Письма в ЖЭТФ, том 100, вып. 1, с. 18 – 25 © 2014 г. 10 июля

Корреляционные свойства сверхпроводников на основе FeAs: квантовый траекторный алгоритм Монте-Карло

В. А. Кашурников, А. В. Красавин[1)]

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 мая 2014 г.

Парные корреляционные функции для двумерных кластеров FeAs, моделирующих сверхпроводники на основе железа, рассчитаны с помощью обобщенного квантового алгоритма Монте-Карло в рамках полной двухорбитальной узельной модели. Представленные данные для кластеров с размерами до 10×10 ячеек FeAs свидетельствуют в пользу возможности эффективного притяжения носителей заряда, отвечающего симметрии A_{1g}, при некоторых параметрах взаимодействия. Проведен анализ парных корреляций в зависимости от размера кластера, температуры, величины взаимодействия и типа симметрии параметра порядка.

DOI: 10.7868/S0370274X14130049

Введение. В настоящее время новые высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) на основе железа [1] (пниктиды и халькогениды) являются объектом интенсивных исследований как теоретическими, так и экспериментальными методами [2, 3]. Причина этого заключается как в сходстве их структурных, магнитных, электрофизических и других свойств со свойствами и особенностями медь-оксидных ВТСП, так и в наличии более сложной зонной структуры, особенностей и многообразия магнитных и сверхпроводящих фаз.

Новые ВТСП обладают слоистой структурой, представляющей собой близко расположенные атомные плоскости, состоящие, например, для пниктидов из атомов Fe и As. Так же как и медь-оксидные ВТСП, они обладают ярко выраженной анизотропией, что дает возможность адекватного описания этих систем двумерными моделями сильной связи. Однако такие модели оказываются существенно более сложными и многозонными, чем, например, модель Эмери для медь-оксидных ВТСП [4]. Наиболее адекватными моделями сильной связи для указанных соединений являются двух- [5, 6], трех- [7–9] и пятиорбитальная модели [9, 10], которые представляют собой типичные обобщенные многозонные модели Хаббарда. Наличие сильных корреляций, многощелевая зонная структура, особенности магнитных и сверхпроводящих свойств [11–14], отсутствие параметров разложения для аналитических приближений диктуют необходимость использования для исследования ВТСП на основе железа точных квантовых методов.

В данной работе нами был использован квантовый траекторный алгоритм Монте-Карло (МК) в непрерывном времени (CTWL-алгоритм) [15], а именно модифицированный для полной двухорбитальной модели обобщенный алгоритм [16], позволяющий реализовать удобную кодировку состояний для процедур МК. Такой подход является эффективным методом исследования сильно коррелированных систем и позволяет рассчитать характеристики систем различных размеров и размерностей с различной статистикой. Точный учет в рамках полной двухорбитальной модели недиагональных слагаемых вида $a^+_{i\sigma}a_{j\sigma'}a^+_{k\sigma''}a_{l\sigma'''}$, которые могут играть ключевую роль для спаривания носителей заряда и которыми, с нашей точки зрения, нельзя пренебрегать, является главной особенностью представленного алгоритма.

Полученные нами ранее результаты для кластера, состоящего из 3×3 ячеек FeAs, в рамках полной двухорбитальной модели [17] свидетельствуют о многощелевой структуре спектра носителей заряда, что находится в качественном согласии с известными данными [11, 18].

В работах [6, 19] методом точной диагонализации гамильтоновой матрицы (МТД) было проведено детальное исследование свойств двухорбитальной модели для кластера размера $\sqrt{8}\times\sqrt{8}$ (так называемого *tilted*, повернутого кластера), содержащего восемь атомов железа. Однако МТД, дающий точные ответы для двухорбитальной модели, ограничен размерами исследуемых кластеров, так как с увеличением размера системы экспоненциально быстро растет размер гамильтоновой матрицы. Наибольший кластер, который удалось рассчитать в рам-

[1)]e-mail: avkrasavin@gmail.com

ках двухорбитальной модели с помощью МТД, имеет размер 2×5 и состоит из 10 атомов железа. Для его расчета потребовалась мощность суперкомпьютера Earth Simulator (Япония) [20]. Анализ данных по парным корреляциям и энергии связи в указанных работах позволил выделить области на фазовой диаграмме, соответствующие симметриям спаривания параметра сверхпроводящего порядка A_{1g}, B_{2g} (согласно классификации [6, 21]).

Что касается известных кластерных расчетов ВТСП на основе железа с использованием методов МК, то тут необходимо отметить следующее.

