Письма в ЖЭТФ, том 99, вып. 10, с. 687 – 703 © 2014 г. 25 мая

ПО ИТОГАМ ПРОЕКТОВ
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Проект РФФИ # 11-02-00147

Электронная структура новых сверхпроводников на основе железа: от пниктидов к халькогенидам и другим аналогичным системам

И. А. Некрасов[+1)], *М. В. Садовский*[+*1)]

[+]*Институт электрофизики УрО РАН, 620016 Екатеринбург, Россия*

[*]*Институт физики металлов УрО РАН, 620990 Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 21 апреля 2014 г.

В обзоре обсуждаются и сравниваются электронные спектры новых высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на основе железа, а также ряда других химически аналогичных соединений. Особое внимание уделено халькогениду железа $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$, изоструктурному пниктиду $BaFe_2As_2$ (122). Показано, что поверхности Ферми для $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ существенно отличаются от таковых в пниктидах. При помощи LDA+DMFT- и LDA′+DMFT-расчетов продемонстрировано, что электронные корреляции в $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ оказывают существенно большее влияние на электронную структуру, нежели в наиболее изученной системе 122. Также обсуждается электронная структура нескольких многозонных сверхпроводников, аналогичных по химическому составу железосодержащим ВТСП, но имеющих относительно небольшую T_c (таких, как $SrPt_2As_2$, APt_3P, $(Sr,Ca)Pd_2As_2$), и несверхпроводящего соединения $BaFe_2Se_3$. Показано, что электронная структура данных систем существенно отличается от ранее изученных пниктидов и халькогенидов железа. Величина T_c в этих системах может быть понята на основе простой модели Бардина–Купера–Шиффера.

DOI: 10.7868/S0370274X14100099

1. Введение. Открытие нового класса сверхпроводников на основе железа [1] привлекло огромное внимание. Это привело к существенному всплеску экспериментальных и теоретических исследований (см. обзоры [2–4]). Известные сейчас сверхпроводники на основе железа делятся на два класса: пниктиды и холькогениды. Перечислим основных представителей этих классов, изучаемых в настоящее время (детальные ссылки на экспериментальные работы можно найти в [5]):

1) легированные системы RE1111 (RE = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Tb, Dy) с температурой сверхпроводящего перехода T_c порядка 25–55 K, имеющие химическую формулу RE $O_{1-x}F_xFeAs$;

2) легированные системы A122 (A = Ba, Sr), такие, как $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$, с T_c около 38 K;

3) так называемые 111 системы типа $Li_{1-x}FeAs$ с $T_c \sim 18$ K;

4) $(Sr, Ca, Eu)FFeAs$ с $T_c \sim 36$ K;

5) $FeSe_x$, $FeSe_{1-x}Te_x$ с T_c до 14 K;

6) $(K, Cs)_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ с T_c до 31 K.

Последовавший за открытием высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в арсенидах железа интенсивный поиск позволил получить несколько новых сверхпроводящих систем, которые можно считать химическими аналогами ферропниктидов и феррохалькогенидов (например, $BaNi_2As_2$ [6], $SrNi_2As_2$ [7], $SrPt_2As_2$ [8], SrPtAs [9]). Однако данные системы обладают достаточно низкой температурой сверхпроводящего перехода T_c. Недавно было открыто еще несколько систем на основе платины: APt_3P (A = Sr, Ca, La) [10] с T_c, равной 8.4, 6.6 и 1.5 K соответственно. Вызывала интерес система $BaFe_2Se_3$ (Ba123) [11], которая рассматривалась как потенциальный сверхпроводник, аналогичный $(K,Cs)Fe_2Se_2$ (по предварительным данным в ней наблюдалась сверхпроводимость с $T_c \sim 11$ K). Однако затем было показано, что сверхпроводимость в Ba123 не проявляется вплоть до 1.8 K [12]. Данная система оказалась антиферромагнитной (АФМ) "спиновой лестни-

1) e-mail: nekrasov@iep.uran.ru; sadovski@iep.uran.ru

цей" с нетривиальным упорядочением [11, 12]. Сверхпроводимость была также открыта и в соединениях на основе палладия, (Sr,Ca)Pd_2As_2, со значениями $T_c = 0.92$ и 1.27 K соответственно [13].

Данный обзор основан на нашем цикле работ по исследованию электронной структуры всех указанных систем в рамках теории функционала плотности и современных методов учета сильных корреляций, таких, как LDA+DMFT [14] и LDA′+DMFT [15, 16] для халькогенидов железа [17, 18], а также на результатах LDA-расчетов для вышеупомянутых сопутствующих систем [19–22].

Этим работам предшествовала достаточно большая серия наших работ по пниктидам и халькогенидам железа [23–27], результаты которой достаточно подробно отражены в обзорах [2, 5].

Все представленные в данной статье LDA-расчеты зонной структуры выполнены с использованием базиса линеаризованных маффин-тин орбиталей (LMTO) [28] с набором установок по умолчанию.

Как мы увидим, все рассмотренные системы являются типичными многозонными сверхпроводниками, что и делает их потенциально интересными с точки зрения поисков ВТСП [29, 30].

2. Электронная структура и корреляции в халькогенидах железа. *2.1. Система* KFe_2Se_2. Одними из наиболее интересных систем на основе халькогенидов железа, изучавшихся в последние годы, являются соединения типа $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ [31], $Cs_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ [11] и (Tl, K)$Fe_{1-x}Se_{2-y}$ [32]. Экспериментально показано, что в соединении $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ наблюдается нетривиальный АФМ-порядок с достаточно высокой температурой Нееля – 550 K. Одновременно практически в той же области температур в этой системе происходит и упорядочение вакансий в подрешетке железа [33]. Фактически в системе $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ наблюдается большое количество различных фаз. Поэтому до сих пор, строго говоря, неизвестна фаза, являющаяся прародительницей сверхпроводящей фазы. В ряде работ предложено считать, что исходной для сверхпроводимости фазой служит стехиометрический состав KFe_2Se_2 [5, 34, 35]. Однако имеются и другие точки зрения [36]. Примечательно, что синтезировать кристалл KFe_2Se_2 со стехиометрическим составом пока не удалось.

Важным шагом в изучении данного селенида стало измерение спектра фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) для состава $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ [37]. Согласно результатам этих экспериментов квазичастичные дисперсии заметно перенормированы взаимодействием. Например, экспериментально полученная величина перенормировки квазичастичной массы для Fe-$3d_{xz,yz}$-орбиталей равна 3, а для Fe-$3d_{xy}$-орбитали – 10. Эти факты ясно указывают на необходимость теоретического изучения влияния электрон-электронных взаимодействий на свойства данной системы.

Впервые электронный спектр $K_{1-x}Fe_2Se_2$ в LDA-приближении был получен в работах [27, 38].

Кристаллическая структура. Как уже отмечалось выше, системы $K_{1-x}Fe_2Se_2$ и $Cs_{1-x}Fe_2Se_2$ являются структурными аналогами Ba122 (см. работу [24]). Они имеют следующие параметры кристаллической структуры: для $K_{1-x}Fe_2Se_2$ $a = 3.9136$ Å, $c = 14.0367$ Å, $z_{Se} = 0.3539$ [31]; для $Cs_{1-x}Fe_2Se_2$ $a = 3.9601$ Å, $c = 15.2846$ Å, $z_{Se} = 0.3439$ [11].

Электронная структура. На рис. 1 проведено сравнение зонной структуры и плотностей состояний Ba122 [24] (слева) с соответствующими расчетными данными для $K_{1-x}Fe_2Se_2$ (черные линии) и $Cs_{1-x}Fe_2Se_2$ (серые линии) (справа) для стехиометрических составов с $x = 0$ [27]. Сравнивая системы $K_{1-x}Fe_2Se_2$ и $Cs_{1-x}Fe_2Se_2$, можно отметить, что они имеют практически одинаковую электронную структуру. В отличие от Ba122 в этих системах Fe-3*d*- и Se-4*p*-состояния разделены по энергии. Кроме того, в AFe_2Se_2 Se-4*p*-состояния на 0.7 эВ ниже, чем As-4*p*-состояния.

Аналогично Ba122 на уровень Ферми в исследуемых халькогенидах выходят практически только Fe-3*d*-состояния. Так же как и для Ba122 [24] и других ферропниктидов, основной вклад в плотность состояний на уровне Ферми дают t_{2g}-состояния (xy, xz и yz). Состояния e_g-симметрии ($3z^2-r^2$ и x^2-y^2) практически не дают вклад на уровне Ферми. Главное различие между Ba122 и новыми системами наблюдается около Γ-точки. Для (K, Cs)Fe_2Se_2 в направлении Z–Γ антисвязывающая часть Se-$4p_z$-орбитали образуют электронный карман. В Ba122 соответствующая зона лежит на 0.4 эВ выше и проходит намного круче. Таким образом, данная зона проходит достаточно далеко от Γ-точки. Тем не менее если пролегировать системы (K, Cs)Fe_2Se_2 дырками, то полученная в окрестности уровня Ферми зонная структура (при величине дырочного легирования 60 %) будет схожа с зонами Ba122 (три дырочных цилиндра). Стехиометрическая система KFe_2Se_2 имеет один маленький электронный карман и больший дырочный карман. В $CsFe_2Se_2$ есть только один электронный карман возле Γ-точки.

На рис. 2 показаны поверхности Ферми, полученные в LDA-расчетах для $K_{1-x}Fe_2Se_2$ (вверху) и $Cs_{1-x}Fe_2Se_2$ (внизу) для различных уровней легиро-

