектор узла } j)$ , на которых осуществляется межэлектронное взаимодействие, получим:

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{j,\vec{\delta}} \left( \Delta_0 e^{i\phi_{\vec{\delta}}} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j+\vec{\delta},\downarrow}^\dagger + \Delta_0 e^{-i\phi_{\vec{\delta}}} c_{j+\vec{\delta},\downarrow} c_{j,\uparrow} \right) - \frac{N\Delta_0^2}{V_0}, \quad (4.4)$$

где  $N$  — число частиц в системе. Произведём преобразование Фурье и введём обозначение  $\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \Delta_0 \sum_{\vec{\delta}} e^{i\mathbf{k}\vec{\delta}} e^{i\phi_{\vec{\delta}}}$ . В таком случае оператор  $\mathcal{V}$  примет вид:

$$\mathcal{V} = \sum_{\mathbf{k}} \left( \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \right) - \frac{N\Delta_0^2}{V_0}, \quad (4.5)$$

где сверхпроводящий параметр порядка  $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 [(\cos k_x + \cos k_y) \cos \pi\alpha + i(\cos k_x - \cos k_y) \sin \pi\alpha]$ .

Рассмотрим теперь спиральный магнитный порядок. Аналогично главе 3, учёт соотношений (3.8), (3.11) и (3.14) и пренебрежение зарядовыми и спиновыми флуктуациями второго порядка малости позволяют найти вид оператора хаббардовского отталкивания на узле  $\mathcal{U}$  в приближении Хартри–Фока

$$\mathcal{U} = UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \frac{Un}{2} \sum_{j,\sigma} n_{j,\sigma} - 2Um \sum_j (\mathbf{e}_j \mathbf{S}_j). \quad (4.6)$$

Вектор  $\mathbf{e}_j$  здесь задаёт ось квантования на узлах в системе со спиральным магнитным порядком, который в декартовых координатах описывается вектором

$\mathbf{m}_j = m (\cos \mathbf{Qr}_j, \sin \mathbf{Qr}_j) \equiv m \mathbf{e}_j$ , где  $\mathbf{Q}$  — волновой вектор спирали в плоскости  $xy$ ,  $m$  — средняя величина магнитного момента. Расписывая явно  $(\mathbf{e}_j \mathbf{S}_j)$ , получим

$$\mathcal{U} = UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \frac{Un}{2} \sum_{j,\sigma} n_{j,\sigma} - Um \sum_j (S_{\alpha,j}^+ e^{-i\mathbf{Qr}_j} + S_{\alpha,j}^- e^{i\mathbf{Qr}_j}), \quad (4.7)$$

где  $S_{\alpha,j}^+ = S_{\alpha,j}^x + iS_{\alpha,j}^y = c_{\alpha,j,\downarrow}^\dagger c_{\alpha,j,\uparrow}$  и  $S_{\alpha,j}^- = S_{\alpha,j}^x - iS_{\alpha,j}^y = c_{\alpha,j,\uparrow}^\dagger c_{\alpha,j,\downarrow}$  — круговые спиновые операторы, или в  $\mathbf{k}$ -представлении:

$$\mathcal{U} = UN \left( m^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \frac{Un}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} - Um \sum_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow} \right). \quad (4.8)$$

Учитывая, что оператор кинетической энергии  $\mathcal{K}$  в  $\mathbf{k}$ -представлении выглядит как

$$\mathcal{K} = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (4.9)$$

где  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y$  — закон дисперсии для квадратной решётки с учётом электронного переноса на первую и вторую координационные сферы, гамильтониан (4.1) приобретает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow} + c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\downarrow} \right) - Um \sum_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow} \right) - \\ - \sum_{\mathbf{k}} \left( \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \right) + A_0, \end{aligned} \quad (4.10)$$

где  $A_0 = UN(m^2 - n^2/4) + N\Delta_0^2/V_0 + N(Un/2 - \mu)$ ,  $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + Un/2$ , и представляет собой квадратичную форму по операторам рождения и уничтожения  $c_{\mathbf{k},\sigma}$ . Удобно записать выражение (4.10) в матричном виде

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}} + A_0, \quad (4.11)$$

где вектор-строка  $\hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^\dagger = \left( c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \quad c_{-\mathbf{k},\downarrow} \quad c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^\dagger \quad c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q},\uparrow} \right)$  и матрица квадратичной

формы (4.11) гамильтониана

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} & -Um & 0 \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\xi_{\mathbf{k}} & 0 & Um \\ -Um & 0 & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \\ 0 & Um & -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* & -\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Здесь было учтено, что функции  $\xi_{\mathbf{k}}$  и  $\Delta_{\mathbf{k}}$  являются чётными, поэтому операторам  $c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}}$  соответствуют  $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$  и  $\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ . Гамильтониан (4.10) можно привести к диагональному виду, перейдя к новым Ферми-операторам  $\gamma_{\mathbf{k}}$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^\dagger &= \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{T}_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}} = \hat{T}_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}, \\ c_{\mathbf{k},l}^\dagger &= \sum_{l'} \gamma_{\mathbf{k},l'}^\dagger T_{\mathbf{k},l,l'}^*, \quad c_{\mathbf{k},l} = \sum_{l'} T_{\mathbf{k},l,l'} \gamma_{\mathbf{k},l'} \end{aligned} \quad (4.13)$$

где  $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^\dagger$  — вектор-строка  $(\gamma_{\mathbf{k},1}^\dagger \quad \gamma_{\mathbf{k},2}^\dagger \quad \gamma_{\mathbf{k},3}^\dagger \quad \gamma_{\mathbf{k},4}^\dagger)$ , а  $\hat{T}_{\mathbf{k}}$  является диагонализующей матрицей, составленной из собственных векторов матрицы  $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}$ . Тогда выражение (4.11) примет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{k}} + A_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{T}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} \hat{T}_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}} + A_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}} + A_0 = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ E_{\mathbf{k},1} \gamma_{\mathbf{k},1}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},1} + E_{\mathbf{k},2} \gamma_{\mathbf{k},2} \gamma_{\mathbf{k},2}^\dagger + E_{\mathbf{k},3} \gamma_{\mathbf{k},3}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},3} + E_{\mathbf{k},4} \gamma_{\mathbf{k},4} \gamma_{\mathbf{k},4}^\dagger \right] + A_0. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Здесь  $E_{\mathbf{k},l}$  — энергетический спектр элементарных возбуждений, который можно найти аналитически:

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k},l} &= \pm \sqrt{\Delta_m^2 + \frac{1}{2} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2)} \pm E_0, \\ E_0 &= \frac{1}{2} \sqrt{\left[ \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^2 \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 + (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \Delta_m^2 (4\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^2 + 4\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2 - \xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* \Delta_{\mathbf{k}}) \right]} \end{aligned} \quad (4.15)$$

где  $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = (\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2)^{1/2}$  и  $\Delta_m = Um$ . Индексы  $l$  пробегает значения от 1 до 4 и для  $E_{\mathbf{k},l}$  соответствуют комбинациям знаков перед радикалами  $(+, +)$ ,  $(+, -)$ ,  $(-, +)$  и  $(-, -)$  соответственно. Фермиевские операторы  $\gamma_{\mathbf{k},l}$  удовлетворяют антикоммутиационным соотношениям  $\{\gamma_{\mathbf{k}}, \gamma_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ , поэтому

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k},2} + E_{\mathbf{k},4}) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ E_{\mathbf{k},1} \gamma_{\mathbf{k},1}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},1} - E_{\mathbf{k},2} \gamma_{\mathbf{k},2}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},2} + E_{\mathbf{k},3} \gamma_{\mathbf{k},3}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},3} - E_{\mathbf{k},4} \gamma_{\mathbf{k},4}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},4} \right] + A_0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

При  $T = 0$  квазичастичные возбуждения в системе отсутствуют и среднее  $\langle \gamma_{\mathbf{k},l}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},l} \rangle = 0$ . В таком случае полная энергия системы:

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k},2} + E_{\mathbf{k},4}) + A_0 \quad (4.17)$$

Для определения основного состояния модели необходимо самосогласованно решить систему уравнений относительно числа электронов  $n$ , магнитного момента  $m$  и амплитуды сверхпроводящей щели  $\Delta_0$  при фиксированной величине уровня Ферми  $\mu$ :

$$\begin{aligned} n_\uparrow = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},l,l'} \gamma_{\mathbf{k},l}^\dagger \langle T_{\mathbf{k},1,l}^* T_{\mathbf{k},1,l'} \gamma_{\mathbf{k},l'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (T_{\mathbf{k},1,2}^2 + T_{\mathbf{k},1,4}^2), \\ n_\downarrow = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (T_{\mathbf{k},3,2}^2 + T_{\mathbf{k},3,4}^2), \\ n = & n_\uparrow + n_\downarrow, \\ m = & \frac{1}{2} (n_\uparrow - n_\downarrow), \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \Delta_0 = & \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k},\alpha}^* \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \\ = & \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k},l,l'} \eta_{\mathbf{k},\alpha}^* \langle \gamma_{\mathbf{k},l}^\dagger T_{\mathbf{k},2,l}^* T_{\mathbf{k},1,l'} \gamma_{\mathbf{k},l'} \rangle = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k},\alpha}^* (T_{\mathbf{k},2,2}^* T_{\mathbf{k},1,2} + T_{\mathbf{k},2,4}^* T_{\mathbf{k},1,4}), \end{aligned} \quad (4.19)$$

где  $\eta_{\mathbf{k},\alpha} = [(\cos k_x + \cos k_y) \cos \pi\alpha + i(\cos k_x - \cos k_y) \sin \pi\alpha]$ . Сравнивая полную энергию (4.17) различных магнитных и сверхпроводящих состояний при фиксированных параметрах  $U$ ,  $V_0$ ,  $t'$ ,  $\mu$ , можно определить основное состояние системы и построить фазовые диаграммы.