В работе [22] с помощью вариационного метода МК также в рамках двухорбитальной модели были рассчитаны кластеры 8×8 и 10×10. С нашей точки зрения, выбор вариационной волновой функции с учетом в основном только антиферромагнитных корреляций приводит к данным, близким к хартрифоковскому (среднеполевому) приближению. Подобный подход, строго говоря, может не позволить сделать корректные выводы о таком важном вопросе, как парные корреляции в системе.

В работах [23, 24] расчеты кластеров FeAs вплоть до размеров 16×16 с использованием детерминантного метода МК были проведены в рамках упрощенной модели (так называемая модель с S_4-симметрией) без указанных выше важных корреляционных слагаемых. По сути, эта модель является двухзонной обобщенной моделью Хаббарда с диагональным взаимодействием между зонами. Тем не менее полученные данные по парным корреляциям свидетельствуют о наличии спаривания для A_{1g}-симметрии.

Стоит отметить также и работы [25, 26] по моделированию методом МК кластеров с размерами до 16×16 в рамках трехорбитальной модели в недопированной ситуации. С одной стороны, эта модель является более полной по сравнению с двухорбитальной, а результаты позволяют достаточно корректно описать наблюдаемые экспериментально фотоэмиссионные спектры и спектры нейтронного рассеяния, а также получить данные по магнитному упорядочению и по проводимости в несверхпроводящем состоянии. С другой стороны, парные корреляции в указанных работах не обсуждались, согласно же анализу [6] двухорбитальная модель является достаточной для анализа парных корреляций в системах FeAs.

Кроме того, имеют место подходы с описанием особенностей пниктидов чисто спиновыми степенями свободы [27], которые нацелены в основном на исследование антиферромагнитных корреляций.

Цель настоящей работы – с помощью квантового алгоритма МК, развитого в [17], провести расчет парных корреляционных функций в рамках полной двухорбитальной модели для больших кластеров FeAs, полагая, что малость корреляционных длин позволит экстраполировать данные по конечным кластерам на макроскопическую систему. Кроме того, расчет корреляционных функций в зависимости от размера системы, параметров взаимодействия и температуры позволит оценить вклад в коллективный отклик аномальных средних, ответственных за спаривание носителей заряда, с учетом симметрии спаривания.

Двухорбитальная модель и метод расчета. Кристаллическая структура сверхпроводников с ячейкой FeAs характеризуется тем, что каждый из атомов Fe оказывается окруженным тетраэдром из атомов As, и наоборот. Расчеты зонной структуры показывают, что наибольший вклад в электронную плотность состояний вблизи уровня Ферми дают $3d$-состояния атомов железа [28]. В результате можно выделить основной эффективный структурный элемент, состоящий из двумерной плоскости FeAs с простой квадратной решеткой, отвечающий за проводящие и сверхпроводящие свойства системы. Соответственно выстраивается и модель сильной связи системы [5, 6].

Узельная двухорбитальная модель является достаточно сложной для реализации алгоритмов по исследованию новых сверхпроводников как на основе квантовых методов МК, так и на основе МТД. Гамильтониан двухорбитальной модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = H_{\text{int}} + H_{\text{kin}}, \tag{1}$$

$$\begin{gathered}
H_{\text{int}} = U \sum_{i,\alpha} n_{i,\alpha,\uparrow} n_{i,\alpha,\downarrow} + V \sum_i n_{i,x} n_{i,y} - \\
- \mu \sum_i n_i - J \sum_i (n_{i,x,\uparrow} n_{i,y,\uparrow} + n_{i,x,\downarrow} n_{i,y,\downarrow}) - \\
- J \sum_i (a^+_{i,x,\downarrow} a_{i,x,\uparrow} a^+_{i,y,\uparrow} a_{i,y,\downarrow} + a^+_{i,x,\uparrow} a_{i,x,\downarrow} a^+_{i,y,\downarrow} a_{i,y,\uparrow} + \\
+ a^+_{i,x,\uparrow} a_{i,y,\downarrow} a^+_{i,x,\downarrow} a_{i,y,\uparrow} + a^+_{i,y,\uparrow} a_{i,x,\downarrow} a^+_{i,y,\downarrow} a_{i,x,\uparrow}, \\
H_{\text{kin}} = -t_1 \sum_{i,\sigma} (a^+_{i,x,\sigma} a_{i+x,x,\sigma} + a^+_{i,j,\sigma} a_{i+y,y,\sigma} + \text{h.c.}) - \\
- t_2 \sum_{i,\sigma} (a^+_{i,y,\sigma} a_{i+x,y,\sigma} + a^+_{i,x,\sigma} a_{i+y,x,\sigma} + \text{h.c.}) - \\
- t_3 \sum_{i,\sigma} (a^+_{i,x,\sigma} a_{i+x+y,x,\sigma} + a^+_{i,x,\sigma} a_{i+x-y,x,\sigma} + \\
+ a^+_{i,y,\sigma} a_{i+x+y,y,\sigma} + a^+_{i,y,\sigma} a_{i+x-y,y,\sigma} + \text{h.c.}) -
\end{gathered}$$