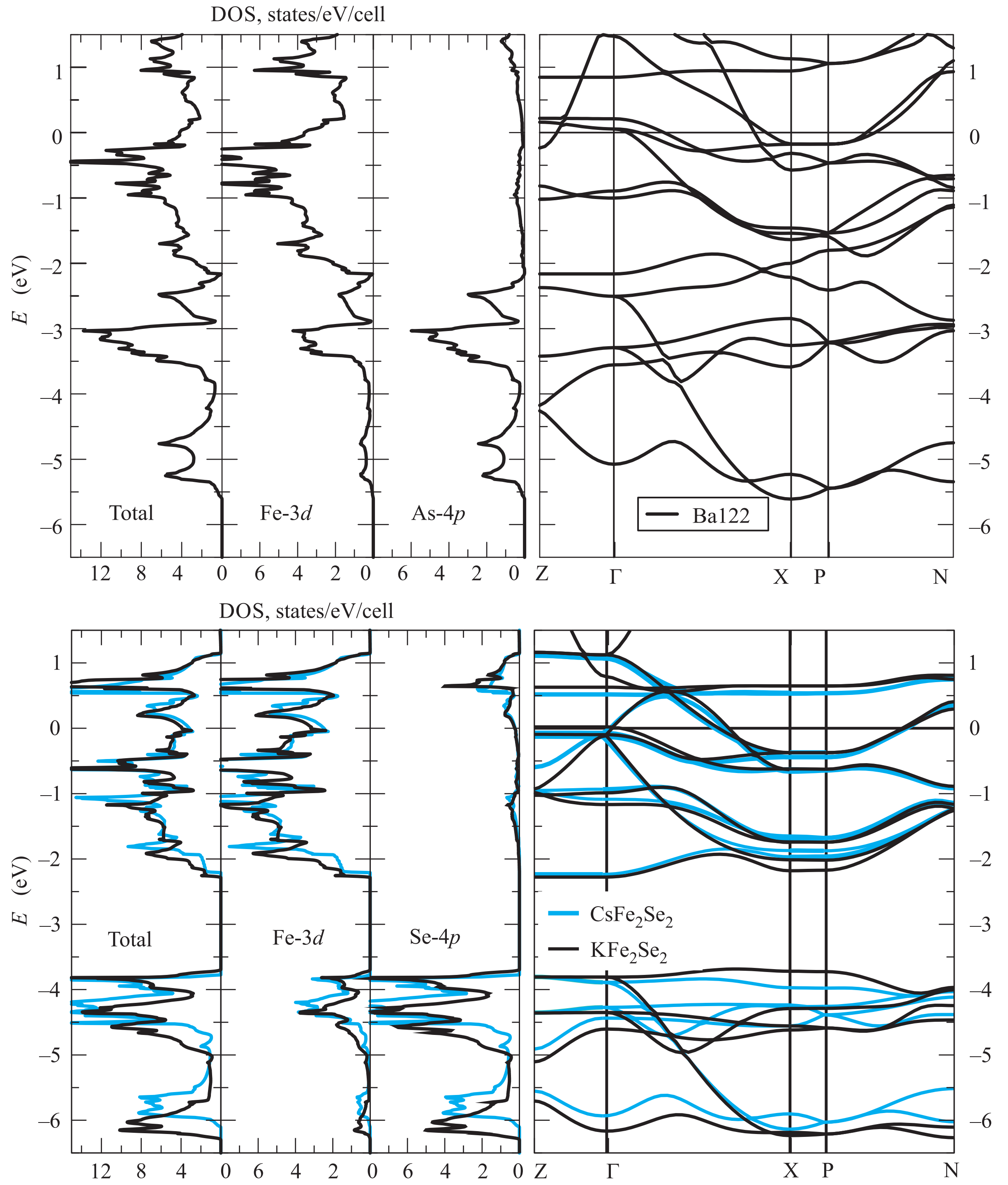

Рис. 1. Зонные дисперсии и плотности состояний для Ba122 (слева), а также KFe_2Se_2 (черные линии) и $CsFe_2Se_2$ (серые линии) (справа), полученные в LDA-расчетах. Уровень Ферми – нуль энергий

вания: $x = 0$ (слева), 0.2 (в середине) и 0.6 (справа). Во всех случаях вне зависимости от уровня легирования имеются два практически двумерных электронных листа в углах зоны Бриллюэна. Наибольшие отличия систем $(K, Cs)Fe_2Se_2$ от пниктида Ba122 наблюдаются вокруг Γ-точки, особенно для $x = 0$ и 0.2. Для уровня легирования $x = 0.6$ оба селенида, с K и Cs, имеют поверхности Ферми, схожие с Ba122 (см. рис. 2 и работу [24]), с типичными дырочными цилиндрами в центре зоны Бриллюэна.

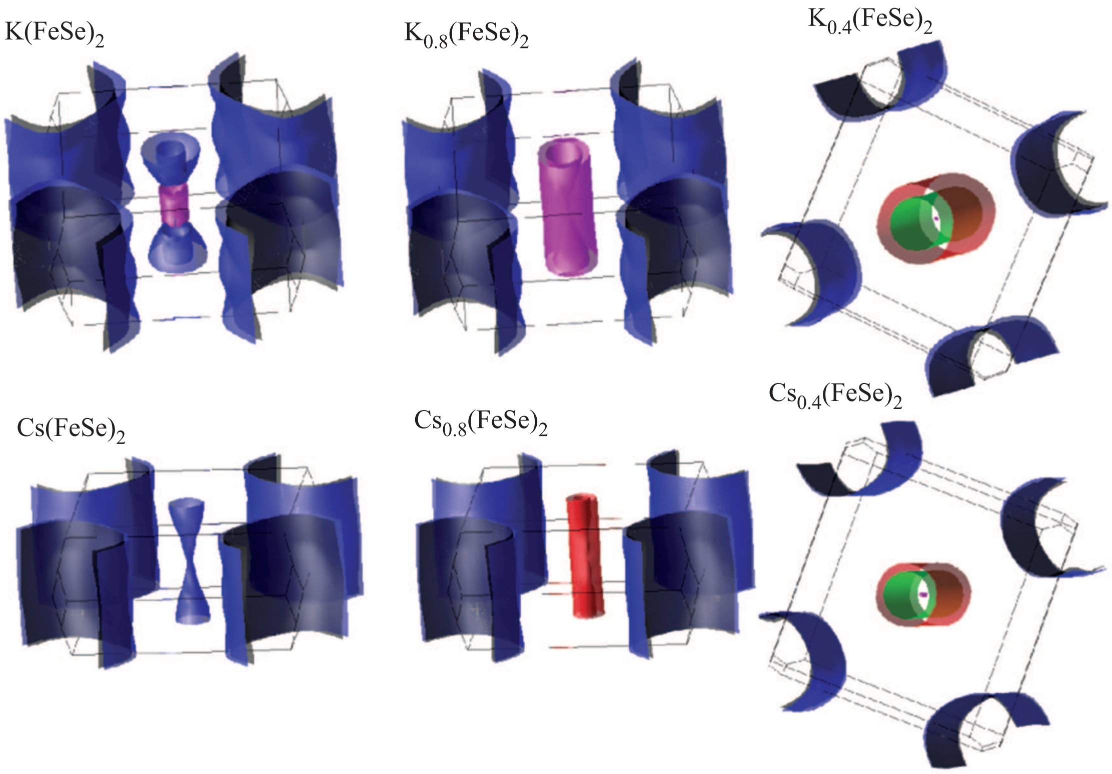

Рис. 2. Поверхности Ферми, полученные в LDA-расчетах для $K_{1-x}Fe_2Se_2$ (вверху) и $Cs_{1-x}Fe_2Se_2$ (внизу) для различных уровней легирования: $x = 0$ (слева), 0.2 (в середине) и 0.6 (справа)

Таким образом, для уровней легирования, соответствующих составам, в которых наблюдается сверхпроводимость, топология поверхностей Ферми сильно отличается от таковой в Ba122. В частности, отсутствует какой-либо "нестинг" электронных и дырочных поверхностей Ферми (который во многих работах по пниктидам считался важным для объяснения их магнитных свойств и высокотемпературной сверхпроводимости).

В работе [11] было показано, что температура сверхпроводящего перехода T_c исследуемых K- и Cs-материалов зависит от высоты Se над плоскостью ионов Fe [39]. Подробно этот вопрос исследовался в нашей работе [40]. Сделаем простые оценки, используя стандартное выражение для T_c в теории Бардина–Купера–Шиффера (БКШ): $T_c = 1.14\omega_D e^{-2/gN(E_F)}$. Величина полной плотности состояний на уровне Ферми $N(E_F)$ составляет 3.94 сост./эВ/эл.яч. для KFe_2Se_2 и 3.6 сост./эВ/эл.яч. для $CsFe_2Se_2$. Взяв частоту Дебая $\omega_D = 350$ K и константу связи $g = 0.21$ эВ, полученную для Ba122 (см. работу [40]), находим $T_c = 34$ и 28.6 K для K- и Cs-селенидов соответственно (отношение T_c для данных систем равно 1.18). Эти оценки достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными (31 [31] и 27 K, отношение величин T_c равно 1.15) [11]. Меньшие значения T_c в $CsFe_2Se_2$ могут быть объяснены изотопическим эффектом. Согласно представленным расчетам при дырочном легировании 60 % величина $N(E_F)$ возрастет до 4.9 сост./эВ/эл.яч в K-селениде и 4.7 сост./эВ/эл.яч в Cs-селениде. Поэтому можно ожидать, что соответствующие температуры сверхпроводящего перехода для таких легированных систем составят 57 и 52 K.

Отметим, что в приведенных рассуждениях не обязательно предполагается электрон-фононный механизм сверхпроводимости, а величина ω_D может относиться к любому бозонному возбуждению, ответственному за спаривание (например, спиновые флуктуации).

2.2. Система $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$. Для исследования корреляционных эффектов в системах $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ [17] и $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ в зависимости от величины дырочного легирования [18] использовался стандартный LDA+DMFT-подход [14], а также разработанная нами его модификация LDA′+DMFT [15, 16], позволяющая более последовательно решить проблему "двойного учета" кулоновского взаимодействия [41].

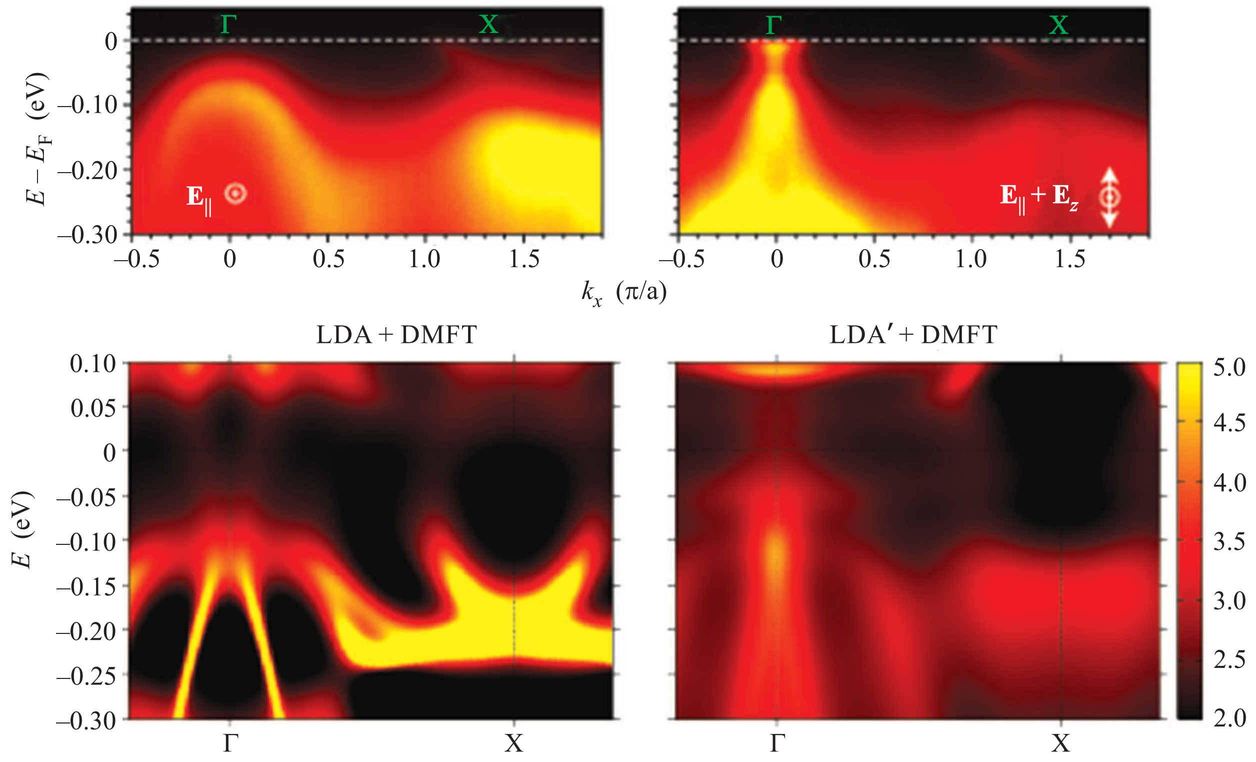

Рис. 3. Сравнение спектральных функций расчетов LDA+DMFT (слева внизу) и LDA′+DMFT (справа внизу) с ARPES-спектром (сверху) для $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$. Интенсивность спектральной функции обозначена цветом. Нуль энергии – уровень Ферми

Для начала обсудим зонные структуры стехиометрического состава KFe_2Se_2, полученные в LDA- и LDA′-расчетах. Так же как и для оксидов переходных металлов (см. работы [15, 16]), LDA′-расчеты для KFe_2Se_2 дают энергетические дисперсии на уровне Ферми, схожие по форме с LDA-результатами. Однако около Г-точки имеются небольшие расхождения. Энергетический сдвиг Se-4p зоны в LDA′-расчете вниз по энергии относительно LDA-зон составляет примерно 0.5 эВ (см. работу [18]).