### 4.3. Результаты

Фазовые диаграммы основного состояния были построены в переменных сверхпроводящего притяжения электронов  $V_0/t$  и концентрации электронов  $n$ . Значение кулоновского отталкивания считалось фиксированным и принималось равным  $U = 4t$  и  $U = 6t$ , что соответствует характерным значениям данного параметра для сверхпроводящих купратов [166]. Интеграл электронного переноса на вторых по близости соседей принимался равным  $t' = 0,2t$ , что соответствует экспериментальным данным для купратов [153].

Для построения фазовых диаграмм основное состояние системы определялось на сетке параметров  $\mu$  и  $V_0/t$ , при этом скачки концентрации, происходящие при варьировании  $\mu$ , свидетельствуют о наличии фазовых переходов первого рода, которые сопровождаются в общем случае фазовым расслоением. Двумерные интегралы по зоне Бриллюэна квадратной решётки вычислялись на адаптивной сетке с разбиением  $400 \times 400$  точек в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Для интегрирования использовался метод треугольников, описанный в работе [167].

На рисунке 4.1 представлена фазовая диаграмма модели для  $U = 4t$ . Сверхпроводимость реализуется во всём рассматриваемом диапазоне параметров, что согласуется с классическим результатом Купера, который показал, что в присутствии бесконечно малого притягивающего взаимодействия система является нестабильной по отношению к образованию куперовских пар [151]. Единственным исключением является линия половинного заполнения, так как в этом случае уровень Ферми лежит внутри энергетической магнитной щели, и система становится диэлектриком. Для краткости все типы симметрии сверхпроводяще-

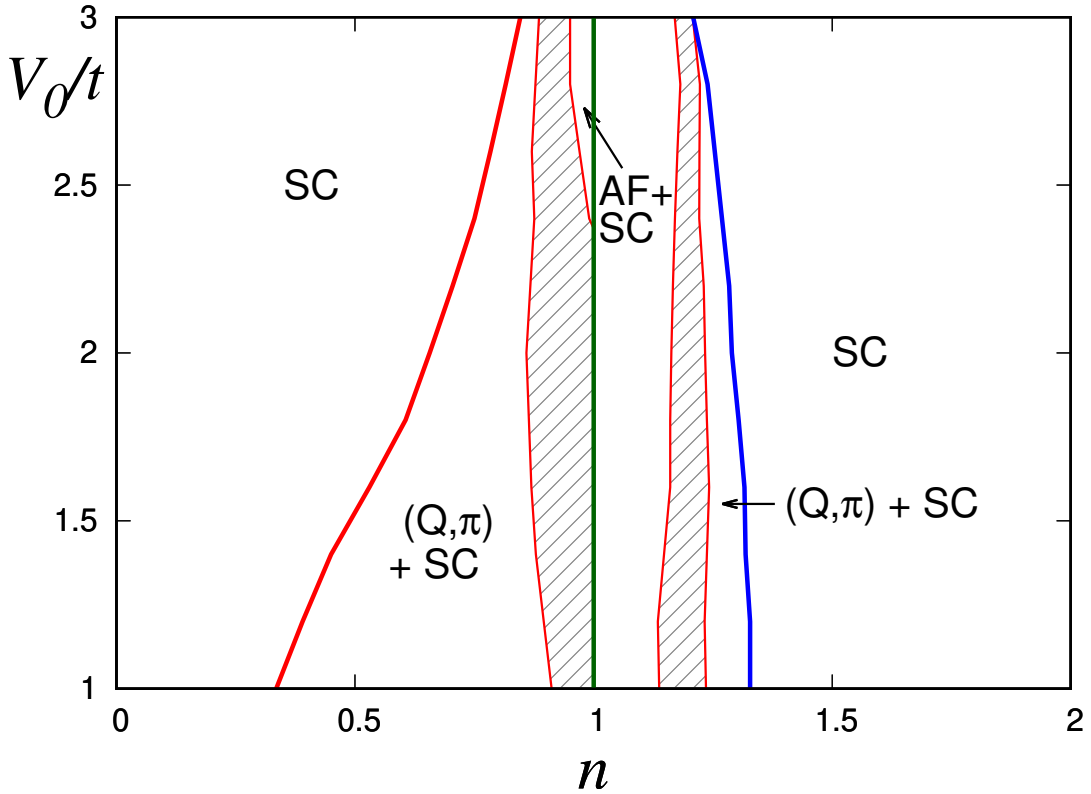


Рис. 4.1. Фазовая диаграмма сверхпроводящих и спиральных магнитных состояний двумерной модели Хаббарда в переменных спаривающего потенциала  $V_0/t$  и заполнения зоны  $n$  для  $U = 4t, t'/t = 0,2$ . Синими линиями обозначены границы фазовых переходов второго рода, красными — первого рода. Зелёная линия соответствует антиферромагнитное диэлектрическое состояние. Заштрихованные области соответствуют фазовому расслоению. Символом «SC» обозначено сверхпроводящее состояние  $d$ -типа, символом «+» — сосуществование магнитного и сверхпроводящего порядков, в скобках указаны проекции волнового вектора магнитной спирали.

го параметра порядка ( $s$ ,  $d$  и  $s+id$ ) на фазовой диаграмме объединены в одну область «SC». В главе 2 было показано, что сверхпроводимость  $s$ -типа реализуется при малых концентрациях носителей заряда, а при приближении к половинному заполнению ( $n = 1$ ) она сменяется сверхпроводимостью  $d$ -типа, причем переход происходит через промежуточную область смешанной симметрии  $s + id$ . Для исследуемых в данной работе параметров переход между сверхпроводящими и магнитными состояниями происходит в области  $d$ -сверхпроводимости, поэтому на диаграммах симметрия сверхпроводящей щели не указывается, но подразумевается, что в области сосуществования магнетизма и сверхпроводимости реализуется  $d$ -симметрия.

Для  $U = 4t$  в модели Хаббарда характерно наличие спирального и антиферромагнитного упорядочения по обе стороны от половинного заполнения. Включение притягивающего взаимодействия  $V_0$  приводит к тому, что магнитное упорядочение начинает сосуществовать со сверхпроводящим. При  $n < 1$  чистый сверхпроводник при увеличении  $n$  переходит в спиральное магнитное состояние  $(Q, \pi)$ , сосуществующее со сверхпроводящим, причём фазовый переход является переходом первого рода. При приближении к  $n = 1$  происходит еще один фазовый переход первого рода в чистое диэлектрическое антиферромагнитное состояние, сопровождающийся широкой областью фазового расслоения. При увеличении  $V_0/t$  область спирального  $(Q, \pi)$  состояния сужается, то есть можно сказать, что сверхпроводящий порядок постепенно подавляет магнитный. При  $V_0/t \gtrsim 2,3$  вблизи  $n = 1$  появляется область сверхпроводящего антиферромагнетика.

При  $n > 1$  область сосуществования металлического антиферромагнетика со сверхпроводником обнаружена для всех исследованных значений  $V_0/t$ , причем ширина этой области остается практически постоянной при изменении  $V_0/t$ . При увеличении  $n$  происходит фазовый переход первого рода в спиральное состояние  $(Q, \pi)$ , сосуществующее со сверхпроводником. Данная фаза в свою очередь переходит в чистый сверхпроводник, причем переход является непрерывным, то есть второго рода.

При  $U = 6t$  области магнитных состояний на фазовой диаграмме (рис. 4.2) увеличиваются по сравнению с  $U = 4t$ , что согласуется с ранее полученными результатами исследования условий формирования спиральных магнитных структур в модели Хаббарда [162]. При этом все магнитные фазы сосуществуют со сверхпроводимостью кроме диэлектрического антиферромагнетика при  $n = 1$ . Области чистой сверхпроводимости сужаются. Растет разнообразие спиральных магнитных состояний. Помимо антиферромагнитной и  $(Q, \pi)$  фаз в дырочной ( $n < 1$ ) половине диаграммы реализуются  $(0, Q)$ ,  $(0, \pi)$  и  $(Q, Q)$  упорядочения. При этом переходы из парамагнитной в  $(0, Q)$  фазу, а также