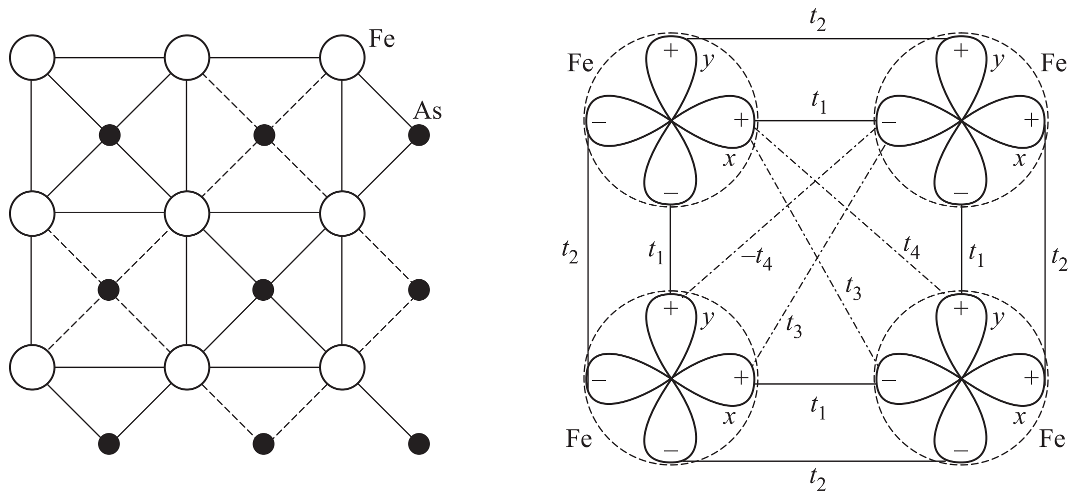

Рис. 1. Кластеры FeAs и перескоки электронов между орбиталями, учитываемые в двухорбитальной модели

$$- t_4 \sum_{i,\sigma}(a^+_{i,x,\sigma}a_{i+x+y,y,\sigma} + a^+_{i,y,\sigma}a_{i+x+y,x,\sigma} + \text{h.c.}) +$$

$$+ t_4 \sum_{i,\sigma}(a^+_{i,x,\sigma}a_{i+x-y,y,\sigma} + a^+_{i,y,\sigma}a_{i+x-y,x,\sigma} + \text{h.c.}),$$

где $a^+_{i,x(y),\sigma}$ $(a_{i,x(y),\sigma})$ – оператор рождения (уничтожения) электрона со спином σ на узле i и орбитали x (y); t_i $(i = 1, \ldots, 4)$ – амплитуды перескоков электронов между орбиталями d_{xz} и d_{yz} (x и y на рис. 1); параметры U и V описывают кулоновское взаимодействие внутри орбиталей и между ними соответственно; J – обменный интеграл; μ – химический потенциал.

Экспериментальные исследования ВТСП на основе железа, а также расчеты зонной структуры в рамках двухорбитальной модели (см., например, работу [6] и ссылки в ней) дают различные возможные наборы параметров гамильтониана, позволяющие качественно описывать наблюдаемые электронные свойства этих соединений. Для расчета были выбраны реалистичные параметры амплитуд перескоков (здесь и далее все энергетические величины измеряются в 0.2 эВ):

$$t_1 = 0.058; \quad t_2 = 0.22; \quad t_3 = 0.0208; \quad t_4 = 0.079. \quad (2)$$

Соотношение между параметрами взаимодействия в большинстве расчетов полагалось равным

$$V = 0.5U; \quad J = 0.25U. \quad (3)$$

Гамильтониан двухорбитальной модели является сложным. Он состоит из разнотипных слагаемых, в том числе четырехфермионных недиагональных типа $a^+_{i,x,\downarrow}a_{i,x,\uparrow}a^+_{i,y,\uparrow}a_{i,y,\downarrow}$, каждое из которых требует отдельного рассмотрения для включения в схему алгоритма. Методы расчета с помощью обобщенного квантового алгоритма МК и способы кодировки состояний подробно изложены в [16, 17].