Для DMFT-расчетов величины кулоновского и обменного взаимодействий электронов на Fe-3d-оболочке были выбраны равными $U = 3.75$ эВ и $J = 0.56$ эВ соответственно [37]. Расчеты DMFT(QMC) выполнялись со следующими параметрами: обратная температура $\beta = 40$ эВ$^{-1}$ (290 K), число интервалов на мнимом времени $L = 180$, число переворотов псевдоспинов при самосогласовании $\sim 10^6$. Для системы $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ полное число электронов для DMFT-расчетов бралось равным $n_e = 26.52$.

Для данного уровня легирования в окрестности уровня Ферми учет локального кулоновского взаимодействия привел к следующему [17]. Для состояний Fe-3$d_{x^2-y^2}$-орбитали практически ничего не изменилось. Для Fe-3$d_{3z^2-r^2}$-состояний над уровнем Ферми появился пик хаббардовской зоны. Для Fe-3$d_{xz,yz}$- и Fe-3d_{xy}-орбиталей произошло сильное изменение плотности состояний, напоминающее псевдощелевое поведение. Таким образом, уже из анализа плотностей состояний можно заключить, что корреляционные эффекты в соединении $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ достаточно существенны. При этом для разных орбитальных состояний их роль различна. Наиболее сильны они для Fe-3$d_{xz,yz}$- и Fe-3d_{xy}-орбиталей.

На рис. 3 приведено сравнение спектральных функций, посчитанных в подходах LDA+DMFT (слева внизу) и LDA′+DMFT (справа внизу), с фотоэмиссионным спектром с угловым разрешением ARPES для различных типов поляризации (сверху) [37] для химсостава $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$. Вверху слева изображен ARPES-спектр, полученный с помощью света, поляризованного вдоль плоскости слоев атомов железа, а вверху справа – спектр, полученный от суммы поляризаций вдоль и поперек этих слоев. Снизу приведены полученные в LDA+DMFT- и LDA′+DMFT-расчетах спектральные функции

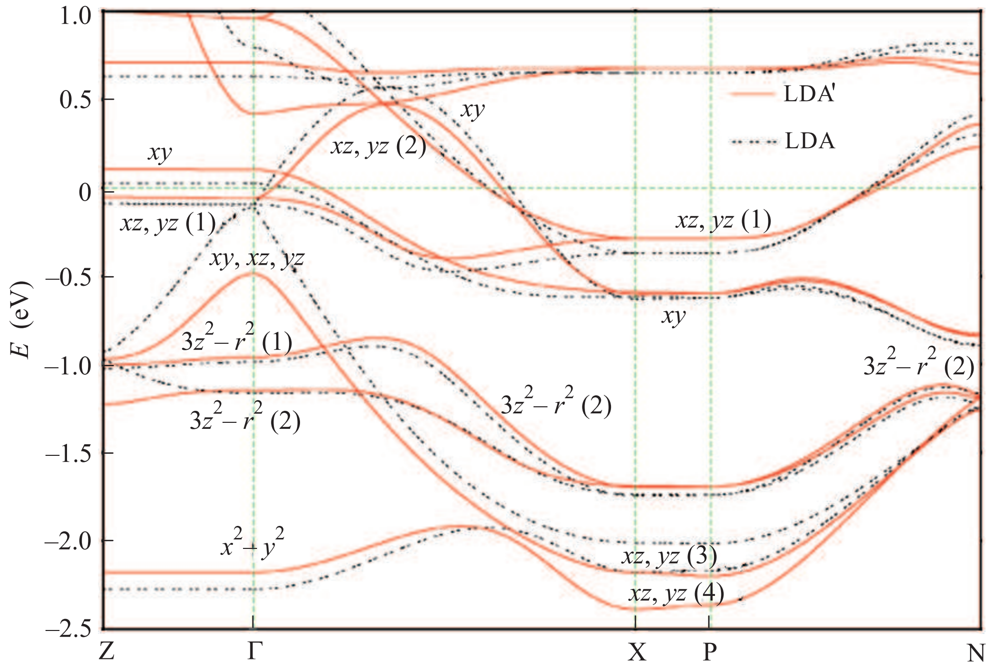

Рис. 4. (Цветной онлайн) Энергетические дисперсии из LDA$'$-расчета (красные линии) KFe_2Se_2 вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна с обозначением зон, для которых были подобраны коэффициенты корреляционной перенормировки. Черные линии – энергетические дисперсии LDA-расчета. Нуль энергии соответствует уровню Ферми

вдоль экспериментально изучавшегося направления Γ–X в том же интервале по энергии.

Из спектральных функций и ARPES-спектров видно, что около уровня Ферми (± 0.05 эВ) не наблюдается выраженных максимумов интенсивности за исключением окрестности Γ-точки в эксперименте с полной поляризацией. Данный факт указывает на то, что $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ является плохим металлом, и подтверждает псевдощелевое поведение, проявляющееся в плотностях состояний [17]. Область высокой интенсивности около X-точки в ARPES-спектрах находится в интервале энергий от -0.25 до -0.1 эВ. Там же расположены квазичастичные зоны в LDA+DMFT и LDA$'$+DMFT спектральных функциях. Вблизи Γ-точки в одном из ARPES-спектров наблюдается энергетическая дисперсия с широким максимумом, а в другом – энергетическая дисперсия с более резким максимумом, которая доходит до уровня Ферми. В рассчитанных спектральных функциях в данной области энергий присутствуют две квазичастичные зоны. Форма квазичастичной зоны с широким максимумом в спектральных функциях, полученных в LDA+DMFT и LDA$'$+DMFT, примерно одинакова. Форма квазичастичной зоны с узким максимумом в LDA$'$+DMFT оказывается ближе к соответствующей энергетической дисперсии в ARPES-спектре (см. рис. 3).

Таким образом, мы видим, что для селенида железа $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ корреляционные эффекты играют важную роль. Они приводят к заметному изменению LDA энергетических дисперсий. В отличие от арсенидов железа, где квазичастичные зоны вблизи уровня Ферми хорошо определены [42–45], в соединении $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ на уровне Ферми наблюдается их сильное подавление. Это также подтверждает тот факт, что корреляционные эффекты в селениде железа $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ более сильны, нежели в арсенидах железа. Величина квазичастичной перенормировки (корреляционного сужения) зон на уровне Ферми определяется фактором 4–5, тогда как в арсенидах железа этот фактор равен 2–3 [45] при одних и тех же величинах параметров взаимодействия.

Поскольку электронные свойства системы $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ в области уровня Ферми подвержены сильному влиянию корреляционных эффектов, возникает вопрос: как изменяются корреляционные эффекты при разных степенях легирования соединения $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$? Для изучения этого вопроса в работе [18] было выбрано еще три уровня легирования: один соответствует стехиометрическому составу ($n_e = 29.00$), а два других – промежуточные с полным числом электронов $n_e = 28.00$ и $n_e = 27.20$. Так как для соединения $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ результаты, полученные в рамках LDA$'$+DMFTподхода, лучше согласуются с ARPES-спектром, для дополнительных уровней легирования проводились только LDA′+DMFT-расчеты. Было показано, что форма и положение одинаковых квазичастичных зон заметно трансформируются при изменении уровня легирования. Положение квазичастичных зон друг относительно друга также изменяется. Тем самым в зависимости от степени легирования изменяется и роль корреляционных эффектов для каждой из квазичастичных зон по отдельности. Для определения влияния локального кулоновского взаимодействия на каждую из зон в Fe-3d-полосе для рассмотренных четырех уровней легирования были найдены коэффициенты корреляционной перенормировки и величины смещений LDA′-зон для совпадения с максимумами спектральных функций LDA′+DMFT-расчетов. Полученные коэффициенты перенормировки и величины смещений (в скобках) LDA′-зон приведены в таблице. Смещения указаны в шкале энергий LDA′-зон в электронвольтах.

На рис. 4 черными пунктирными линиями представлены энергетические дисперсии LDA-расчета. По форме и положению они сходны с энергетическими дисперсиями LDA′-расчета. Поэтому коэффициенты корреляционной перенормировки в LDA+DMFT-расчетах будут примерно такими же, как и в LDA′+DMFT-расчетах (таблица). Данные для состава $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ ($n_e = 26.52$) подтверждают этот вывод.

Энергетические дисперсии LDA′-расчета, расположенные в области от -1.0 до 0.4 эВ, перенормируются взаимодействием сильнее, чем энергетические дисперсии, лежащие ниже -1.0 эВ. Коэффициенты корреляционной перенормировки зон $3z^2-r^2$ (2), xz, yz (3), xz, yz (4) и x^2-y^2 (см. рис. 4 и таблицу), которые расположены в LDA′-расчете ниже -1.0 эВ, близки к коэффициенту корреляционной перенормировки Fe-3d-полосы целиком. Зона xz, yz, xy, расположенная в интервале от -1.0 до -0.5 эВ, также слабо перенормируется, как и вся Fe-3d-полоса, а ее коэффициент корреляционной перенормировки практически не зависит от уровня легирования. Величина коэффициента корреляционной перенормировки зоны xz, yz (2) слабо зависит от степени легирования и составляет около 2.5, хотя данная зона находится близко к уровню Ферми. Коэффициент корреляционной перенормировки зоны $3z^2-r^2$ (1) резко возрастает до значения 4.7 при заполнении $n_e = 26.52$.