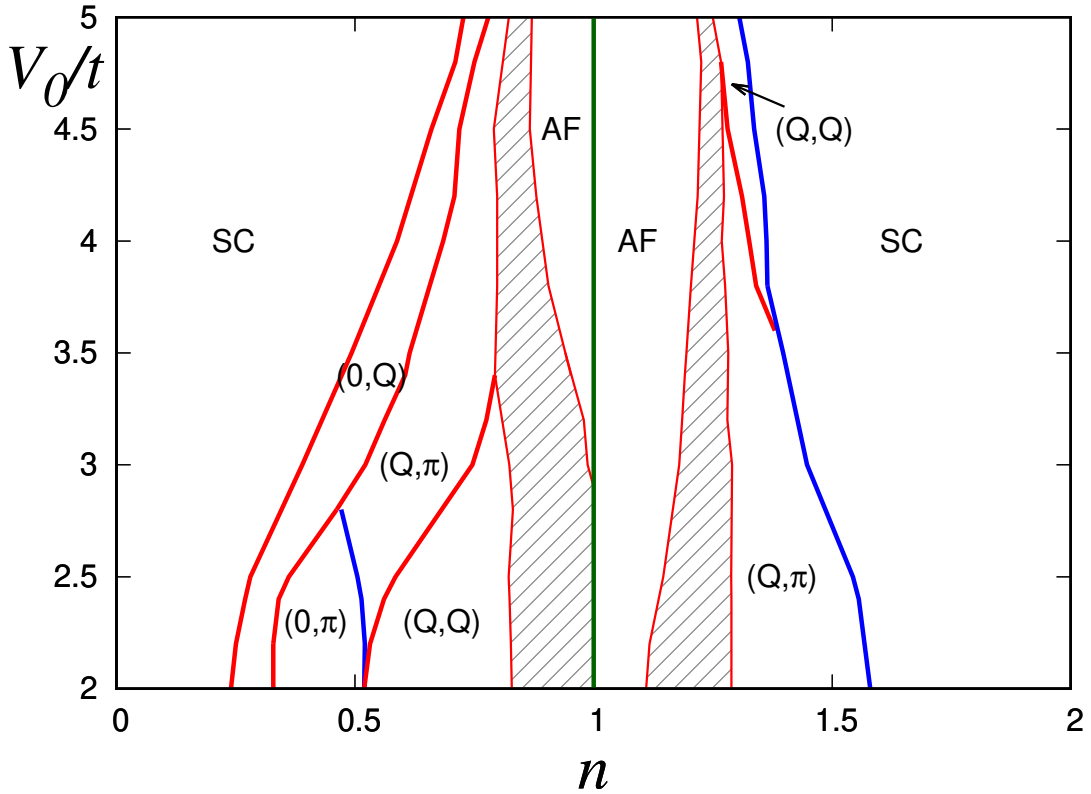


Рис. 4.2. Фазовая диаграмма сверхпроводящих и спиральных магнитных состояний двумерной модели Хаббарда в переменных спаривающего потенциала  $V_0/t$  и заполнения зоны  $n$  для  $U = 6t, t'/t = 0,2$ . Индекс «SC» опущен для всех магнитных областей.

все переходы между различными спиральными и антиферромагнитным состояниями являются фазовыми переходами первого рода. Исключением является переход из  $(0, \pi)$  в  $(Q, \pi)$  фазу, который является переходом второго рода, и сопровождается непрерывным изменением  $Q$ , магнитного момента и амплитуды сверхпроводящей щели. В электронной ( $n > 1$ ) половине диаграммы при больших значениях параметра  $V_0/t$  появляется область  $(Q, Q)$  фазы.

Для иллюстрации поведения амплитуд магнитного момента  $m$  и сверхпроводящей щели  $\Delta_0$  построен рисунок 4.3, соответствующий  $U = 4t, V_0 = 1,5t$  и  $t' = 0,2t$ . При малой концентрации электронов основным состоянием является сверхпроводник  $s$ -типа. Параметр порядка ведет себя немонотонно с максимумом при  $n \approx 0,16$ . При  $n \approx 0,4$  происходит переход в сверхпроводник  $d$ -типа через промежуточное состояние со смешанной симметрией параметра порядка  $s + id$ . При  $n \approx 0,44$  скачком появляется локальный магнитный момент с ам-

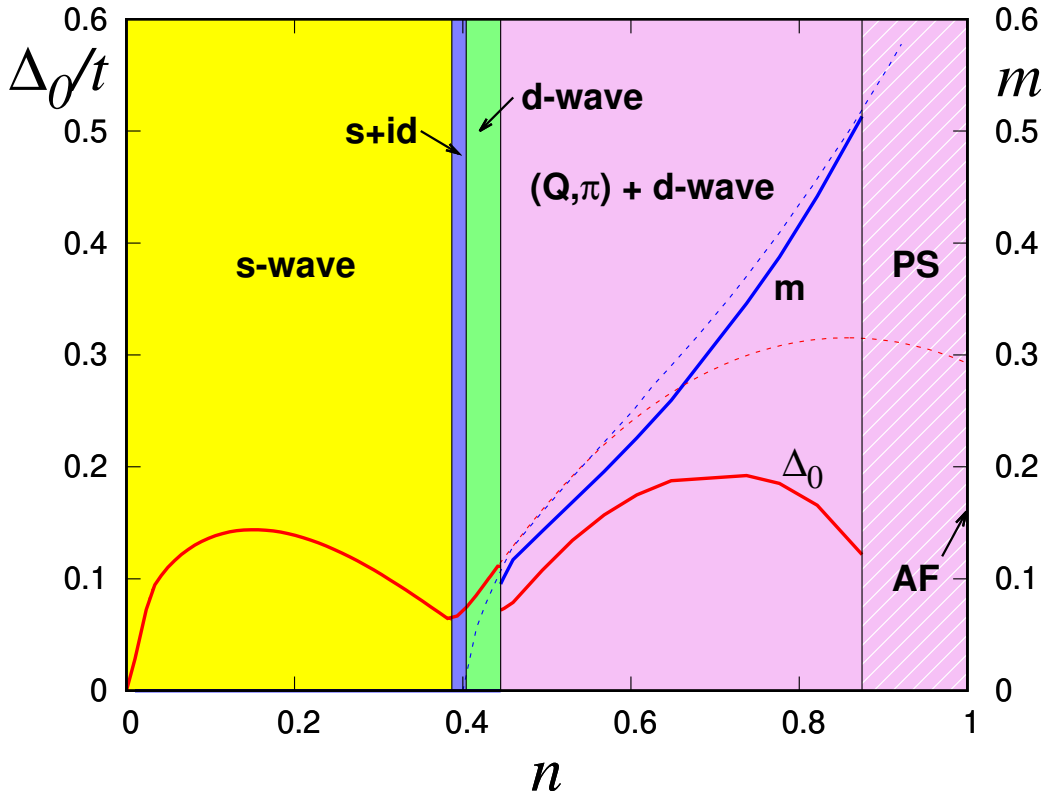


Рис. 4.3. Зависимость магнитного  $m$  (синие линии) и сверхпроводящего  $\Delta_0$  (красные линии) параметров порядка от концентрации электронов  $n$  для  $U = 4t$ ,  $V_0 = 1,5t$  и  $t' = 0,2t$ . Обозначения *s-wave*, *d-wave* и *s + id* соответствуют симметрии сверхпроводящего параметра порядка в данной области. Штриховкой обозначена область фазового расслоения PS. Магнитному порядку соответствуют обозначения AF (антиферромагнитное) и  $(Q, \pi)$  (спиральное). Вертикальные тонкие чёрные линии обозначают границы фазовых переходов. Тонкими пунктирными линиями изображены зависимости параметров порядка в чистой магнитной и сверхпроводящей системах. Символ «+» означает сосуществование порядков (розовая область).

плитудой  $m \approx 0,1$  и, начиная с этого момента, сверхпроводящий и магнитный порядки начинают сосуществовать. В области сосуществования величина как магнитного момента, так и амплитуды сверхпроводящего параметра порядка, меньше по сравнению с чистыми магнитными и сверхпроводящими состояниями, параметры порядка которых изображены на рисунке штриховыми линиями. Таким образом, сверхпроводимость и спиральная намагниченность оказывают взаимоподавляющее воздействие друг на друга. При  $n \approx 0,86$  происходит фазовый переход первого рода в диэлектрическое антиферромагнитное состояние, сопровождающийся широкой областью фазового расслоения  $0,86 < n < 1$ . В

области расслоения, таким образом, реализуется сложное сочетание различных порядков: часть системы является антиферромагнитным диэлектриком, а другая часть имеет спиральный магнитный порядок и при этом является сверхпроводником. Переход из сверхпроводящего в диэлектрическое состояние очевидно имеет перколяционную природу: проводимость пропадает при той концентрации, при которой спиральные магнитные кластеры перестают быть взаимосвязанными. В простых моделях такой переход происходит в точке, в которой доля диэлектрических кластеров равна  $1/3$ , что соответствует концентрации электронов  $\approx 0,95$  [168].

Амплитуда сверхпроводящей щели  $\Delta_0$  ведет себя немонотонно в области сосуществования. Она растет вплоть до  $\Delta_0^{max} \approx 0,17t$  при  $n \approx 0,7$ , а затем начинает убывать. Таким образом, в рамках простой модели удастся воспроизвести куполообразную форму зависимости амплитуды сверхпроводящей щели от концентрации, характерную для соединений, демонстрирующих высокотемпературную сверхпроводимость [23, 25]. Традиционно принято считать, что куполообразная форма связана с немонотонным поведением величины спаривающего взаимодействия, которое определяется природой куперовского спаривания [28]. Так как в данной диссертационной работе не затрагивается вопрос природы притяжения, а его сила считается не зависящей от концентрации, мы показываем, что куполообразная форма может быть объяснена также взаимным влиянием сверхпроводящего и магнитного порядков.

#### 4.4. Выводы к главе 4

1. В рамках единой модели с помощью приближения Хартри–Фока исследовано взаимовлияние сверхпроводящего и магнитного параметров порядка на квадратной решётке. Показано, что основное состояние модели описывается спиральной магнитной структурой и сверхпроводящей фазой с промежуточной симметрией параметра порядка.

2. Впервые построена фазовая диаграмма магнитных и сверхпроводящих состояний двумерной модели, в которой, в отличие от результатов ранее выполненных расчётов, учитываются как неколлинеарные магнитные структуры с различными наборами волновых векторов, так и сверхпроводящие состояния с различными симметриями параметра порядка.
3. Показана возможность макроскопического фазового расслоения и микроскопического сосуществования между магнитной и сверхпроводящей фазами. В широкой области параметров модели как в случае дырочного, так и электронного допирования показано формирование сверхпроводимости, спиральных магнитных состояний, их сосуществование, а также наличие фазовых переходов I и II рода между ними.
4. Найдено, что сосуществование в общем случае является более энергетически выгодным, чем фазовое расслоение.
5. Обнаружено, что взаимное влияние сверхпроводящего решения с магнитным позволяет воспроизвести куполообразную форму зависимости критической температуры от концентрации.