Для анализа недиагонального дальнего порядка следует рассчитать парные корреляционные функции для различных типов симметрий спаривания носителей заряда:

$$Q_\delta = \sum_{ij} \int_0^\beta d\tau \langle \Delta_\delta(i,\tau)\Delta^+_\delta(j,0)\rangle. \quad (4)$$

Здесь индекс “δ” нумерует канал спаривания, соответствующий типу симметрии параметра порядка. Согласно классификации [6, 21] коррелятор Q_2 отвечает за спаривание с типом симметрии A_{1g}, а $Q_9 - B_{2g}$. Согласно данным, полученным при расчете малых кластеров методом МТД, эти типы симметрии являются основными для кластеров FeAs. Близкие типы симметрии рассматривались в работе [22] при расчете упрощенной S_4-модели. Выражения для соответствующих параметров порядка имеют вид

$$\Delta^+_2(i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha\mu}(a^+_{i,\alpha,\uparrow}a^+_{i+\mu,\alpha,\downarrow} - a^+_{i,\alpha,\downarrow}a^+_{i+\mu,\alpha,\uparrow}); \quad (5)$$

$$\Delta^+_9(i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha\mu}(a^+_{i,-\alpha,\uparrow}a^+_{i+\mu,\alpha,\downarrow} - a^+_{i,\alpha,\downarrow}a^+_{i+\mu,-\alpha,\uparrow}), \quad (6)$$

где N – число узлов (атомов Fe) в системе, индекс “α” нумерует орбитали, а индекс “μ” – ближайших соседей для узла i.

Для извлечения из (4) аномальных средних вида $\langle aa\rangle$, $\langle a^+a^+\rangle$ необходимо разложить это выражение по теореме Вика, т.е. каждое четырехфермионное слагаемое представить следующим образом [29]:

$$\langle T_\tau a_{i,\alpha',\sigma'}(\tau) a_{j,\alpha,\sigma}(\tau) a^+_{k,\beta,\sigma''}(0) a^+_{l,\beta',\sigma'''}(0)\rangle \to$$

$$\to \langle T_\tau a_{i,\alpha',\sigma'}(\tau) a^+_{l,\beta',\sigma'''}(0)\rangle \langle T_\tau a_{j,\alpha,\sigma}(\tau) a^+_{k,\beta,\sigma''}(0)\rangle -$$

$$- \langle T_\tau a_{i,\alpha',\sigma'}(\tau) a^+_{k,\beta,\sigma''}(0)\rangle \langle T_\tau a_{j,\alpha,\sigma}(\tau) a^+_{l,\beta',\sigma'''}(0)\rangle. \quad (7)$$

В итоге имеем следующую комбинацию попарных произведений нормальных средних (функций Грина):

$$G_2 = \frac{1}{N} \sum_{\substack{ij\alpha\beta \\ \mu\nu\sigma}} \int_0^\beta d\tau (\langle a_{j+\nu,\beta,\sigma}(\tau) a^+_{i+\mu,\alpha,\sigma}(0)\rangle -$$

$$- \langle a_{j,\beta,\sigma}(\tau) a^+_{i,\alpha,\sigma}(0)\rangle -$$

$$- \langle a_{j+\nu,\beta,\sigma}(\tau) a^+_{i+\mu,\alpha,-\sigma}(0)\rangle + \langle a_{j,\beta,-\sigma}(\tau) a^+_{i,\alpha,\sigma}(0)\rangle); \quad (8)$$

$$G_9 = \frac{1}{N} \sum_{\substack{ij\alpha\beta \\ \mu\nu\sigma}} \int_0^\beta d\tau (\langle a_{j+\nu,s\beta,\sigma}(\tau) a^+_{i+\mu,s\alpha,\sigma}(0)\rangle -$$

$$- \langle a_{j,s\beta,\sigma}(\tau) a^+_{i,s\alpha,\sigma}(0)\rangle -$$

$$- \langle a_{j+\nu,s\beta,\sigma}(\tau) a^+_{i+\mu,-s\alpha,-\sigma}(0)\rangle + \langle a_{j,-s\beta,-\sigma}(\tau) a^+_{i,s\alpha,\sigma}(0)\rangle), \quad (9)$$

где индексы "i" и "j" нумеруют узлы решетки (атомы железа), индексы "α" и "β" – орбитали x и y, индексы "μ" и "ν" – ближайших соседей для узлов i и j, соответственно, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ – проекция спина на данном узле и данной орбитали ($s = 1$ при $\sigma = \uparrow$ и -1 при $\sigma = \downarrow$).