Для зоны xz, yz (1) величина корреляционной перенормировки в нижней хаббардовской зоне монотонно растет с увеличением степени легирования, а в верхней – монотонно убывает. Для зоны xy зависимость от степени легирования немонотонна. В ее нижней хаббардовской зоне корреляционные эффекты растут с увеличением дырочного легирования достигают максимума при $n_e = 27.20$, а затем уменьшаются. В верхней хаббардовской xy-зоне при заполнениях $n_e = 29.00$ и 27.20 величина корреляционной перенормировки достаточно велика (около 4.0). При полном заполнении ($n_e = 28.00$) она меньше (1.7), а при $n_e = 26.52$ верхняя хаббардовская xy-зона отсутствует.

Таким образом, для соединения $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ дырочное легирование от стехиометрического состава KFe_2Se_2 до химсостава $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ приводит к росту силы корреляционных эффектов при неизменных величинах прямого (хаббардовского, U) и обменного (хундовского, J) кулоновских взаимодействий. Эти эффекты различны для разных квазичастичных зон, а также для разных частей зоны Бриллюэна.

Возможно, главным качественным проявлением более сильной роли корреляционных эффектов в рассматриваемой системе, в отличие от всех изученных ранее сверхпроводников на основе железа, является отсутствие хорошо определенных квазичастичных зон в непосредственной окрестности уровня Ферми.

3. Новые сверхпроводники – химические аналоги пниктидов железа. *3.1. Система* $SrPt_2As_2$. *Кристаллическая структура.* В работе [46] показано, что $SrPt_2As_2$ имеет орторомбическую структуру с пространственной группой симметрии $Pmmn$. В некотором смысле эта система напоминает тетрагональную кристаллическую структуру типа $CaBe_2Ge_2$ с пространственной группой симметрии $P4/nmm$. Данная структура изображена на рис. 5. В ней имеется два слоя тетраэдров, $PtAs_4$ и $AsPt_4$, в элементарной ячейке. В одном слое квадратную решетку образуют ионы платины, в другом – мышьяка. На рис. 5 соответствующие тетраэдры выделены линиями. Наиболее похожей на $SrPt_2As_2$ с точки зрения химической формулы является ВТСП-система $BaFe_2As_2$ [47]. Однако в последней в элементарной ячейке имеется два зеркально перевернутых друг относительно друга слоя тетраэдров $FeAs_4$ [24]. Отметим, что большинство пниктидов железа тоже имеет структуру $P4/nmm$ [40]. В расчетах мы использовали идеализированную тетраэдрическую структуру с группой симметрии $P4/nmm$ (детали см. в работе [19]). Параметры тетраэдрической кристаллической структуры можно получить, усредняя a ($a = 4.482$ Å) и b ($b = 4.525$ Å) для орторомбической фазы. Параметр c мы оставляли равным 9.869 Å.

Величины коэффициентов корреляционной перенормировки отдельных LDA′-зон, обозначенных на рис. 4. В скобках приведены смещения в шкале энергий LDA′-зон (в эВ)

Орбитальный характер	$n_e = 26.52$	$n_e = 27.20$	$n_e = 28.00$	$n_e = 29.00$
xy, LHB xy, UHB	1.5 (−0.23) нет	3.9 (−0.73) ∼4.0 (+0.60)	2.65 (−0.61) 1.7 (+0.25) часть (верх)	1.7 (−0.35) ∼4.0 (+0.75)
xz, yz (1) LHB xz, yz (1) UHB	4.2 (−0.78) 1.6 (+0.19)	3.0 (−0.75) ∼2.5 (+0.48)	2.6 (−0.69) 3.0 (+0.56)	1.7 (−0.38) 4.0 (+0.77)
xz, yz (2)	2.3 (−0.48)	∼2.5 (−0.60)	2.6 (−0.69)	1.7 (−0.38)
xz, yz, xy	1.2 (−0.1)	1.3 (−0.09)	1.3 (−0.10)	1.4 (−0.17)
$3z^2{-}r^2$ (1) $3z^2{-}r^2$ (2)	4.7 (−0.85) 1.1 (+0.25)	2.0 (−0.30) 1.3 (0.00)	1.3 (−0.03) 1.3 (−0.03)	1.25 (0.00) 1.25 (0.00)
xz, yz (3) xz, yz (4)	1.1 (+0.10) 1.1 (+0.10)	1.1 (+0.17) 1.1 (+0.15)	1.0 (+0.40) 1.0 (+0.35)	1.4 (−0.10) 1.4 (−0.17)
$x^2{-}y^2$	1.1 (+0.20)	1.0 (+0.32)	1.3 (−0.07)	1.3 (−0.07)
Fe3d-полоса целиком	1.3	1.3	1.25	1.25

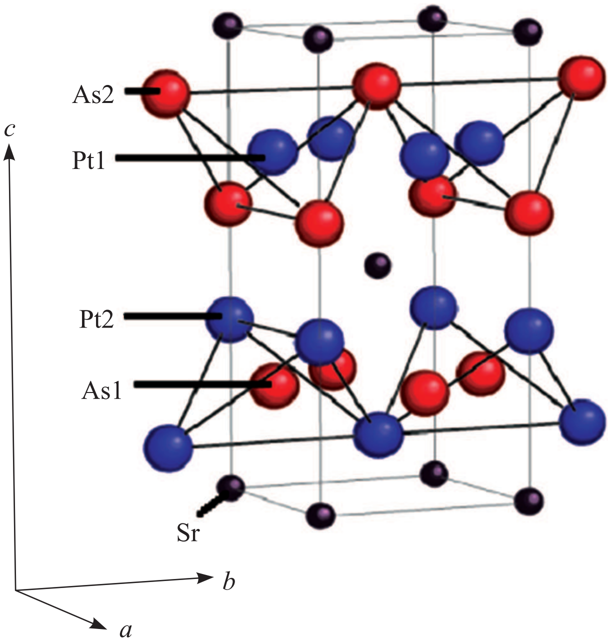

Рис. 5. Идеализированная тетрагональная кристаллическая структура $SrPt_2As_2$

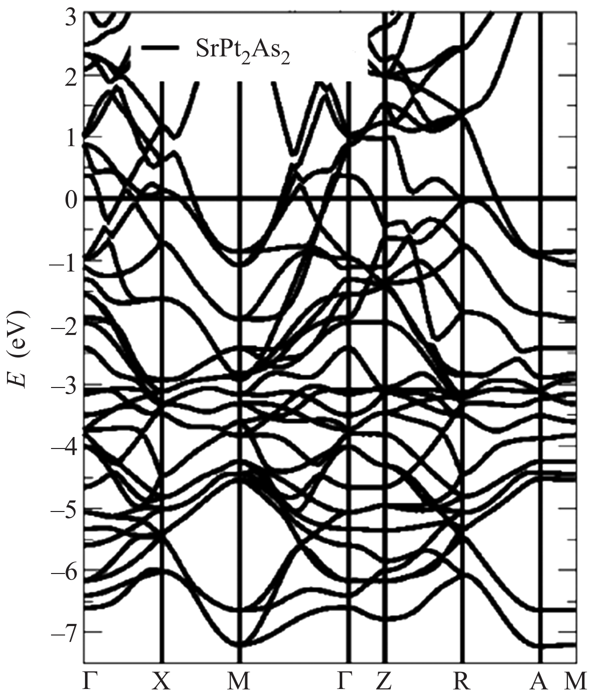

Рис. 6. Полученные в LDA электронные дисперсии для $SrPt_2As_2$. Уровень Ферми – нуль энергии

Электронная структура. На рис. 6 показаны вычисленные в LDA-расчетах электронные зоны, построенные вдоль высокосимметричных направлений в первой зоне Бриллюэна для $SrPt_2As_2$. Отметим, что зоны $SrPt_2As_2$ имеют некоторое отдаленное сходство, например, с системой 1111 FeAs [23, 26] в окрестности M-точки. Однако вблизи уровня Ферми они абсолютно иные, нежели в системах 1111 и 122. Поскольку в $SrPt_2As_2$ уровень Ферми пересекает несколько зон, можно говорить о существенно многозонной природе сверхпроводимости в данной системе (четыре зоны пересекают уровень Ферми в направлении Γ–X и шесть – в направлении M–Γ).

Как показано в работе [19], доминирующий вклад на уровне Ферми дают Pt1-5d-состояния. Тем не менее совместный вклад Pt2-5d и As1-4p, As2-4p в плотность состояний на уровне Ферми E_F является достаточно существенным. Это обстоятельство отличает $SrPt_2As_2$ от ВТСП-пниктидов, где As-4p-состояния практически не выходят на уровень Ферми [23–26]. Основная часть спектрального веса Pt-5d-состояний лежит намного ниже уровня Ферми, что связано с бóльшим числом валентных электронов на Pt, чем в Fe. Также с очевидностью Pt-5d-состояния являются более протяженными и имеют бóльшую ширину зоны по сравнению с Fe-3d.

На рис. 7 показан сложный вид поверхности Ферми, полученной в LDA-приближении для рассматриваемой системы. Большинство листов данной ферми-поверхности существенно трехмерны, что разительно отличает $SrPt_2As_2$ от пниктидов 1111 и 122.

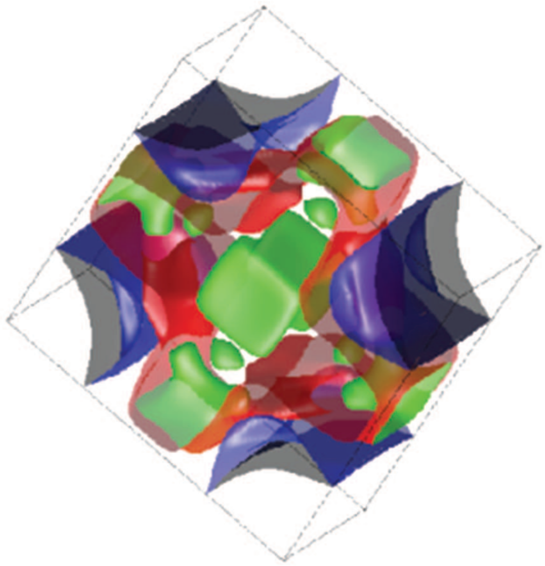

Рис. 7. Рассчитанная в LDA-приближении ферми-поверхность для $SrPt_2As_2$

Как следует из вышесказанного, $SrPt_2As_2$ имеет сложную зонную структуру вблизи уровня Ферми и сложную многолистную топологию поверхности Ферми, сильно отличную от наблюдающейся в пниктидах железа. В общем случае многозонная система может иметь также очень сложный тип куперовского спаривания со сверхпроводящими щелями различной величины на разных листах ферми-поверхности, как, например, в FeAs [29, 30]. Из общего симметрийного анализа [48, 49] известно, что для тетрагональной симметрии и синглетных куперовских пар возможно изотропное или анизотропное s-спаривание или несколько типов d-спаривания. Однако только из соображений симметрии ничего нельзя сказать относительно спаривания $s^{\pm}$-типа с изотропными щелями разного знака на различных листах поверхности Ферми, которое считается наиболее вероятным для ферропниктидов [2, 30].