## Заключение

В настоящей диссертационной работе исследованы условия формирования спиральных магнитных состояний и сверхпроводимости с различной симметрией сверхпроводящего параметра порядка в рамках микроскопических моделей с притяжением электронов, находящихся на соседних узлах, Хаббарда и расширенной модели Хаббарда.

### Основные результаты, полученные в диссертационной работе:

1. Впервые получены полные фазовые диаграммы двумерной однозонной модели с притяжением электронов, находящихся на соседних узлах, учитывающей как сверхпроводящие состояния с чистыми синглетными  $s$ - и  $d$ -симметриями, так и состояние с промежуточной  $s+id$ -симметрией сверхпроводящего параметра порядка в рамках приближения Хартри–Фока. Рассмотрены случаи разных значений параметра притяжения  $V_0$ , отношения интегралов переноса на вторую и первую координационные сферы  $t'/t$ , нулевой и конечной температур. Было обнаружено, что в широком диапазоне рассматриваемых параметров модели кроме состояний с чистыми симметриями сверхпроводящего параметра порядка устойчивой является промежуточная  $s+id$ -фаза. Исследования характера фазовых переходов между рассматриваемыми сверхпроводящими состояниями показали, что они являются непрерывными фазовыми переходами второго рода. Зависимости критической температуры  $T_c$  и максимального значения амплитуды сверхпроводящего параметра порядка  $\Delta_0$  при нулевой температуре от электронной плотности  $n$  свидетельствовали о том, что область оптимального допирования определяется расположением особенности Ван Хова, а не специфическим механизмом куперовского спаривания. Фазовые диаграммы, построенные в координатах температура-допирование, позволяют сделать вывод, что переход из нормального состояния в сверхпрово-

дующее всегда осуществляется через чистые сверхпроводящие состояния с  $s$ - или  $d$ -симметрией, и что при понижении температуры возможна смена симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Полученные результаты качественно согласуются с данными исследований, выполненных с использованием более сложных подходов и моделей.

2. С помощью модели Хаббарда исследована возможность формирования в слоистых системах скошенной спиральной магнитной структуры, наблюдаемой в соединении  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Найдены параметры модели, при которых такой тип магнитного упорядочения является энергетически выгодным. Таким образом, показано, что формирование скошенной структуры не требует присутствия в системе спин-орбитального взаимодействия, и может быть объяснено с точки зрения нерелятивистского зонного магнетизма.
3. В приближении Хартри-Фока для расширенной модели Хаббарда с дополнительным слагаемым, учитывающим притяжение электронов, находящихся на соседних узлах, проведено исследование конкуренции сверхпроводимости и магнетизма. Впервые построены фазовые диаграммы модели, учитывающие сверхпроводимость  $s$ -,  $s + id$ - и  $d$ -типа, спиральные магнитные состояния, сосуществование и фазовое расслоение обоих порядков. Показано, что основное состояние модели описывается спиральной магнитной структурой и сверхпроводящей фазой со смешанной симметрией сверхпроводящего параметра порядка. Обнаружено, что совместный учёт сверхпроводящего и магнитного порядков позволяет воспроизвести куполообразную форму зависимости критической температуры от концентрации.

## Список публикаций

### Статьи в журналах

1. Timirgazin, M.A. Canted spiral magnetic order in layered systems / M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov, A.K. Arzhnikov // Solid State Phenomena. — 2015. — Vol. 233–234. — P. 68–72.
2. Spiral magnetism in the single-band Hubbard model: the Hartree-Fock and slave-boson approaches / P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter — 2015. — Vol. 27. — P. 446002.
3. Гильмутдинов, В.Ф. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка в  $t - t'$  однозонной модели на квадратной решетке / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // Химическая физика и мезоскопия. — 2016. — Т. 18, № 3. — С. 412–420.
4. Гильмутдинов, В.Ф. Зависимость симметрии сверхпроводящего параметра порядка от температуры и интеграла электронного переноса / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // Химическая физика и мезоскопия. — 2017. — Т. 19, № 4. — С. 547–558.
5. Гильмутдинов, В.Ф. Сосуществование магнетизма и сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // Химическая физика и мезоскопия. — 2018. — Т. 20, № 3. — С. 365–377.
6. Timirgazin, M.A. Phase diagrams of singlet superconducting states with mixed symmetry / M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov, A.K. Arzhnikov // Physica C: Superconductivity and its applications. — 2018. — Vol. 557. — P. 7–11.

## Тезисы докладов на конференциях

1. Гильмутдинов, В.Ф. Скошенное антиферромагнитное упорядочение в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // XX Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых ВНКСФ-20. Ижевск. Материалы конференции. — 2014. — С. 249–250.
2. Гильмутдинов, В.Ф. Скошенное антиферромагнитное упорядочение в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // XV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-15. Екатеринбург. Материалы конференции. — 2014. — С. 233.
3. Гильмутдинов, В.Ф. Конкуренция магнитоупорядоченных и сверхпроводящих состояний в слоистых ВТСП соединениях / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // XVI Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-16. Екатеринбург. Материалы конференции. — 2015. — С. 211.
4. Timirgazin, M.A. Interplay between magnetic and superconducting orders in layered HTSC compounds / M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov, A.K. Arzhnikov // VI Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism» (EASTMAG-2016) Krasnoyarsk, Russia. Abstracts. — 2016. — P.148.
5. Гильмутдинов, В.Ф. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка в  $t' - t$  однозонной модели на квадратной решётке / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // XVII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-17. Екатеринбург. Материалы конференции. — 2016. — С. 233.
6. Тимиргазин, М.А. Сосуществование сверхпроводимости и магнетизма в слоистых высокотемпературных сверхпроводниках / М.А. Тимирга-

- зин, В.Ф. Гильмутдинов, А.К. Аржников // XVII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-17. Екатеринбург. Материалы конференции. — 2016. — С. 247.
7. Timirgazin, M.A. Interplay between magnetic and superconducting orders in layered HTSC compounds / M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov, A.K. Arzhnikov // Moscow International Symposium on Magnetism (MISM) 1-5 July, Book of Abstracts. — 2017. — С. 642.
  8. Gilmutdinov, V.F. Relationship between superconducting order parameter symmetry, temperature and next-nearest neighbor hopping / V.F. Gilmutdinov, M.A. Timirgazin, A.K. Arzhnikov // Moscow International Symposium on Magnetism (MISM) 1-5 July, Book of Abstracts. — 2017. — С. 940.
  9. Гильмутдинов, В.Ф. Зависимость симметрии сверхпроводящего параметра порядка от температуры и интеграла электронного переноса / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-18. Екатеринбург. Материалы конференции. — 2017. — С. 237.
  10. Тимиргазин, М.А. Сосуществование магнетизма и сверхпроводимости в приближении вспомогательных бозонов / М.А. Тимиргазин, В.Ф. Гильмутдинов, А.К. Аржников // XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества СПФКС-18. Екатеринбург. Материалы конференции. — 2017. — С. 249.
  11. Gilmutdinov, V.F. Coexistence of superconductivity and spiral magnetism in high-temperature superconductors / V.F. Gilmutdinov, M.A. Timirgazin, A.K. Arzhnikov // Spin Waves 2018 Abstracts. — Санкт-Петербург, 2018. — P. 159.

12. Гильмутдинов, В.Ф. Сосуществование магнетизма и сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // Сборник тезисов докладов XI Всероссийской школы-конференции молодых ученых «КоМУ-2018». — 2018. — С. 31-32

## Список литературы

1. Bednorz, J.G. Possible high- $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system [Text] / J.G. Bednorz, K.A. Müller // Zeitschrift fur Physik B. — 1986. — Vol. 64. — P. 189–193.
2. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system [Text] / A.P. Drozdov, M.I. Erements, I.A. Troyan [et al.] // Nature. — 2015. — Vol. 525. — P. 73–76.
3. Superconductivity at 215 K in lanthanum hydride at high pressures / A.P. Drozdov, V.S. Minkov, S.P. Besedin [et al.]. — 2018. — arXiv:1808.07039.
4. Evidence for Superconductivity above 260 K in Lanthanum Superhydride at Megabar Pressures [Text] / M. Somayazulu, M. Ahart, A.K. Mishra [et al.] // Physical Review Letters. — 2019. — Jan. — Vol. 122. — P. 027001.
5. Iron-Based Layered Superconductor: LaOFeP [Text] / Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano [et al.] // Journal Of The American Chemical Society. — 2006. — Vol. 128. — P. 10012–10013.
6. Iron-Based Layered Superconductor  $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$  ( $x=0.05-0.12$ ) with  $T_c = 26$  K [Text] / Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono // Journal Of The American Chemical Society. — 2008. — Vol. 130. — P. 3296–3297.
7. Superconductivity at 43 K in  $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  [Text] / X.H. Chen, T. Wu, G. Wu [et al.] // Nature. — 2008. — Vol. 453. — P. 761–762.
8. Superconductivity and phase diagram in iron-based arsenic-oxides  $\text{ReFeAsO}_{1-\delta}$  (Re = rare-earth metal) without fluorine doping [Text] / Z.-A. Ren, G.-C. Che, X.-L. Dong [et al.] // Europhysics Letters. — 2008. — Vol. 83. — P. 17002.
9. Superconductivity up to 29 K in  $\text{SrFe}_2\text{As}_2$  and  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  at high pressures [Text] / P.L. Alireza, Y.T. Chris Ko, J. Gillett [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — Vol. 29. — P. 012208.