Тогда разности $Q_2 - G_2$ и $Q_9 - G_9$ будут давать информацию об аномальных средних вида

$$\langle a^+_{i,\alpha',\uparrow} a^+_{l,\beta',\downarrow}\rangle \langle a_{j,\alpha,\downarrow} a_{k,\beta,\uparrow}\rangle \quad (10)$$

и возможности спаривания носителей заряда в данном канале симметрии параметра порядка.

Основной проблемой для данного расчета двумерной фермионной системы является *проблема знака* [30]. Она обусловлена тем, что статистические веса мгновенных конфигураций, по которым производится суммирование в процессе работы алгоритма, могут иметь любой знак, а квантовомеханическое среднее является отношением сумм двух знакопеременных рядов. Отрицательный знак конфигурации возникает как от антисимметрии волновой функции, так и от знаков амплитуд перескока t_i ($i = 1, \ldots, 4$) в гамильтониане (1). Степень влияния проблемы знака на скорость сходимости расчетов зависит от многих факторов. В частности, она определяется удачным выбором базисных состояний системы. Для более эффективной сходимости и частичного подавления проблемы знака в схему было добавлено недиагональное слагаемое вида

$$-\alpha \sum_{kn_1n_2} (A_k^{n_1n_2} + \text{h.c.}). \quad (11)$$

Здесь $\alpha \sim 5 \cdot 10^{-3}$. Подобная добавка в гамильтониан, с одной стороны, не изменяет результатов расчета в пределах достигнутой точности, а с другой – ввод такого контролируемого недиагонального слагаемого существенно "оживляет" статистику и увеличивает скорость сходимости. Кроме того, наличие такого слагаемого позволяет напрямую собирать статистику по мацубаровской функции Грина $\langle T_\tau a_{i,\alpha,\sigma}(\tau) a^+_{j,\beta,\sigma'}(0)\rangle$ в траекторном алгоритме не менее эффективно, чем в детерминантном алгоритме МК.

Помимо этого, для расчета корреляционной четырехфермионной функции (4) в модель было добавлено еще одно малое недиагональное слагаемое вида

$$-\gamma \sum_{ij\alpha\sigma\alpha'\sigma'} (a^+_{i,\alpha,\sigma} a^+_{j,\alpha',\sigma'} + a_{j,\alpha',\sigma'} a_{i,\alpha,\sigma}). \quad (12)$$

Здесь параметр $\gamma \sim 5 \cdot 10^{-3}$ также мал и существенно не меняет статистики. Наличие в гамильтониане слагаемых (12) обеспечивает появление мгновенных конфигураций с одновременным (по шкале мнимого времени τ) рождением или уничтожением сразу двух фермионных траекторий на разных пространственных узлах решетки. Последнее позволяет эффективно рассчитывать корреляционные функции (4).

Корреляционные функции. Расчеты парных корреляционных функций (4) и нормальных средних (8), (9) для кластеров FeAs с числом ячеек 4×4, 6×6, 8×8 и 10×10 были проведены в рамках полной двухорбитальной модели (1) обобщенным квантовым методом МК в диапазоне температур β от 5 до 20 и диапазоне параметра взаимодействия U от 2 до 16 при сохранении соотношений (3). Данные представлены для половинного заполнения. При этом средний знак конфигурации менялся в диапазоне 0.1–0.9. Достаточно длительный процесс сбора информации о четырехфермионных корреляторах, а также существенная проблема знака, возрастающая при увеличении размера системы, уменьшении температуры и особенно при незначительном отклонении от половинного заполнения, привели к тому, что типичное число МК-шагов для достижения сходимости составило $\sim 10^{10}$.

На рис. 2 показаны корреляционные функции Q_2, Q_9, нормальные средние G_2, G_9 и разность этих ве-

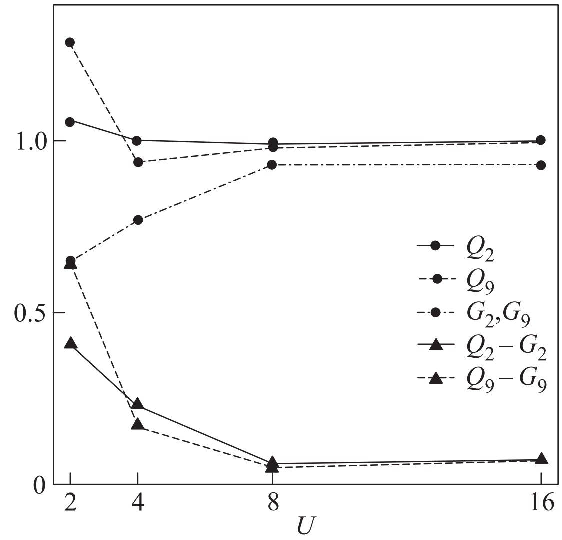

Рис. 2. Зависимости корреляционных функций Q_2, Q_9, нормальных средних G_2, G_9 и их разности от параметра взаимодействия U при сохранении соотношений (3). Кластер 8×8. Температура $\beta = 5$