Проведем простейшие оценки величины T_c в рамках теории БКШ. Величина плотности состояний на уровне Ферми $N(E_{\mathrm{F}})$, полученная в наших расчетах, составляет 5.6 сост./эВ/эл.яч. Тогда коэффициент при линейном по температуре вкладе в теплоемкость по результатам LDA-расчетов получается равным $\gamma_b = \frac{\pi^2}{3}N(E_{\mathrm{F}}) = 13.1$ мДж/моль/K^2. Это неплохо согласуется с экспериментальными оценками: 9.7 мДж/моль/K^2 [8]. Оценим спаривательную константу взаимодействия λ из выражения БКШ, $T_c = 1.14\omega_{\mathrm{D}}e^{-1/\lambda}$, используя экспериментальную величину дебаевской частоты ω_{D}. Для $\omega_{\mathrm{D}} = 200$ K и $T_c = 5.2$ K [8] получим для $SrPt_2As_2$ $\lambda = 0.26$. Теперь проведем оценку для изовалентных сверхпроводящих систем $BaNi_2As_2$ [6] и $SrNi_2As_2$ [7] с T_c, равной 0.7 [6] и 0.62 K [7]. Для этого нам потребуются значения полных LDA-плотностей состояний для систем BaNi и SrNi. Проведенные расчеты дали $N(E_{\mathrm{F}}) =$ = 3.86 сост./эВ/эл.яч. для BaNi и 2.81 сост./эВ/эл.яч. для SrNi, что хорошо согласуется с результатами [50, 51]. Изменив величину λ пропорционально изменению величины $N(E_{\mathrm{F}})$, получим для этих систем $T_c = 0.97$ и 0.13 K соответственно, что хорошо согласуется с экспериментом [6, 7].

3.2. Система APt_3P. Еще одна новая система на основе платины – APt_3P (A = Sr, Ca, La) – была открыта и описана в работе [10]. Там были получены значения T_c = 8.4, 6.6 и 1.5 K соответственно. Здесь мы рассмотрим электронную структуру системы $SrPt_3P$, впервые найденную в работе [21].

Кристаллическая структура. Кристаллы $SrPt_3P$ имеют тетрагональную группу симметрии $P4/nmm$ с $a = 5.8094$ Å и $c = 5.3833$ Å [10] (см. рис. 8). Между слоями ионов стронция расположен “антиперовскитный” октаэдр Pt_6P, причем плоскостные ионы Pt1 занимают позиции 4e (1/4, 1/4, 1/2), а апексные ионы Pt2 – позиции 2c (0, 1/2, 0.1409). Фосфор внутри октаэдра также занимает позиции 2c с $z = 0.7226$. Отметим, что октаэдры Pt_6P не являются идеальными. Расстояние от PPt_2-слоя до разных апексных ионов Pt2 оказывается различным, в то время как плоскостные ионы Pt1 формируют правильный квадрат. Из рис. 8 хорошо видно, что октаэдры Pt_6P, имеющие общую грань, образуют двумерную плоскость с квадратной решеткой. Далее мы предполагаем, что $LaPt_3P$ обладает кристаллической структурой, идентичной $SrPt_3P$.

Электронная структура. Плотность состояний на уровне Ферми в основном определяется Pt1-5d-состояниями. Напомним, что ионы Pt1 образуют дву-

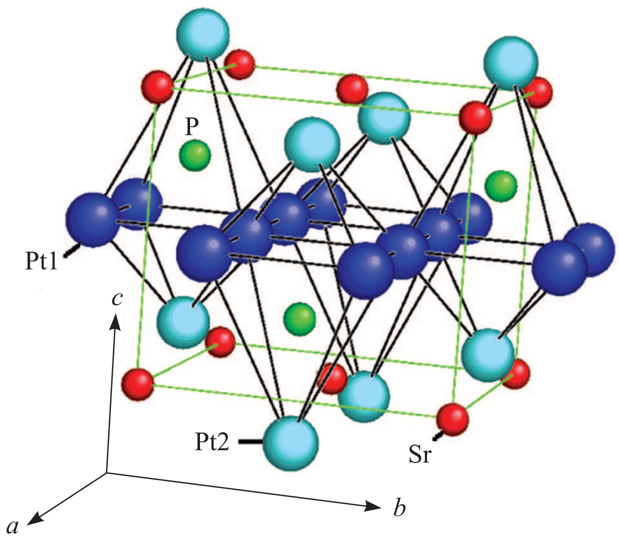

Рис. 8. Кристаллическая структура $SrPt_3P$. Октаэдры Pt_6P выделены Pt–Pt-связями

мерную квадратную решетку (см. рис. 8). Кроме того, на уровне Ферми есть небольшая примесь Pt2-5d и P-3p-состояний.

Величина плотности состояний на уровне Ферми $N(E_{\rm F})$ в рассматриваемых соединениях Sr и La составляет 4.69 и 3.77 сост./эВ/эл.яч. соответственно. Данные величины сравнимы с аналогичными значениями для ВТСП-пниктидов с относительно высокими T_c (см. работу [40]). Тогда для коэффициента γ_b при линейном члене в теплоемкости получаем 11 и 8.9 мДж/моль/К^2 для $SrPt_3P$ и $LaPt_3P$ соответственно. Это достаточно хорошо согласуется с экспериментальными оценками для $SrPt_3P$, которые дали $\gamma^{\rm exp} = 12.7$ мДж/моль/К^2 [10]. Строго говоря, $\gamma^{\rm exp}$ должно быть несколько больше, чем в модели свободных электронов, из-за перенормировки плотности состояний электрон-фононным взаимодействием: $\gamma = (1+\lambda)\gamma_b$, где λ – безразмерная константа связи. Сравнивая экспериментальные данные и расчетные результаты, можно получить оценку $\lambda = 0.15$. Она соответствует случаю слабой связи и недостаточна для получения экспериментального значения T_c. Отметим, что по экспериментальным оценкам, сделанным в работе [10], так называемое отношение Вилсона $R_{\rm W} \sim 1$, что подчеркивает отсутствие в $SrPt_3P$ сильных корреляционных взаимодействий.

На рис. 9 изображены зонные дисперсии $SrPt_3P$ (черные линии) и $LaPt_3P$ (серые линии) в окрестности уровня Ферми, полученные в LDA-расчетах. Данные дисперсии сильно отличаются от дисперсий $SrPt_2As_2$ (см. рис. 6) [19], а также ВТСП-пниктидов и халькогенидов (см. рис. 1) [5]. Обе системы APt_3P являются существенно трехмерными, что следует из наличия дисперсии вдоль направления Γ–Z. С точки зрения химического состава (без учета эффектов релаксации решетки) система $LaPt_3P$ выглядит как электронно-легированная система $SrPt_3P$.

На рис. 10 представлены ферми-поверхности, полученные нами из LDA-расчетов для $SrPt_3P$ (слева) и $LaPt_3P$ (справа). В целом форма поверхности Ферми систем APt_3P сильно отличается от пниктидов и халькогенидов железа [24, 27]. В частности, данные ферми-поверхности имеют явный трехмерный характер и не содержат хорошо выраженных цилиндров.

Из всего вышесказанного об электронной структуре можно заключить, что семейство APt_3P представляет собой новый класс систем с многозонной сверхпроводимостью, как это и предполагалось на основе измерений коэффициента Холла в работе [10]. Система $SrPt_3P$ – существенно двухзонный сверхпроводник, в то время как $LaPt_3$ имеет достаточно сложную зонную структуру в окрестности поверхности Ферми. Поверхности Ферми обеих систем характеризуются большим числом листов с большим числом "карманов" в первой зоне Бриллюэна. При этом их топология легко и заметно изменяется при легировании.

В данном случае из общего симметрийного анализа [48, 49] снова ясно, что для синглетных пар в принципе возможны обычное изотропное или анизотропное s-спаривание или же несколько типов d-спаривания. Наиболее вероятным, конечно, является s-спаривание, как это и предполагалось в работе [10]. Кроме того, дополнительные усложнения возникают в связи с многозонной природой соединений APt_3P. Трехмерная структура многолистовой поверхности Ферми может привести к сложной структуре сверхпроводящей щели и различным величинам сверхпроводящих щелей на различных листах поверхности Ферми (см. обсуждение в работах [29, 30]). Тем не менее простое выражение БКШ, $T_c = 1.14\omega_D e^{-1/\lambda}$, позволяет сделать оценки безразмерной константы взаимодействия λ исходя из экспериментальных значений T_c и дебаевской частоты $\omega_{\rm D} = 190$ К [10]. Оценка дает $\lambda = 0.31$ для $T_c = 8.4$ К. Уменьшая величину λ пропорционально величине плотности состояний на уровне Ферми от 4.69 сост./эВ/эл.яч. в $SrPt_3P$ до 3.77 сост./эВ/эл.яч. в $LaPt_3P$, получим для $LaPt_3P$ $T_c = 4$ К, что хорошо согласуется с экспериментальным значением 1.5 К.

Простейшее выражение теории БКШ дает для T_c лишь достаточно грубую оценку. Поэтому лучше использовать для нее формулу Мак-Миллана [52]. Довольно близкую оценку дает также выражение

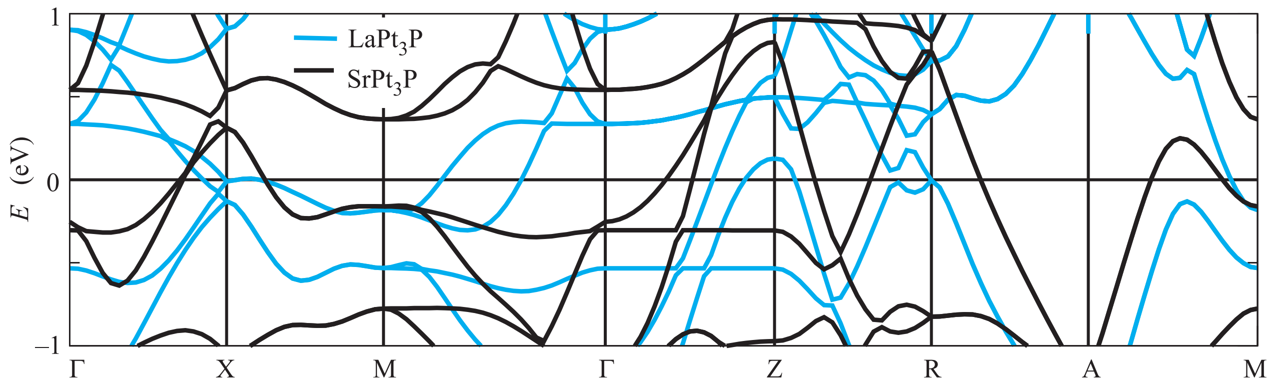

Рис. 9. Рассчитанные в LDA-приближении электронные дисперсии вблизи уровня Ферми для $SrPt_3P$ (черные линии) и $LaPt_3P$ (серые линии). Уровень Ферми – нуль энергии