10. Rotter, M. Superconductivity at 38 K in the Iron Arsenide  $(\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x)\text{Fe}_2\text{As}_2$  [Text] / M. Rotter, M. Tegel, D. Johrendt // Physical Review Letters. — 2008. — Vol. 101. — P. 107006.
11. Superconductivity at 27K in tetragonal FeSe under high pressure [Text] / Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda [et al.] // Applied Physics Letters. — 2008. — Vol. 93, no. 15. — P. 152505.
12. Superconductivity in the PbO-type structure  $\alpha$ -FeSe [Text] / F.-C. Hsu, J.-Y. Luo, K.-W. Yeh [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2008. — Vol. 105, no. 38. — P. 14262–14264.
13. Superconductivity close to magnetic instability in  $\text{Fe}(\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x)_{0.82}$  [Text] / M.H. Fang, H.M. Pham, B. Qian [et al.] // Physical Review B. — 2008. — Vol. 78. — P. 224503.
14. Tellurium substitution effect on superconductivity of the  $\alpha$ -phase iron selenide [Text] / K.-W. Yeh, T.-W. Huang, Y.-L. Huang [et al.] // Europhysics Letters. — 2008. — Vol. 84, no. 3. — P. 37002.
15. Superconductivity in S-substituted FeTe [Text] / Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda [et al.] // Applied Physics Letters. — 2009. — Vol. 94, no. 1. — P. 012503.
16. Extreme sensitivity of superconductivity to stoichiometry in  $\text{Fe}_{1+\delta}\text{Se}$  [Text] / T.M. McQueen, Q. Huang, V. Ksenofontov [et al.] // Physical Review B. — 2009. — Vol. 79. — P. 014522.
17. Bulk superconductivity at 14 K in single crystals of  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}_x\text{Se}_{1-x}$  [Text] / B.C. Sales, A.S. Sefat, M.A. McGuire [et al.] // Physical Review B. — 2009. — Vol. 79. — P. 094521.
18. Hu, R. Isotropic superconducting state and high critical currents in  $\text{Fe}_{1+y}\text{Te}_{1-x}\text{S}_x$  single crystals / R. Hu, J. B. Warren, C. Petrovic. — 2009. — arXiv:0903.4430.
19. Evidence of Mott physics in iron pnictides from x-ray spectroscopy [Text] /

- S. Lafuerza, H. Gretarsson, F. Hardy [et al.] // Physical Review B. — 2017. — Vol. 96. — P. 045133.
20. Superconductivity and Magnetism in  $(\text{Tl,K,Rb})\text{Fe}_x\text{Se}_2$  [Text] / M. Fang, H. Wang, C. Dong, Q. Huang // Journal of Physics: Conference Series. — 2013. — Vol. 449. — P. 012015.
21. Садовский, М.В. Высокотемпературная сверхпроводимость в слоистых соединениях на основе железа [Текст] / М.В. Садовский // Успехи Физических Наук. — 2008. — Т. 178, № 12. — С. 1243.
22. Effects of Co substitution on thermodynamic and transport properties and anisotropic  $H_{c2}$  in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  single crystals [Text] / N. Ni, M.E. Tillman, J.-Q. Yan [et al.] // Physical Review B. — 2008. — Vol. 78. — P. 214515.
23. Recent advances in iron-based superconductors toward applications [Text] / H. Hosono, A. Yamamoto, H. Hiramatsu, Y. Ma // Materials today. — 2017.
24. Damascelli, A. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors [Text] / A. Damascelli, Z. Hussain, Z.-X. Shen // Reviews of Modern Physics. — 2003. — Vol. 75. — P. 473.
25. Armitage, N.P. Progress and perspectives on electron-doped cuprates [Text] / N.P. Armitage, P. Fournier, R.L. Greene // Reviews of Modern Physics. — 2010. — Vol. 82. — P. 2421.
26. Ginzburg, V.L. Ferromagnetic Superconductors [Text] / V.L. Ginzburg // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1957. — Vol. 4, no. 2. — P. 153.
27. Berk, N.F. Effect of Ferromagnetic Spin Correlations on Superconductivity [Text] / N.F. Berk, J.R. Schrieffer // Physical Review Letters. — 1966. — Vol. 17. — P. 433–435.
28. Изюмов, Ю.А. Спин-флуктуационный механизм высокотемпературной сверхпроводимости и симметрия параметра порядка [Текст] / Ю.А. Изюмов // Успехи Физических Наук. — 1999. — Т. 169, № 3. — С. 225.

29. Unconventional Superconductivity with a Sign Reversal in the Order Parameter of  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  [Text] / I.I. Mazin, D.J. Singh, M.D. Johannes, M.H. Du // Physical Review Letters. — 2008. — Vol. 101. — P. 057003.
30. Coexistence of Magnetic Fluctuations and Superconductivity in the Pnictide High Temperature Superconductor  $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  Measured by Muon Spin Rotation [Text] / A.J. Drew, F.L. Pratt, T. Lancaster [et al.] // Physical Review Letters. — 2008. — Vol. 101. — P. 091010.
31. Yu Shun-Li. Spin fluctuations and unconventional superconducting pairing in iron-based superconductors [Text] / Yu Shun-Li, Li Jian-Xin // Chinese Physics B. — 2013. — Vol. 22, no. 8. — P. 087411.
32. Bardeen, J. Microscopic Theory of Superconductivity [Text] / J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer // Physical Review. — 1957. — Vol. 106. — P. 162.
33. Bardeen, J. Theory of Superconductivity [Text] / J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer // Physical Review. — 1957. — Vol. 108. — P. 1157.
34. Hubbard, J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands [Text] / J. Hubbard // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. — 1963. — Vol. 276, no. 1365. — P. 238–257.
35. Tsuei, C.C. Pairing symmetry in cuprate superconductors [Text] / C.C. Tsuei, J.R. Kirtley // Review of Modern Physics. — 2000. — Vol. 72. — P. 969.
36. Tunnelling evidence for predominantly electron-phonon coupling in superconducting  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$  and  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$  [Text] / Q. Huang, J.F. Zasadzinski, N. Tralshawala [et al.] // Letters to Nature. — 1990. — Vol. 347. — P. 369–372.
37. *d*-wave pairing from spin fluctuations in the  $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  superconductors [Text] / T.A. Maier, S. Graser, P.J. Hirschfeld, D.J. Scalapino // Physical Review B. — 2011. — Vol. 83. — P. 100515.
38. Ruckenstein, A.E. Mean-field theory of high- $T_c$  superconductivity: The superexchange mechanism [Text] / A.E. Ruckenstein, Peter J. Hirschfeld, J. Appel // Physical Review B. — 1987. — Jul. — Vol. 36. — P. 857–860.

39. Kotliar, G. Resonating valence bonds and  $d$ -wave superconductivity [Text] / G. Kotliar // Physical Review B. — 1988. — Vol. 37. — P. 3664.
40. Superconducting Phase Diagram of the Paramagnetic One-Band Hubbard Model [Text] / A. Kreisel, A.T. Rømer, P.J. Hirschfeld, B.M. Andersen // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2017. — Vol. 30. — P. 85–89.
41. Kuboki, K. Effect of Band Structure on the Symmetry of Superconducting States [Text] / K. Kuboki // Journal of the Physical Society of Japan. — 2001. — Vol. 70, no. 9. — P. 2698–2702.
42. Possible observation of the coexistence of superconductivity and long-range magnetic order in NdRh<sub>4</sub>B<sub>4</sub> [Text] / H.C. Hamaker, L.D. Woolf, H.B. MacKay [et al.] // Solid State Communications. — 1979. — Vol. 31, no. 3. — P. 139–144.
43. Coexistence of superconductivity and antiferromagnetic order in SmRh<sub>4</sub>B<sub>4</sub> [Text] / H.C. Hamaker, L.D. Woolf, H.B. MacKay [et al.] // Solid State Communications. — 1979. — Vol. 32, no. 4. — P. 289–294.
44. Magnetic order in superconducting TbMo<sub>6</sub>S<sub>8</sub>, DyMo<sub>6</sub>S<sub>8</sub>, and ErMo<sub>6</sub>S [Text] / W. Thomlinson, G. Shirane, D.E. Moncton [et al.] // Physical Review B. — 1981. — Vol. 23. — P. 4455.
45. Kato, M. Superconductivity and spin-density waves: Application to heavy-fermion materials [Text] / M. Kato, K. Machida // Physical Review B. — 1988. — Vol. 37. — P. 1510.
46. Polymorphism control of superconductivity and magnetism in Cs<sub>3</sub>C<sub>60</sub> close to the Mott transition [Text] / A.Y. Ganin, Y. Takabayashi, P. Jeglič [et al.] // Nature. — 2010. — Vol. 466. — P. 221–225.
47. Transport evidence of a magnetic quantum phase transition in electron-doped high-temperature superconductors [Text] / W. Yu, J.S. Higgins, P. Bach, R.L. Greene // Physical Review B. — 2007. — Vol. 76. — P. 020503(R).
48. Antiferromagnetic Ordering in Superconducting YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.5</sub> [Text] / Y. Sidis, C. Ulrich, P. Bourges [et al.] // Physical Review Letters. — 2001. — Vol. 86. —