личин для кластера 8×8 как функции параметра взаимодействия.

Во-первых, отметим, что во всех наших расчетах величины G_2 и G_9 совпали в пределах относительной погрешности расчета, которая для всех данных составляет $\sim 10^{-2}$–10^{-3}. Таким образом, нормальные средние (8), (9) оказались нечувствительными к типу симметрии. Далее, данные на рис. 2 для разностей $Q_2 - G_2$, $Q_9 - G_9$ свидетельствуют о наличии аномальных средних, т.е. о возможности спаривания носителей заряда при $U < 8$ для обоих типов симметрии. При большем значении U взаимодействия парных корреляций не наблюдается.

Проследим за этим эффектом при изменении температуры и размера системы.

На рис. 3 для максимального рассчитанного здесь кластера 10×10 показаны зависимости тех же корреляционных функций от температуры для двух значений параметра взаимодействия, $U = 4$ и 8.

Прослеживается различие в поведении парных корреляций. Так, при меньшем взаимодействии ($U = 4$) корреляции Q_2 имеют место вплоть до минимальной расчетной температуры $\beta = 20$, а симметрийный канал Q_9 при температурах $\beta > 10$ исчезает. При большем взаимодействии ($U = 8$) парные корреляции для обоих каналов спаривания монотонно исчезают уже при $\beta > 5$.

Рассмотрим теперь зависимость эффекта от размера системы. На рис. 4 продемонстрированы парные корреляции как функции линейного размера системы для двух значений параметра взаимодействия при температуре $\beta = 10$. При взаимодействии $U = 4$ парные корреляции имеют место уже для кластера 6×6 и далее слабо зависят от размера системы. В то же время при большем взаимодействии, $U = 8$, разности $Q_2 - G_2$, $Q_9 - G_9$ для обоих типов симметрий меньше нуля для кластера любого размера.

На рис. 5 представлены данные для максимально низкой температуры расчета $\beta = 20$. Проанализируем эти результаты по скейлингу парных корреляционных функций для двух значений параметра взаимодействия. При $U = 4$ четко прослеживаются парные корреляции с типом симметрии A_{1g} для кластеров с размерами 8×8 и более. При этом они слабо зависят от размера системы. Что касается возможности симметрии спаривания B_{2g}, то данные свидетельствуют об исчезновении соответствующих парных корреляций при возрастании размера системы. Так же как и для случая более низкой температуры, при большем взаимодействии, $U = 8$, разности $Q_2 - G_2$, $Q_9 - G_9$ для обоих типов симметрий оказываются меньше нуля для кластера любого размера.

Таким образом, вся совокупность представленных данных свидетельствует о возможности спаривания носителей заряда при выбранных значениях амплитуд перескоков (2) и параметре взаимодействия $U < 8$ (при соотношениях (3) между U, V, J). При этом реализуется симметрия A_{1g}.

Полученные для соотношения между аномальными и нормальными средними результаты указывают на то, что в основном зависят от величины взаимодействия и температуры именно нормальные средние G_2 и G_9, почти линейно возрастая с увеличением U и β (для сильного взаимодействия). Корреляционные же функции зависят от этих параметров слабее. Именно рост нормальных средних и приводит к эффективному подавлению парных корреляций при росте взаимодействия и обратной температуры при $U \gtrsim 8$. При этом уже для кластера 6×6 значения корреляционных параметров выходят на насыщение, слабо меняясь в больших системах.

Сопоставим наши данные с результатами расчета малых кластеров методом МТД [6, 19, 20, 23, 31]. Анализ эффективного притяжения в этих работах проводился как исходя из энергии связи, так и прямым расчетом аномальных средних вида $\langle a^{+}_{i,\alpha',\uparrow} a^{+}_{l,\beta',\downarrow} \rangle$ с учетом симметрии спаривания. Расчеты позволили выделить область параметров, при которых наблюдаются типы спаривания A_{1g} и B_{2g}. Наиболее реалистичными параметрами для спаривания оказались $J \sim (0.1–0.2)U$, $U < 6$. Наши результаты не противоречат этим данным только для симметрии A_{1g}.