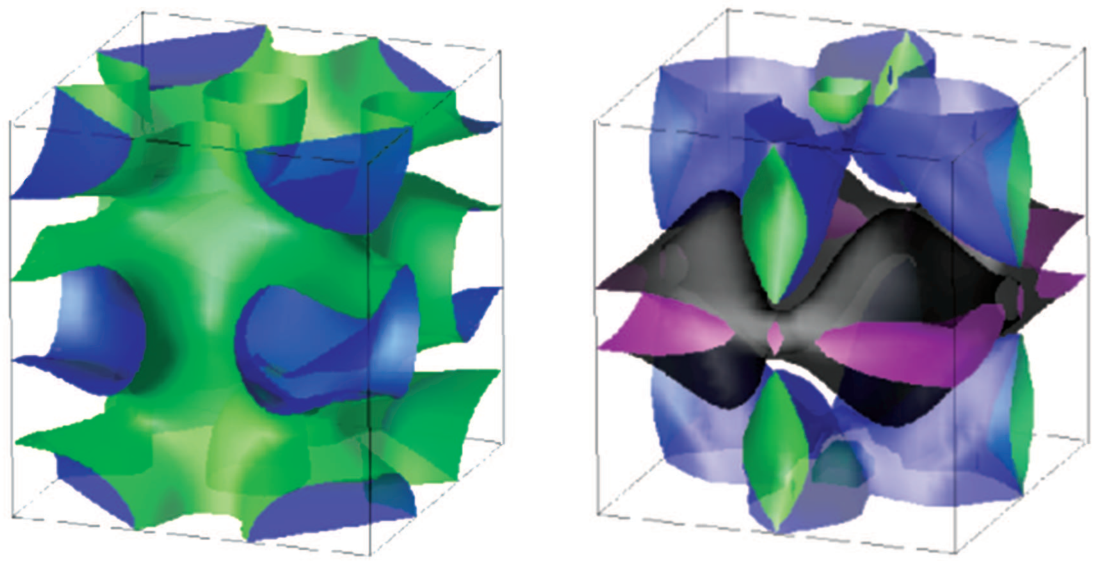

Рис. 10. Полученные из LDA-расчетов ферми-поверхности для $SrPt_3P$ (слева) и $LaPt_3$ (справа)

Аллена–Дайнса [53], являющееся лучшей интерполяционной формулой для T_c в сверхпроводниках с сильной связью. Выберем сначала "оптимистичное" значение кулоновского псевдопотенциала $\mu^* = 0$. Тогда выражение Мак-Миллана дает $\lambda = 0.61$ для $SrPt_3P$ и величину $T_c = 5.6$ К для $LaPt_3P$. Предполагая более типичное значение $\mu^* = 0.1$, получим $\lambda = 0.85$ для $SrPt_3P$ и $T_c = 5.4$ К для $LaPt_3P$.

Подводя итоги, можно заключить, что значение T_c в $SrPt_3P$ и $LaPt_3P$ достаточно хорошо коррелирует с величиной полной плотности состояний на уровне Ферми аналогично ВТСП-пниктидам и халькогенидам [5, 40]. В то же время полученные оценки T_c соответствуют сверхпроводимости со слабым или промежуточным спариванием в APt_3P. Это не объясняет (см. работу [53]) необычно большого отношения $2\Delta/T_c$, полученного из измерения теплоемкости в работе [10], и говорит о необходимости дополнительного экспериментального уточнения указанного отношения в данных системах.

3.3. Система $BaFe_2Se_3$. В работе [11] система $BaFe_2Se_3$ (Ba123) была синтезирована как возможный сверхпроводник, аналогичный $(K,Cs)Fe_2Se_2$ (по предварительным данным ее $T_c \sim 11$ К). Однако в более поздней работе [12] сверхпроводимость в этой системе не наблюдалась вплоть до 1.8 К. В обеих указанных работах при помощи нейтронной дифракции были открыты антиферромагнитные "спиновые лестницы" с температурой Нееля порядка 250 К, однако вид магнитной структуры был установлен неоднозначно. Здесь нами описаны электронная и магнит-

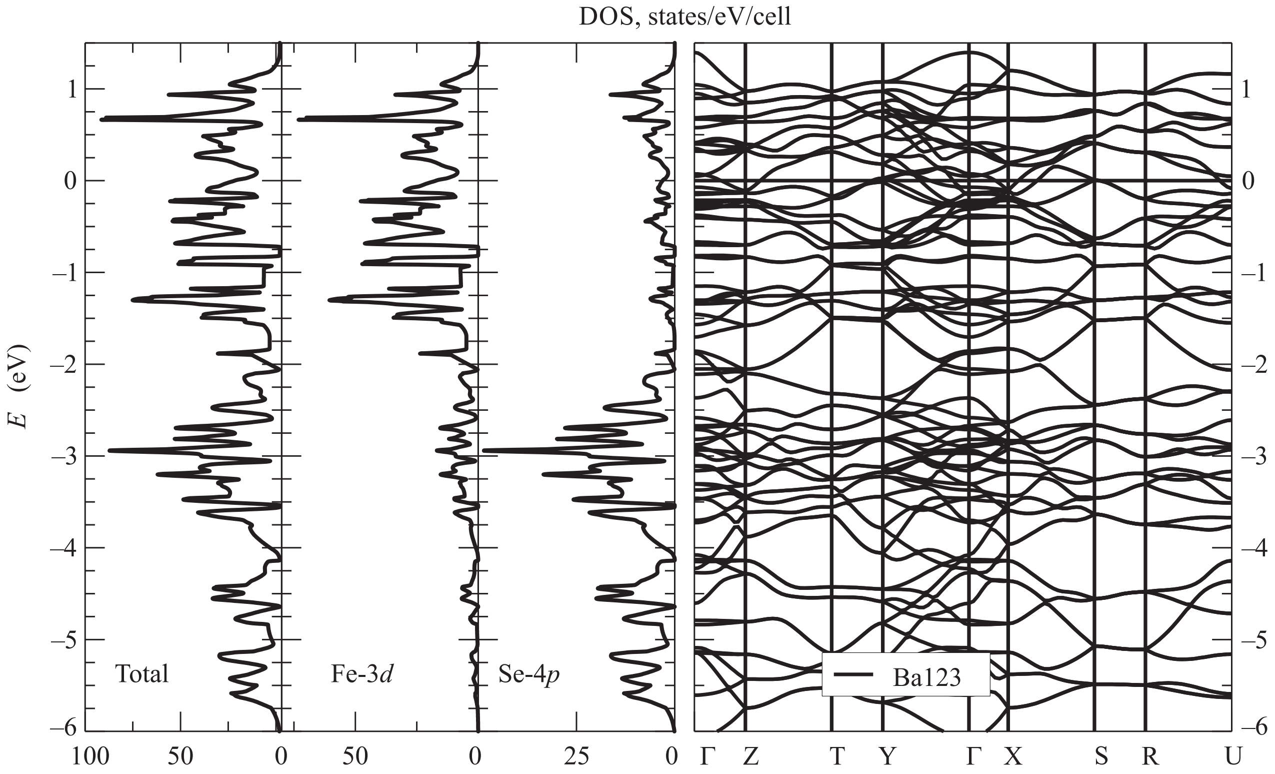

Рис. 11. Зонные дисперсии (справа) и плотности состояний (слева) для соединения Ba123, полученные в LDA-расчете. Уровень Ферми – нуль энергий

ная структуры Ba123, полученные при помощи LDA- и LSDA-расчетов в работе [20].

Кристаллическая структура. Начнем, как всегда, с обсуждения кристаллической структуры Ba123. Система Ba123 имеет орторомбическую группу симметрии *Pnma* [11]. Основной структурный элемент в данном соединении – так называемые "двуножные" лестницы, направленные вдоль оси *b*. Эти лестницы сформированы ионами железа, которые окружены тетраэдрами из ионов Se. Перпендикулярно оси *b* лестницы расположены в шахматном порядке (см. работу [20]). Очевидно, что такая кристаллическая структура сильно отличается от кристаллической структуры ВТСП-систем на основе железа (см. п. 2 и работы [5, 24, 27]), которые имеют примитивную или объемноцентрированную тетрагональную группу симметрии.

Электронная структура. На рис. 11 представлены зонные дисперсии (справа) и плотности состояний (слева) для системы Ba123. Аналогично системам Ba122 [24] и AFe_2Se_2 [27] электронные состояния на уровне Ферми сформированы в основном Fe-3*d*-орбиталями. Орбиталям Se-4*p* принадлежат зоны, расположенные ниже -2 эВ. Гибридизация Fe-3*d* и Se-4*p* состояний достаточно умеренная.

Рис. 12. Поверхность Ферми Ba123, полученная из LDA-расчетов

Электронные зоны системы Ba123 в непосредственной близости от уровня Ферми сильно отличаются от таковых в ферропниктидах и феррохалькогенидах [24, 27]. Вокруг Γ-точки имеются два электронных кармана, а по краям зоны Бриллюэна (Y-точка) расположены три дырочных кармана (см. рис. 12). Вблизи уровня Ферми находится несколь-

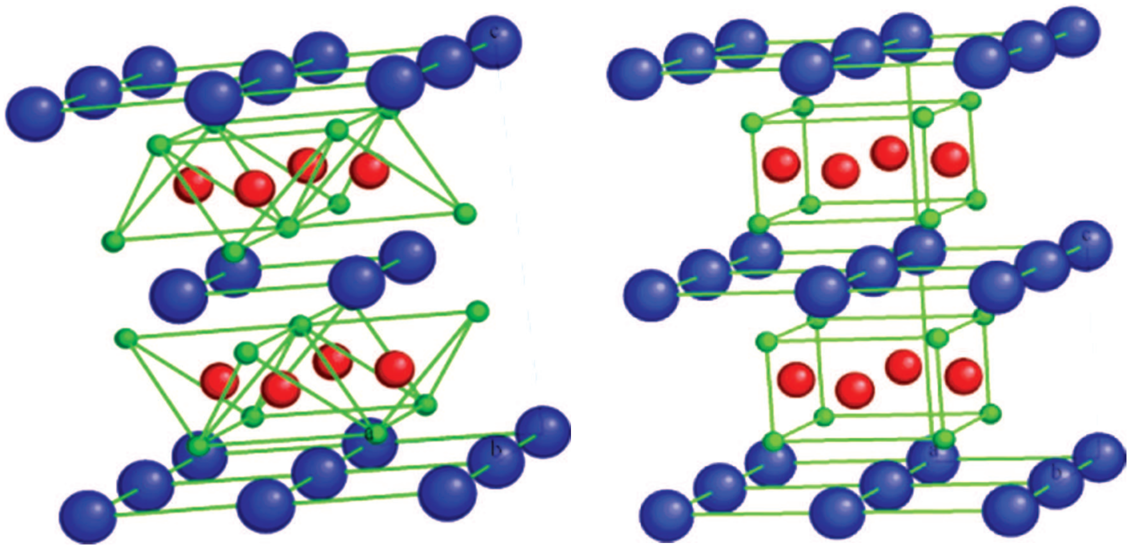

Рис. 13. (Цветной онлайн) Кристаллическая структура (Sr,Ca)Pd_2As_2 (слева) и $BaPd_2As_2$ (справа). Синие сферы – ионы Sr и Ba, зеленые – As, красные – Pd

ко сингулярностей Ван-Хова, что делает эту систему похожей на AFe_2Se_2 (см. п. 2) [27] и дает возможность достаточно просто изменять топологию поверхности с легированием.