- P. 4100.
49. Two-Dimensional Superconducting Fluctuations in Stripe-Ordered  $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.125}\text{CuO}_4$  [Text] / Q. Li, M. Hücker, G. D. Gu [et al.] // Physical Review Letters. — 2007. — Vol. 99. — P. 067001.
  50. Neutron-scattering study of spin-density wave order in the superconducting state of excess-oxygen-doped  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$  [Text] / Y.S. Lee, R.J. Birgeneau, M.A. Kastner [et al.] // Physical Review B. — 1999. — Vol. 60. — P. 3643.
  51. Coexistence of magnetism and superconductivity in ultraclean underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.37}$  [Text] / R.I. Miller, R.F. Kiefl, J.H. Brewer [et al.] // Physical Review B. — 2006. — Vol. 73. — P. 144509.
  52. Neutron scattering study of the magnetic phase diagram of underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  [Text] / D. Haug, V. Hinkov, Y. Sidis [et al.] // New Journal Of Physics. — 2010. — Vol. 12. — P. 105006.
  53. Coexistence of incommensurate magnetism and superconductivity in  $\text{Fe}_{1+y}\text{Se}_x\text{Te}_{1-x}$  [Text] / R. Khasanov, M. Bendele, A. Amato [et al.] // Physical Review B. — 2009. — Vol. 80. — P. 140511.
  54. Atomic coexistence of superconductivity and incommensurate magnetic order in the pnictide  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  [Text] / Y. Laplace, J. Bobroff, F. Rullier-Albenque [et al.] // Physical Review B. — 2009. — Vol. 80. — P. 140501.
  55. Superconducting state coexisting with a phase-separated static magnetic order in  $(\text{Ba},\text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$ ,  $(\text{Sr},\text{Na})\text{Fe}_2\text{As}_2$  and  $\text{CaFe}_2\text{As}_2$  [Text] / T. Goko, A.A. Aczel, E. Baggio-Saitovitch [et al.] // Physical Review B. — 2009. — Vol. 80. — P. 024508.
  56. Electronic Phase Separation in the Slightly Underdoped Iron Pnictide Superconductor  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  [Text] / J.T. Park, D.S. Inosov, Ch. Niedermayer [et al.] // Physical Review letters. — 2009. — Vol. 102. — P. 117006.
  57. The electronic phase diagram of the  $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$  superconductor [Text] / H. Luetkens, H.-H. Klauss, M. Kraken [et al.] // Nature Materials. — 2009. —

- Vol. 8. — P. 305.
58. Takeshita, S. Competition/coexistence of magnetism and superconductivity in iron pnictides probed by muon spin rotation [Text] / S. Takeshita, R. Kadono // New Journal of Physics. — 2009. — Vol. 11. — P. 035006.
  59. Nanoscale phase separation of antiferromagnetic order and superconductivity in  $K_{0.75}Fe_{1.75}Se_2$  [Text] / R.H. Yuan, T. Dong, Y.J. Song [et al.] // Scientific Reports. — 2012. — Vol. 2. — P. 221.
  60. Superconducting properties of single-crystalline  $A_xFe_{2-y}Se_2$  (A=Rb, K) studied using muon spin spectroscopy [Text] / Z. Shermadini, H. Luetkens, R. Khasanov [et al.] // Physical Review B. — 2012. — Vol. 85. — P. 100501(R).
  61. Scalapino, D.J. d-wave pairing near a spin-density-wave instability [Text] / D.J. Scalapino, E. Loh, Jr., J.E. Hirsch // Physical Review B. — 1986. — Vol. 24, no. 11. — P. 8190.
  62. Изюмов, Ю.А. Сильно коррелированные электроны:  $t - J$ -модель [Текст] / Ю.А. Изюмов // Успехи физических наук. — 1997. — Т. 167, № 5. — С. 465–497.
  63. Ogata, M. The  $t - J$  model for the oxide high- $T_c$  superconductors [Text] / M. Ogata, H. Fukuyama // Reports on Progress in Physics. — 2008. — Vol. 71, no. 3. — P. 036501.
  64. Lee, W.-C. Pairing State with a Time-Reversal Symmetry Breaking in FeAs-Based Superconductors [Text] / W.-C. Lee, S.-C. Zhang, C. Wu // Physical Review Letters. — 2009. — Vol. 102. — P. 217002.
  65. Vavilov, M.G. Coexistence between superconducting and spin density wave states in iron-based superconductors: Ginzburg-Landau analysis [Text] / M.G. Vavilov, A.V. Chubukov, A.B. Vorontsov // Superconductor Science and Technology. — 2010. — Vol. 23. — P. 054011.
  66. Kotliar, G. Strongly correlated materials: insists from dynamical mean-field theory [Text] / G. Kotliar, D. Vollhardt // Physics Today. — 2004. — Vol. 57. — P. 53.

67. Hybrid LDA and generalized tight-binding method for electronic structure calculations of strongly correlated electron systems [Text] / M.M. Korshunov, V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov [et al.] // Physical Review B. — 2005. — Vol. 72. — P. 165104.
68. Singh, D.J. Density Functional Study of  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ : A Low Carrier Density Superconductor Near Itinerant Magnetism [Text] / D.J. Singh, M.-H. Du // Physical Review Letters. — 2008. — Vol. 100. — P. 237003.
69. Плакида, Н.М. Высокотемпературные сверхпроводники [Текст] / Н.М. Плакида. — Москва : Международная программа образования, 1996. — ISBN: 5-7781-0030-2.
70. Изюмов, Ю.А. Высокотемпературные сверхпроводники на основе FeAs-соединений [Текст] / Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев. — Ижевск : НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, 2009. — ISBN: 978-5-93972-747-1.
71. Stanev, V. Spin fluctuation dynamics and multiband superconductivity in iron pnictides [Text] / V. Stanev, J. Kang, Z. Tesanovic // Physical Review B. — 2008. — Vol. 78. — P. 184509.
72. Coexistence of superconductivity and a spin-density wave in pnictide superconductors: Gap symmetry and nodal lines [Text] / D. Parker, M.G. Vavilov, A.V. Chubukov, I.I. Mazin // Physical Review B. — 2009. — Vol. 80. — P. 100508.
73. Schrieffer, J.R. Symmetry of the order parameter in high temperature superconductors [Text] / J.R. Schrieffer // Solid State Communications. — 1994. — Vol. 92, no. 1. — P. 129–139.
74. Stewart, G.R. Superconductivity in iron compounds [Text] / G.R. Stewart // Review Of Modern Physics. — 2011. — Vol. 83. — P. 1589.
75. Observation of Josephson pair tunneling between a high- $T_c$  cuprate ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ) and a conventional superconductor (Pb) [Text] / A.G. Sun, D.A. Gajewski, M.B. Maple, R.C. Dynes // Physical Review Letters. — 1994. — Vol. 72. — P. 2267–2270.

76. Liechtenstein, A.I. *s*-Wave Superconductivity from an Antiferromagnetic Spin-Fluctuation Model for Bilayer Materials [Text] / A.I. Liechtenstein, I.I. Mazin, O.K. Andersen // Physical Review Letters. — 1995. — Vol. 74. — P. 2303–2306.
77. Zhao, G.M. Unambiguous evidence for extended *s*-wave pairing symmetry in hole-doped high-temperature superconductors [Text] / G.M. Zhao // Journal Philosophical Magazine. — 2004. — Vol. 84. — P. 3861–3867.
78. Anomalous Momentum Dependence of the Superconducting Coherence Peak and Its Relation to the Pseudogap of  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$  [Text] / K. Terashima, H. Matsui, T. Sato [et al.] // Physical Review Letters. — 2007. — Vol. 99. — P. 017003.
79. Li, Q.P. Mixed *s*-wave and *d*-wave superconductivity in high- $T_c$  systems [Text] / Q.P. Li, B.E.C. Koltenbah, R. Joynt // Physical Review B. — 1993. — Vol. 48. — P. 437.
80. Unconventional pairing in the iron arsenide superconductors [Text] / R.M. Fernandes, D.K. Pratt, W. Tian [et al.] // Physical Review B. — 2010. — Vol. 81. — P. 140501.
81. Unconventional Pairing Originating from the Disconnected Fermi Surfaces of Superconducting  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  [Text] / K. Kuroki, S. Onari, R. Arita [et al.] // Physical Review Letters. — 2008. — Vol. 102. — P. 109902.
82. Evidence for a Nodal-Line Superconducting State in  $\text{LaFePO}$  [Text] / J.D. Fletcher, A. Serafin, L. Malone [et al.] // Physical Review Letters. — 2009. — Vol. 102. — P. 147001.
83. Absence of holelike Fermi surface in superconducting  $\text{K}_{0.8}\text{Fe}_{1.7}\text{Se}_2$  revealed by ARPES [Text] / T. Qian, X.-P. Wang, W.-C. Jin [et al.] // Physical Review Letters. — 2011. — Vol. 106. — P. 187001.
84. Nodeless superconducting gap in  $\text{A}_x\text{Fe}_2\text{Se}_2$  (A=K,Cs) revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy [Text] / Y. Zhang, L.X. Yang., M. Xu [et al.] // Nature Materials. — 2011. — Vol. 10. — P. 273–277.
85. The electron pairing of  $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  [Text] / F. Wang, F. Yang, M. Gao [et al.] //

- Europhysics Letters A. — 2011. — Vol. 93. — P. 57001.
86. Exotic *d*-Wave Superconducting State of Strongly Hole-Doped  $K_x\text{Ba}_{1-x}\text{Fe}_2\text{As}_2$  [Text] / R. Thomale, C. Platt, W. [et al.] // Physical Review Letters. — 2011. — Vol. 107. — P. 117001.
  87. Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions [Text] / R. Micnas, A. Mickiewicz, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz // Reviews of Modern Physics. — 1990. — Vol. 62. — P. 113–171.
  88. O'Donovan, C. Mixed order parameter symmetry in the BCS model [Text] / C. O'Donovan, J.P. Carbotte // Physica C: Superconductivity and its applications. — 1995. — Vol. 252. — P. 87–99.
  89. Mixed-symmetry superconductivity in two-dimensional Fermi liquids [Text] / K. Musaelan, J. Betouras, A. Chubukov, R. Joynt // Physical Review B. — 1995. — Vol. 53. — P. 3598.
  90. Liu, M. Mixed (*s+id*)-wave order parameters in the Van Hove scenario [Text] / M. Liu, D.Y. Xing, Z.D. Wang // Physical Review B. — 1997. — Vol. 55. — P. 3181.
  91. Kohen, A. Andreev Reflections on  $\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ : Evidence for an Unusual Proximity Effect [Text] / A. Kohen, G. Leibovitch, G. Deutscher // Physical Review Letters. — 2003. — Vol. 90. — P. 207005.
  92. Evidence of *s*-Wave Subdominant Order Parameter in  $\text{Y}_2\text{Ba}_3\text{CuO}_{7-\delta}$  from Break Junction Tunneling Spectra [Text] / A.I. Akimenko, F. Bobba, F. Giubileo [et al.] // Low Temperature Physics. — 2010. — Vol. 36. — P. 167.
  93. Das, T. Competing order scenario of two-gap behavior in hole-doped cuprates [Text] / T. Das, R.S. Markiewicz, A. Bansil // Physical Review B. — 2008. — Vol. 77. — P. 134516.
  94. Mechanism for a pairing state with time-reversal symmetry breaking in iron-based superconductors [Text] / C. Platt, R. Thomale, C. Honerkamp [et al.] //