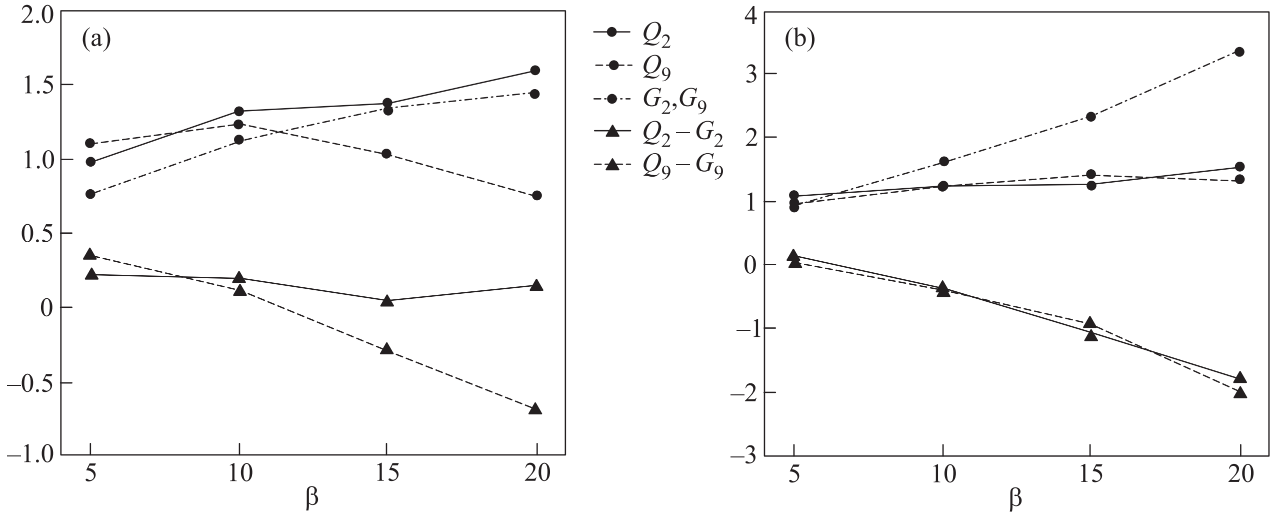

Рис. 3. Зависимости корреляционных функций Q_2, Q_9, нормальных средних G_2, G_9 и их разности от температуры. Кластер 10×10. Параметры взаимодействия: $U=4$, $V=2$, $J=1$ (a) и $U=8$, $V=4$, $J=2$ (b)

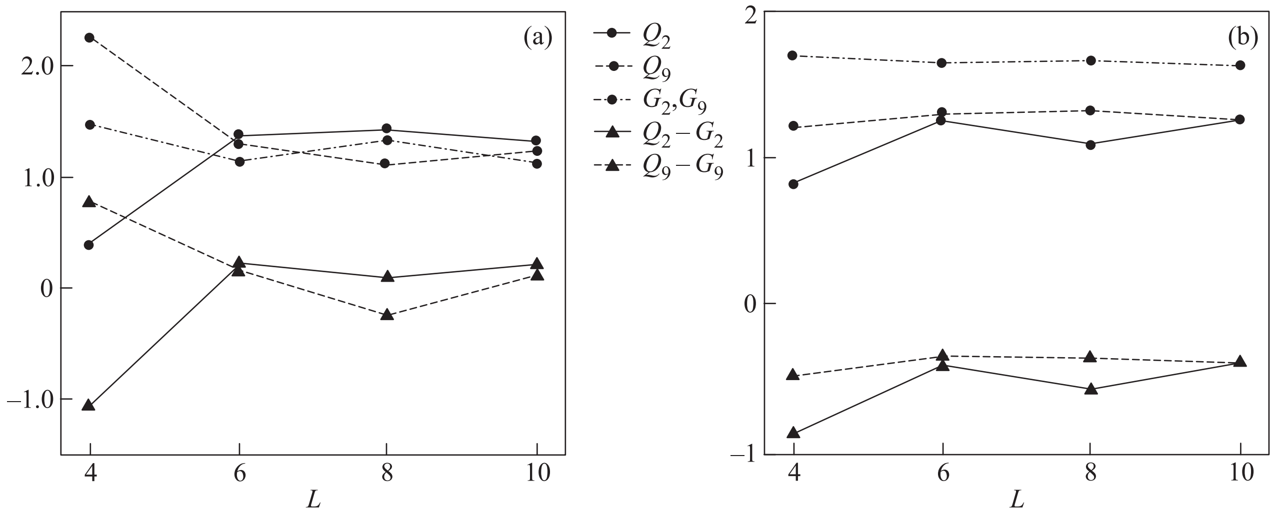

Рис. 4. Зависимости корреляционных функций Q_2, Q_9, нормальных средних G_2, G_9 и их разности от размера кластера L. Температура $\beta=10$. Параметры взаимодействия: $U=4$, $V=2$, $J=1$ (a) и $U=8$, $V=4$, $J=2$ (b)