Полученная для Ba123 в LDA-расчете поверхность Ферми представлена на рис. 12. Общий вид поверхности Ферми совершенно не похож на таковые в ферропниктидах и феррохалькогенидах [24, 27]. В Ba123 она существенно трехмерна и не имеет явно выраженных цилиндров.

Магнитная структура. Эксперименты по нейтронному рассеянию [11, 12] позволили определить для Ba123 температуру Нееля ($T \ll T_{\mathrm{N}}^{\mathrm{exp}} \sim 250\,\mathrm{K}$), а также две возможные спиновые конфигурации, соответствующие неприводимым представлениям τ_1 и τ_2 пространственной группы симметрии $Pnma$, которые дают практически одинаковые дифракционные картины. В работе [20] вопрос о типе магнитной структуры был решен прямым вычислением температуры Нееля для различных спиновых конфигураций в приближении среднего поля для модели Гайзенберга. Параметры модели Гайзенберга были вычислены в LSDA-расчетах [54]. Наши расчеты показали, что конфигурация спиновой лестницы τ_1 (“плакеты”) имеет температуру Нееля $T_{\mathrm{N}}(\tau_1) = 217\,\mathrm{K}$, а для τ_2 (“зигзаги”) $T_{\mathrm{N}}(\tau_2) = 186\,\mathrm{K}$. Это делает конфигурацию τ_2 более энергетически выгодной в согласии с экспериментальной работой [12] и LSDA-расчетами полной энергии [55].

Итак, несмотря на сходную с ВТСП-системами на основе железа химическую формулу, система Ba123 имеет существенно отличные от них кристаллическую и электронную структуры. С магнитной же точки зрения она является “спиновой лестницей”. Вопрос о сверхпроводимости в этой системе остается открытым.

3.4. Система APd_2As_2. Здесь мы рассмотрим электронную структуру [22] систем (Sr,Ca)Pd_2As_2 и $BaPd_2As_2$, в которых была обнаружена сверхпроводимость с $T_c = 0.92$ и 1.27 K соответственно [13]. Кроме того, будет проведено сравнение этих систем с изовалентной системой (Sr,Ba)Ni_2As_2 [56–58].

Кристаллическая структура. Кристаллическая структура $SrPd_2As_2$ и $CaPd_2As_2$ имеет тетрагональную группу симметрии $I/4mmm$ аналогично системе $BaFe_2As_2$ [47]. Вид данной структуры представлен на рис. 13 слева. Видно, что она аналогична системе Ba122 [24].

Несмотря на то что система $BaPd_2As_2$ по химической формуле схожа с пниктидом Ba122, она имеет совершенно другую кристаллическую структуру [13]. Пространственная группа симметрии системы $BaPd_2As_2$ – $P/4mmm$ (рис. 13 справа). Так же как и пниктиды и хальгогениды, $BaPd_2As_2$ обладают слоистой кристаллической структурой, но атомы Pd не имеют тетраэдрического окружения из атомов мышьяка.

Электронная структура. Полученные в LDA-расчете электронные дисперсии вдоль высокосимметричных направлений для $SrPd_2As_2$ и $BaPd_2As_2$ в сочетании с плотностями состояний представлены на рис. 14 вверху и внизу соответственно. Видно, что в

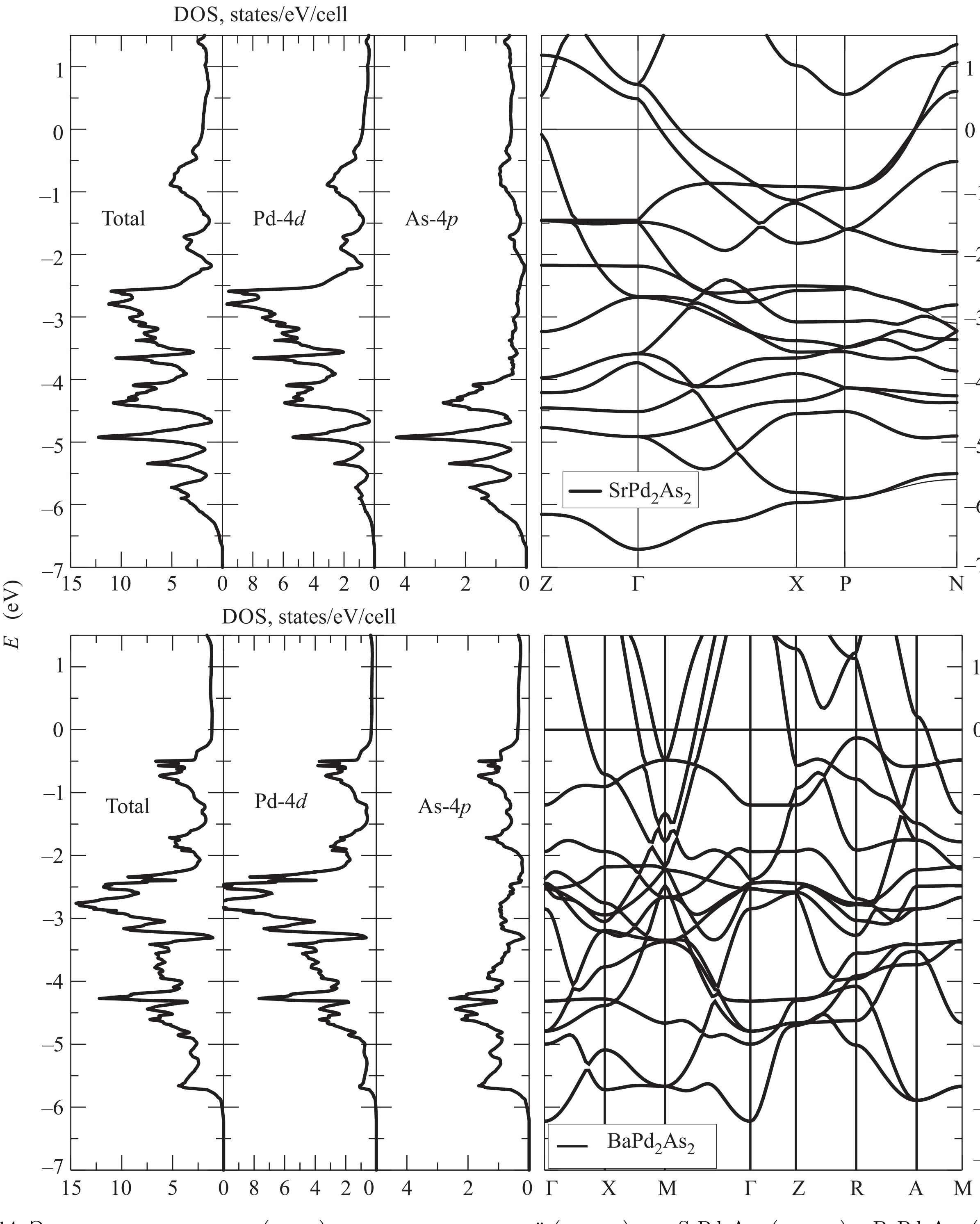

Рис. 14. Электронные дисперсии (слева) и плотности состояний (справа) для $SrPd_2As_2$ (вверху) и $BaPd_2As_2$ (внизу), вычисленные в LDA-расчетах. Уровень Ферми – нуль энергии

системе $SrPd_2As_2$ основной спектральный вес сформирован Pd-4d- и As-4p-состояниями. Состояния Pd-4d расположены между -4 и -0.5 эВ (см. верхнюю часть рис. 14), а As-4p-состояния – между -6 и -4 эВ. В сравнении с Ba122 Pd-4d-состояния с очевидностью являются более протяженными по энергии, чем Fe-3d. В $SrPd_2As_2$ также имеется существенная гибридизация между Pd-4d- и As-4p-состояниями. Ве-

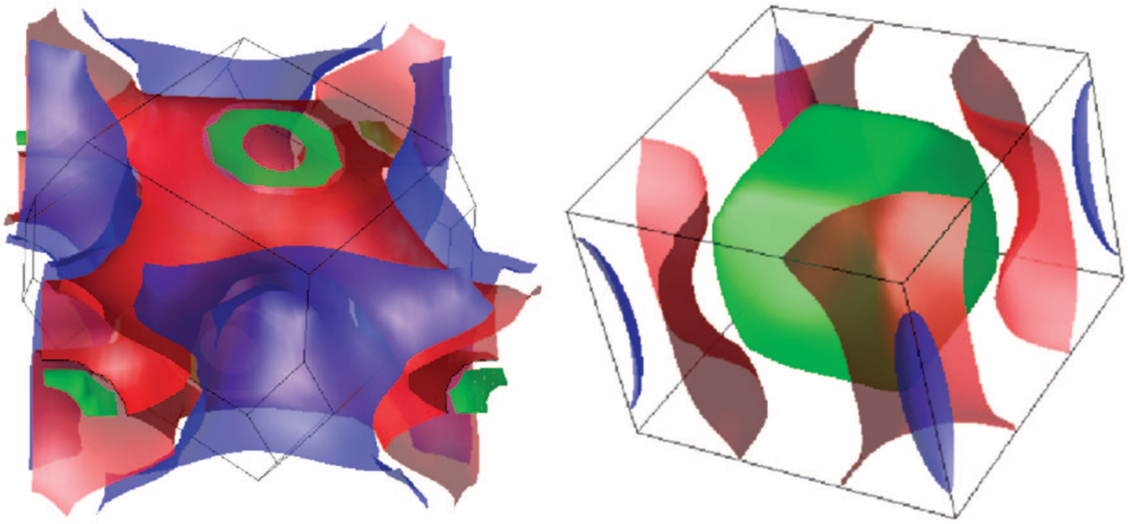

Рис. 15. LDA-поверхности Ферми для (Sr,Ca)Pd_2As_2 (слева) и $BaPd_2As_2$ (справа)

личина плотности состояний для $SrNi_2As_2$ на уровне $N(E_F) = 1.93$ сост./эВ/эл.яч. в два раза ниже, чем в системе Ba122, т.к. большее, чем в Fe, число электронов в Pd приводит к смещению уровня Ферми в область меньших значений плотности состояний.

Снизу на рис. 14 представлены электронные дисперсии и плотности состояний, полученные в LDA-расчете для $BaPd_2As_2$. Поскольку кристаллическая структура $BaPd_2As_2$ полностью отлична от структуры $SrNi_2As_2$, неудивительно, что полученные зоны также имеют другую форму. Отметим, что как в системе со Sr, так и в системе с Ba уровень Ферми пересекает множество зон без каких-либо явно выраженных вкладов от разных валентных оболочек. Из LDA-расчета была найдена величина полной плотности состояний на уровне Ферми для $BaPd_2As_2$ (2.29 сост./эВ/эл.яч).