- Physical Review B. — 2012. — Vol. 85. — P. 180502.
95. Near-degeneracy of several pairing channels in multiorbital models for the Fe pnictides [Text] / S. Graser, T.A. Maier, P.J. Hirschfeld, D.J. Scalapino // New Journal of Physics. — 2009. — Vol. 11. — P. 025016.
  96. Raman-Scattering Detection of Nearly Degenerate *s*-Wave and *d*-Wave Pairing Channels in Iron-Based  $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$  and  $\text{Rb}_{0.8}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_2$  Superconductors [Text] / F. Kretzschmar, B. Muschler, T. Böhm [et al.] // Physical Review Letters. — 2013. — Vol. 110. — P. 187002.
  97. Maiti, S. Collective modes in superconductors with competing *s*- and *d*-wave interactions [Text] / S. Maiti, P.J. Hirschfeld // Physical Review B. — 2015. — Vol. 92. — P. 094506.
  98. Yanigasawa, T. Physics of the Hubbard model and high temperature superconductivity [Text] / T. Yanigasawa // Journal of Physics: Conference Series. — 2008. — Vol. 108. — P. 012010.
  99. Hlubina, R. Phase diagram of the weak-coupling two-dimensional  $t-t'$  Hubbard model at low and intermediate electron density [Text] / R. Hlubina // Physical Review B. — 1999. — Vol. 59, no. 14. — P. 9600.
  100. Pairing symmetry of the one-band Hubbard model in the paramagnetic weak-coupling limit: A numerical RPA study [Text] / A.T. Rømer, A. Kreisel, I. Eremin [et al.] // Physical Review B. — 2015. — Vol. 92. — P. 104505.
  101. Superconducting phase diagram of itinerant antiferromagnets [Text] / A.T. Rømer, I. Eremin, P.J. Hirschfeld, B.M. Andersen // Physical Review B. — 2016. — P. 174519.
  102. Ground-state phase diagram of the repulsive fermionic  $t-t'$  Hubbard model on the square lattice from weak coupling [Text] / F. Šimkovic, X.-W. Liu, Y. Deng, E. Kozik // Physical Review B. — 2016. — Vol. 94. — P. 085106.
  103. Sacramento, P.D. Superconductivity in the Anderson lattice: a finite- $U$  slave boson description [Text] / P.D. Sacramento, J. Aparício, G.S. Nunes // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2010. — Vol. 22. — P. 065702.

104. Electronic phase separation in lightly doped  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [Text] / M. Matsuda, M. Fujida, K. Yamada [et al.] // Physical Review B. — 2002. — Vol. 65. — P. 134515.
105. Static magnetic correlations near the insulating-superconducting phase boundary in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [Text] / M. Fujita, K. Yamada, H. Hiraka [et al.] // Physical Review B. — 2002. — Vol. 65. — P. 064505.
106. Doping dependence of the spatially modulated dynamical spin correlations and the superconducting-transition temperature in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [Text] / K. Yamada, C.H. Lee, K. Kurahashi [et al.] // Physical Review B. — 1998. — Vol. 57. — P. 6165.
107. Static and dynamic spin fluctuations in superconducting  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [Text] / R.J. Birgeneau, Y. Endoh, K. Kakurai [et al.] // Physical Review B. — 1989. — Vol. 39. — P. 2868.
108. Novel phase transition in non-antiferromagnetically ordered crystals of  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [Text] / S.-W. Cheong, Z. Fisk, J.O. Willis [et al.] // Solid State Communications. — 1988. — Vol. 65. — P. 111.
109. Magnetic excitations in pure, lightly doped, and weakly metallic  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [Text] / B. Keimer, N. Belk, R.J. Birgeneau [et al.] // Physical Review B. — 1992. — Vol. 46. — P. 14034.
110. Angular Correlation of Gamma-Rays [Text] / M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane, Y. Endoh // Physical Review B. — 1998. — Vol. 70. — P. 897.
111. Gozar, A. Magnetic Order in Lightly Doped  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [Text] / A. Gozar, B.S. Dennis, G. Blumberg // Physical Review Letters. — 2004. — Vol. 93, no. 2. — P. 027001.
112. Antisymmetric exchange and its influence on the magnetic structure and conductivity of  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [Text] / T. Thio, T.R. Thurston, N.W. Preyer [et al.] // Physical Review B. — 1988. — Vol. 38. — P. 905.
113. Unusual Magnetic Susceptibility Anisotropy in Untwinned  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  Single Crystals in the Lightly Doped Region [Text] / A.N. Lavrov, Y. Ando,

- S. Komiya, I. Tsukada // *Physical Review Letters*. — 2001. — Vol. 87. — P. 017007.
114. Scalapino, D.J. Fermi-surface instabilities and superconducting d-wave pairing [Text] / D.J. Scalapino, E. Loh, J.E. Hirsch // *Physical Review B*. — 1987. — Vol. 35. — P. 6694–6698.
115. Structural and magnetic phase diagram of  $\text{CeFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  and its relation to high-temperature superconductivity [Text] / J. Zhao, Q. Huang, C. de la Cruz [et al.] // *Nature Materials*. — 2008. — Vol. 7. — P. 953–959.
116. Spin Susceptibility, Phase Diagram, and Quantum Criticality in the Electron-Doped High Tc Superconductor  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  [Text] / F. Ning, K. Ahilan, T. Imai [et al.] // *Journal of the Physical Society of Japan*. — 2009. — Vol. 78, no. 1. — P. 013711.
117. Baltensperger, W. Superconductivity in antiferromagnets [Text] / W. Baltensperger, S. Strässler // *Physik der kondensierten Materie*. — 1962. — Vol. 1, no. 1. — P. 20–26.
118. Bulaevskii, L. N. Helical ordering of spins in a superconductor [Text] / L. N. Bulaevskii, A. I. Rusinov, M. Kulić // *Journal of Low Temperature Physics*. — 1980. — Vol. 39, no. 3. — P. 255–272.
119. Ghosh, H. Interplay of spin density wave and superconductivity with different pairing symmetry [Text] / H. Ghosh, S. Sil, S.N. Behera // *Physica C: Superconductivity and its applications*. — 1999. — Vol. 316. — P. 34–44.
120. Nazario, Z. Coexistence of spin-density wave and d-wave superconducting order parameter [Text] / Z. Nazario, D.I. Santiago // *Physical Review B*. — 2004. — Vol. 70. — P. 144513.
121. Kobayashi, K. Interplay between antiferromagnetism and superconductivity in the Hubbard model with frustration [Text] / K. Kobayashi, H. Yokoyama // *Physica C: Superconductivity and Its Applications*. — 2009. — Vol. 469, no. 15. — P. 974 – 978. — Proceedings of the 21st International Symposium on

- Superconductivity (ISS 2008).
122. Kobayashi, K. Coexistence of Superconductivity and Antiferromagnetism and its Effects on Crossover as to Correlation Strength in Hubbard Model [Text] / K. Kobayashi, H. Yokoyama // Physics Procedia. — 2013. — Vol. 45. — P. 17 – 20. — Proceedings of the 25th International Symposium on Superconductivity (ISS2012).
  123. Magnetism and superconductivity in the  $t-t'-J$  model [Text] / L. Spanu, M. Lugas, F. Becca, S. Sorella // Physical Review B. — 2008. — Vol. 77. — P. 024510.
  124. Yamase, H. Coexistence of Incommensurate Magnetism and Superconductivity in the Two-Dimensional Hubbard Model [Text] / H. Yamase, A. Eberlein, W. Metzner // Physical Review Letters. — 2016. — Vol. 116. — P. 096402.
  125. Antiferromagnetic to superconducting phase transition in the hole- and electron-doped Hubbard model at zero temperature [Text] / M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, W. Hanke // Physical Review B. — 2006. — Vol. 74. — P. 024508.
  126. Reiss, J. Renormalized mean-field analysis of antiferromagnetism and  $d$ -wave superconductivity in the two-dimensional Hubbard model [Text] / J. Reiss, D. Rohe, W. Metzner // Physical Review B. — 2007. — Vol. 75. — P. 075110.
  127. Crossover between BCS Superconductor and Doped Mott Insulator of  $d$ -Wave Pairing State in Two-Dimensional Hubbard Model [Text] / H. Yokoyama, M. Ogata, Y. Tanaka [et al.] // Journal of the Physical Society of Japan. — 2013. — Vol. 82, no. 1. — P. 014707.
  128. Ivanov, D.A. Antiferromagnetism and phase separation in the  $t$ - $J$  model at low doping: A variational study [Text] / D.A. Ivanov // Physical review B. — 2004. — Vol. 70. — P. 104503.
  129.  $d$ -wave superconductivity and its coexistence with antiferromagnetism in the  $t$ - $J$ - $U$  model: Statistically consistent Gutzwiller approach [Text] / M. Abram, J. Kaczmarczyk, J. Jędrak, J. Spałek // Physical Review B. — 2013. —