На рис. 15 показаны поверхности Ферми для $SrPd_2As_2$ (слева) и $BaPd_2As_2$ (справа), полученные в рамках наших зонных расчетов. В отличие от системы Ba122 [24] поверхность Ферми для системы со Sr является существенно трехмерной и сложной и состоит из трех листов. Ферми-поверхность $BaPd_2As_2$ по сравнению с $SrPd_2As_2$ имеет достаточно простой вид, но также является существенно трехмерной с дырочным листом вокруг Г-точки и электронными листами по углам зоны Бриллюэна.

4. Заключение. В предлагаемом небольшом обзоре мы рассмотрели электронные структуры целого ряда новых сверхпроводников, открытых в ходе экспериментальных поисков новых систем-кандидатов для высокотемпературной сверхпроводимости, последовавших за наблюдением ВТСП в арсенидах железа [1–4]. Все эти ситемы оказались многозонными сверхпроводниками с достаточно сложной топологией поверхностей Ферми. Из общих теоретических соображений [30] ясно, что многозонность электронного спектра вблизи уровня Ферми должна способствовать повышению температуры сверхпроводящего перехода T_c. Однако экспериментальная картина оказывается достаточно противоречивой. В системе $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ сверхпроводимость действительно наблюдается при достаточно высоких температурах, несмотря на отсутствие свойства "нестинга" электронных и дырочных поверхностей Ферми, а также отсутствие хорошо определенных квазичастиц вблизи уровня Ферми (что связано с достаточно заметной ролью корреляций в этой системе). В то же время большинство других систем, рассмотренных выше, демонстрирует сверхпроводимость лишь при относительно низких температурах, несмотря на ярко выраженную многозонность электронного спектра.

В связи с этой противоречивой картиной возникает общий вопрос о существовании (или несуществовании) электронной структуры, "оптимальной" с точки зрения наблюдения ВТСП. В настоящее время мы не можем дать на него содержательного ответа, хотя из наших расчетов видно, что электронные спектры большинства рассмотренных новых систем с низкой T_c разительно отличаются от спектров ВТСП на основе пниктидов и халькогенидов железа. Попытки найти общий ответ на поставленный вопрос представляются интересным направлением для дальнейших исследований.

Данная работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ # 14-02-00065, а также в рамках программы фундаментальных исследований президиума УрО РАН "Квантовая макрофизика и нелинейная динамика" (проекты # 12-П-2-1002, 12-Т-2-1001).

1. Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).
2. M. V. Sadovskii, Uspekhi Fiz. Nauk **178**, 1243 (2008) [Phys. Usp. **51**, 1201 (2008)].
3. K. Ishida, Y. Nakai, and H. Hosono, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 062001 (2009).
4. P. J. Hirshfeld, M. M. Korshunov, and I. I. Mazin, Rep. Prog. Phys. **74**, 124508 (2011).
5. M. V. Sadovskii, E. Z. Kuchinskii, and I. A. Nekrasov, JMMM **324**, 3481 (2012).
6. E. D. Bauer, F. Ronning, B. L. Scott, and J. D. Thompson, Phys. Rev. B **78**, 172504 (2008).
7. F. Ronning, N. Kurita, E. D. Bauer, B. L. Scott, T. Park, T. Klimczuk, R. Movshovich, and J. D. Thompson, J. Phys. Cond. Matter **20**, 342203 (2008).
8. K. Kudo, Y. Nishikubo, and M. Nohara, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 123710 (2010).
9. S. Elgazzar, A. M. Strydom, and S.-L. Drechsler, J. Supercond. Nov. Magn. **25**, 1795 (2012).
10. T. Takayama, K. Kuwano, D. Hirai, Y. Katsura, A. Yamamoto, and H. Takagi, Phys. Rev. Lett. **108**, 237001 (2012).
11. A. Krzton-Maziopa, E. Pomjakushina, V. Pomjakushin, V. Pomjakushin, D. Sheptyakov, D. Chernyshov, and V. Svitlyk, J. Phys.: Cond. Matter **23**, 402201 (2011).
12. J. M. Caron, J. R. Neilson, D. C. Miller, A. Llobet, and T. M. McQueen, Phys. Rev. B **84**, R180409 (2011).
13. V. K. Anand, H. Kim, M. A. Tanatar, R. Prozorov, and D. C. Johnston, Phys. Rev. B **87**, 224510 (2013).
14. K. Held, I. A. Nekrasov, N. Blümer, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 2611 (2001); G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).
15. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **95**, 659 (2012) [JETP Lett. **95**, 581 (2012)].
16. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **143**, 713 (2013) [JETP **116**, 620 (2013)].
17. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **97**, 18 (2013) [JETP Lett. **97**, 15 (2013)].
18. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **144**, 1061 (2013) [JETP **117**, 926 (2013)].
19. I. A. Nekrasov and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **92**, 833 (2010) [JETP Lett. **92**, 751 (2010)].
20. M. V. Medvedev, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **95**, 37 (2012) [JETP Lett. **95**, 33 (2012)].
21. I. A. Nekrasov and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **96**, 243 (2012) [JETP Lett. **96**, 227 (2012)].
22. I. A. Nekrasov and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **98**, 28 (2013) [JETP Lett. **98**, 24 (2013)].
23. I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **87**, 647 (2008) [JETP Lett. **87**, 560 (2008)].
24. I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **88**, 155 (2008) [JETP Lett. **88**, 144 (2008)].
25. I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **88**, 621 (2008) [JETP Lett. **88**, 543 (2008)].
26. I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **88**, 777 (2008) [JETP Lett. **88**, 679 (2008)].
27. I. A. Nekrasov and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **93**, 182 (2011) [JETP Lett. **93**, 166 (2011)].
28. O. K. Andersen, Phys. Rev. B **12**, 3060 (1975); O. Gunnarsson, O. Jepsen, and O. K. Andersen, Phys. Rev. B **27**, 7144 (1983); O. K. Andersen and O. Jepsen, Phys. Rev. Lett. **53**, 2571 (1984).
29. V. Barzykin and L. P. Gorkov, Pis'ma v ZhETF **88**, 142 (2008) [JETP Lett. **88**, 131 (2008)].
30. E. Z. Kuchinskii and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **89**, 176 (2009) [JETP Lett. **89**, 543 (2009)].
31. J. Guo, S. Jin, G. Wang, S. Wang, K. Zhu, T. Zhou, M. He, and X. Chen, Phys. Rev. B **82**, 180520(R) (2010).
32. M. Fang, H. Wang, C. Dong, Z. Li, C. Feng, J. Chen, and H. Q. Yuan, Phys. Rev. B **84**, 224506 (2011).
33. W. Bao, Q. Huang, G. F. Chen, M. A. Green, D. M. Wang, J. B. He, X. Q. Wang, and Y. Qiu, Chin. Phys. Lett. **28**, 086104 (2011).
34. A. A. Kordyuk, Fiz. Nizk. Temp. **38**, 1119 (2012).
35. H.-H. Wen, Rep. Prog. Phys. **75**, 112501 (2012).
36. W. Li, H. Ding, Z. Li, P. Deng, K. Chang, K. He, S. Ji, L. Wang, X. Ma, J.-P. Hu, X. Chen, and Q.-K. Xue, Phys. Rev. Lett. **109**, 057003 (2012).
37. M. Yi, D. H. Lu, R. Yu, S. C. Riggs, J.-H. Chu, B. Lv, Z. K. Liu, M. Lu, Y.-T. Cui, M. Hashimoto, S.-K. Mo, Z. Hussain, C. W. Chu, I. R. Fisher, Q. Si, and Z.-X. Shen, Phys. Rev. Lett. **110**, 067003 (2013).
38. I. R. Shein and A. L. Ivanovskii, Phys. Lett. A **375**, 1028 (2011).
39. Y. Mizuguhci, Y. Hara, K. Deguchi, S. Tsuda, T. Yamaguchi, K. Takeda, H. Kotegawa, H. Tou, and Y. Takano, Supercond. Sci. Technol. **23**, 054013 (2010).
40. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **91**, 567 (2010) [JETP Lett. **91**, 518 (2010)].

41. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, Н. С. Павлов, ЖЭТФ **144**, 379 (2013) [JETP **117**, 327 (2013)].
42. K. Haule, J. H. Shim, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **100**, 226402 (2008).
43. L. Craco, M. S. Laad, S. Leoni, and H. Rosner, Phys. Rev. B **78**, 134511 (2008).
44. A. O. Shorikov, M. A. Korotin, S. V. Streltsov, D. M. Korotin, and V. I. Anisimov, ЖЭТФ **135**, 134 (2009) [JETP **108**, 121 (2008)]; arXiv: 0804.3283.
45. S. L. Skornyakov, A. V. Efremov, N. A. Skorikov, M. A. Korotin, Yu. A. Izyumov, V. I. Anisimov, A. V. Kozhevnikov, and D. Vollhardt, Phys. Rev. B **80**, 092501 (2009).
46. A. Imre, A. Hellmann, G. Wenski, J. Graf, D. Johrendt, and A. Mewisa, Z. Anorg. Allg. Chem. **633**, 2037 (2007).
47. M. Rotter, M. Tegel, and D. Johrendt, Phys. Rev. Lett. **101**, 107006 (2008).
48. G. E. Volovik and L. P. Gor'kov, ZETF **88**, 1412 (1985) [Sov. Phys. JETP **61**, 843 (1985)]; Physica C **470**, S418 (2010).
49. M. Siegrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
50. A. Subedi and D. J. Singh, Phys. Rev. B **78**, 132511 (2008).
51. Z. G. Chen, G. Xu, W. Z. Hu, X. D. Zhang, P. Zheng, G. F. Chen, J. L. Luo, Z. Fang, and N. L. Wang, Phys. Rev. B **80**, 094506 (2009).
52. W. L. McMillan, Phys. Rev. **167**, 331 (1968).
53. P. B. Allen and R. C. Dynes, Phys. Rev. B **12**, 905 (1975).
54. A. I. Liechtenstein, M. I. Katsnelson, V. P. Antropov, and V. A. Gubanov, J. Magn. Magn. Mater. **67**, 65 (1987); V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. I. Lichtenstein, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 767 (1997).
55. B. Saparov, S. Calder, B. Sipos, H. Cao, S. Chi, D. J. Singh, A. D. Christianson, M. D. Lumsden, and A. S. Sefat, Phys. Rev. B **84**, 245132 (2011).
56. N. Kurita, F. Ronning, Y. Tokiwa, E. D. Bauer, A. Subedi, D. J. Singh, J. D. Thompson, and R. Movshovich, Phys. Rev. Lett. **102**, 147004 (2009).
57. B. Zhou, M. Xu, Y. Zhang, G. Xu, Ch. He, L. X. Yang, F. Chen, B. P. Xie, X.-Y. Cui, M. Arita, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, X. Dai, and D. L. Feng, Phys. Rev. B **83**, 035110 (2011).
58. I. R. Shein and A. L. Ivanovskii, Physica B **405**, 3213 (2010).