- Vol. 88. — P. 094502.
130. Coexistence of ferromagnetism and high-temperature superconductivity in Dy-doped BiPbSrCaCuO [Text] / H. Berger, D. Ariosa, R. Gaal [et al.] // Surface Review and Letters. — 2002. — Vol. 09, no. 02. — P. 1109–1112.
  131. Coexistence of superconductivity and antiferromagnetism in multilayered high- $T_c$  superconductor  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_4\text{Cu}_5\text{O}_y$  : Cu-NMR study [Text] / H. Kotegawa, Y. Tokunaga, Y. Araki [et al.] // Physical Review B. — 2004. — Vol. 69. — P. 014501.
  132. Uniform Mixing of High- $T_c$  Superconductivity and Antiferromagnetism on a Single  $\text{CuO}_2$  Plane of a Hg-Based Five-Layered Cuprate [Text] / H. Mukuda, M. Abe, Y. Araki [et al.] // Physical Review Letters. — 2006. — Vol. 96. — P. 087001.
  133. Kivelson, S.A. Thermodynamics of the interplay between magnetism and high-temperature superconductivity [Text] / S.A. Kivelson, G. Aeppli, V.J. Emery // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2001. — Vol. 98, no. 21. — P. 11903–11907.
  134. Atkinson, W.A. Superfluid suppression in  $d$ -wave superconductors due to disordered magnetism [Text] / W.A. Atkinson // Physical Review B. — 2007. — Vol. 75. — P. 024510.
  135. J.W. Harter and B.M. Andersen and J. Bobroff and M. Gabay and P.J. Hirschfeld. Antiferromagnetic correlations and impurity broadening of NMR linewidths in cuprate superconductors [Text] / J.W. Harter and B.M. Andersen and J. Bobroff and M. Gabay and P.J. Hirschfeld // Physical Review B. — 2007. — Vol. 75. — P. 054520.
  136. Determination of the phase diagram of the electron-doped superconductor  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  [Text] / J.-H. Chu, J.G. Analytis, C. Kucharczyk, I.R. Fisher // Physical Review B. — 2009. — Vol. 79. — P. 014506.
  137. Dynamic Competition between spin-density wave order and superconductivity in underdoped  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  [Text] / M. Yi, Y. Zhang, Z.-K. Liu [et al.] //

- Nature Communications. — 2014. — Vol. 5. — P. 3711.
138. Electronic Phase Separation in Iron Selenide (Li,Fe)OHFeSe Superconductor System [Text] / Y. Mao, J. Li, Y. Huan [et al.] // Chinese Physics Letters. — 2018. — Vol. 35, no. 5. — P. 057402.
139. Vorontsov, A.B. Interplay between magnetism and superconductivity in the iron pnictides [Text] / A.B. Vorontsov, M.G. Vavilov, A.V. Chubukov // Physical Review B. — 2009. — Vol. 79. — P. 060508.
140. Fernandes, R.M. Competing order and nature of the pairing state in the iron pnictides [Text] / R.M. Fernandes, J. Schmalian // Physical Review B. — 2010. — Vol. 82. — P. 014521.
141. Matsui, Y. Coexistence of Antiferromagnetism and Superconductivity in Iron-Based Superconductors [Text] / Y. Matsui, T. Morinari, T. Tohyama // Journal of the Physical Society of Japan. — 2014. — Vol. 83, no. 9. — P. 094703.
142. Coexistence and competition of spin-density-wave and superconducting order parameters in iron-based superconductors [Text] / Q.-W. Wang, D.-Y. Liu, Y.-M. Quan, L.-J. Zou // Physics Letters A. — 2016. — Vol. 380, no. 34. — P. 2685–2692.
143. Гильмутдинов, В.Ф. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка в  $t - t'$  однозонной модели на квадратной решётке [Текст] / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // Химическая физика и мезоскопия. — 2016. — Т. 18. — С. 412–420.
144. Гильмутдинов, В.Ф. Зависимость симметрии сверхпроводящего параметра порядка от температуры и интеграла электронного переноса [Текст] / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // Химическая физика и мезоскопия. — 2017. — Т. 19. — С. 547–558.
145. Timirgazin, M.A. Phase diagrams of singlet superconducting states with mixed symmetry [Text] / M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov, A.K. Arzhnikov // Physica C: Superconductivity and its applications. — 2019. — Vol. 557. — P. 7–11.

146. Li, Q.P. Theory of dichroism in high-temperature superconductors [Text] / Q.P. Li, R. Joynt // Physical Review B. — 1991. — Sep. — Vol. 44. — P. 4720–4723.
147. Fogelström, M. Tunneling into Current-Carrying Surface States of High- $T_c$  Superconductors [Text] / M. Fogelström, D. Rainer, J.A. Sauls // Physical Review Letters. — 1997. — Jul. — Vol. 79. — P. 281–284.
148. Messiah, A. Quantum Mechanics [Text] / A. Messiah. — Amsterdam : North-Holland Pub. Co., 1961.
149. Тинхам, М. Введение в сверхпроводимость [Текст] / М. Тинхам. — Москва : Атомиздат, 1980.
150. Eremin, M.V. Energy gap dispersion in layered cuprates. Monolayer model [Text] / M.V. Eremin, I.A. Larionov // JETP letters. — 1995. — Vol. 62. — P. 203.
151. Cooper, L.N. Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas [Text] / L.N. Cooper // Physical Review. — 1956. — Vol. 104. — P. 1189.
152. Markiewicz, R.S. A survey of the Van Hove scenario for high- $T_c$  superconductivity with special emphasis on pseudogaps and striped phases [Text] / R.S. Markiewicz // Journal of Physics and Chemistry of Solids. — 1997. — Vol. 58, no. 8. — P. 1179–1310.
153. Model for low-energy electronic states probed by x-ray absorption in high- $T_c$  cuprates [Text] / M.S. Hybertsen, E.B. Stechel, W.M.C. Foulkes, M. Schlüter // Physical Review B. — 1992. — Vol. 45. — P. 10032.
154. Powell, B.J. Quantum frustration in organic Mott insulators: from spin liquids to unconventional superconductors [Text] / B.J. Powell, R.H. McKenzie // Reports on Progress in Physics. — 2011. — Vol. 74, no. 5. — P. 056501.
155. Самохин, В.П. Введение в теорию Сверхпроводимости [Текст] / В.П. Самохин, К.В. Минеев. — Москва : Издательство МФТИ, 1998. — С. 17.
156. Szcześniak, R. Electron-phonon pairing mechanism: cuprates with high value of the critical temperature [Text] / R. Szcześniak, A.P. Durajski //

- arXiv:1206.5531v1. — 2012.
157. Durajski, A.P. Doping dependence of critical temperature for superconductivity induced by hole-phonon interaction [Text] / A.P. Durajski // *Physics Letters A*. — 2017. — Vol. 381. — P. 3332–3336.
  158. Crossover from weak to strong pairing in unconventional superconductors [Text] / D.S. Inosov, J.T. Park, A. Charnukha [et al.] // *Physical Review B*. — 2011. — Vol. 83. — P. 214520.
  159. One-band tight-binding model parametrization of the high- $T_c$  cuprates including the effect of  $k_z$  dispersion [Text] / S. Markiewicz, R. S. Sahrakorpi, M. Lindroos [et al.] // *Physical Review B*. — 2005. — Vol. 72. — P. 054519.
  160. A universal relationship between magnetic resonance and superconducting gap in unconventional superconductors [Text] / G. Yu, Y. Li, E.M. Motoyama, M. Greven // *Letter Nature Physics*. — 2009. — Vol. 5. — P. 873–875.
  161. Incommensurate magnetic order and phase separation in two-dimensional Hubbard model with nearest- and next-nearest-neighbor hopping [Text] / P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, A.K. Arzhnikov [et al.] // *Physical Review B*. — 2010. — Vol. 81. — P. 094407.
  162. Spiral magnetism in the single-band Hubbard model: the Hartree–Fock and slave-boson approaches [Text] / P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov [et al.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2015. — Vol. 27, no. 44. — P. 446002.
  163. Renormalization from density-functional theory to strong-coupling models for electronic states in Cu-O materials [Text] / M.S. Hybertsen, E.B. Stechel, M. Schluter, D.R. Jennison // *Physical Review B*. — 1990. — Vol. 41. — P. 11068–11072.
  164. Chubukov, Andrey V. Magnetic phases of the two-dimensional Hubbard model at low doping [Text] / Andrey V. Chubukov, Karen A. Musaelian // *Physical Review B*. — 1995. — Vol. 51, no. 18. — P. 12605–12617.
  165. Гильмутдинов, В.Ф. Сосуществование магнетизма и сверхпроводимости

- в высокотемпературных сверхпроводниках [Текст] / В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников // Химическая физика и мезоскопия. — 2018. — Т. 20, № 3. — С. 365–377.
166. Кучинский, Э.З. Обобщённая теория динамического среднего поля в физике сильнокоррелированных систем [Текст] / Э.З. Кучинский, И.А. Некрасов, М.В. Садовский // Успехи физических наук. — 2012. — Т. 182, № 4. — С. 345–378.
167. Kurganskii, S.I. Integration over the Two-Dimensional Brillouin Zone [Text] / S.I. Kurganskii, O.I. Dubrovskii, E.P. Domashevskaya // Physica Status Solidi (B). — 1985. — Vol. 129, no. 1. — P. 293–299.
168. Шкловский, Б.И. Электронные свойства легированных полупроводников [Текст] / Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. — Москва : Наука, 1979.