Расчеты кластера 2×5 [20], проведенные точно при наборе параметров (2) и близком к (3) соотношении между константами взаимодействия, приводят к отрицательной энергии связи, т.е. к возможности притяжения носителей заряда.

Близкие типы симметрии рассматривались в работе [23] при расчете упрощенной S_4-модели детерминантным методом МК. Расчет парных корреляционных функций вида (4) показал возможность A_{1g}-спаривания (по терминологии [23] S_{xy}-спаривания) при значениях параметров, близких к (2) и (3).

Заметим также, что вывод о наличии A_{1g}-симметрии был сделан в работе [32] с помощью метода DMRG, правда при несколько другом наборе параметров двухорбитальной модели.

Для сопоставления данных по парным корреляциям и магнитному упорядочению мы, как и авторы [23], исследовали магнитные корреляции с помощью спиновой восприимчивости, а именно ее диагональной части (вдоль направления z) при нулевой частоте:

$$\chi(q)=\int_0^\beta d\tau\sum_{\alpha\beta}\sum_{ij}e^{iq(i-j)}\langle m_{i,\alpha}(\tau)m_{j,\beta}(0)\rangle; \qquad (13)$$

$$m_{i\alpha}=\frac{1}{2}(n_{i,\alpha,\uparrow}-n_{i,\alpha,\downarrow}).$$

На рис. 6 представлена величина (13) как функция импульса q вдоль симметрийных направлений

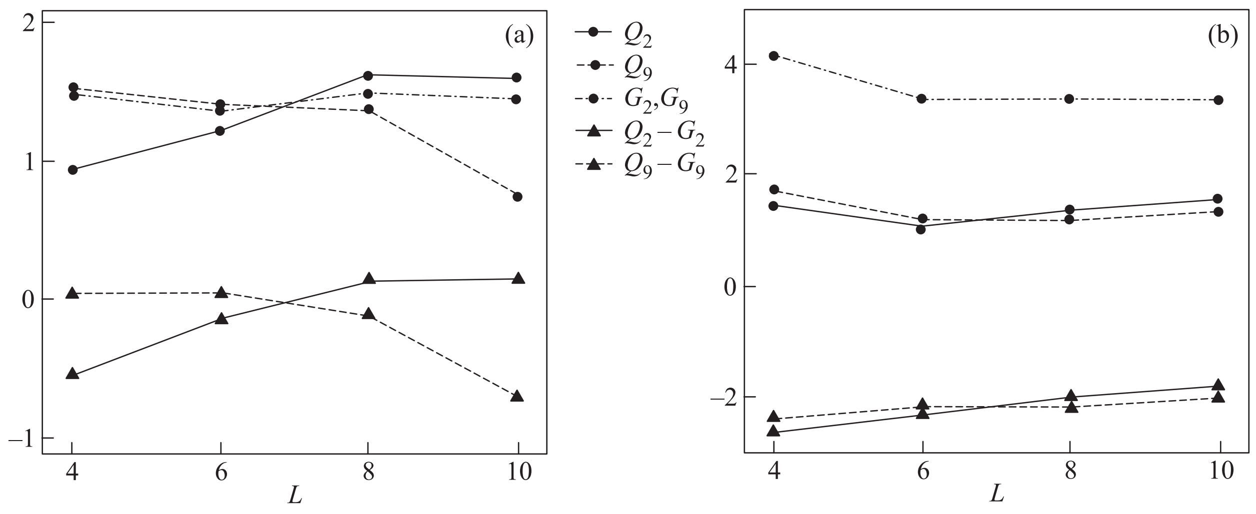

Рис. 5. Зависимости корреляционных функций Q_2, Q_9, нормальных средних G_2, G_9 и их разности от размера кластера L. Температура $\beta = 20$. Параметры взаимодействие: $U = 4$, $V = 2$, $J = 1$ (a) и $U = 8$, $V = 4$, $J = 2$ (b)

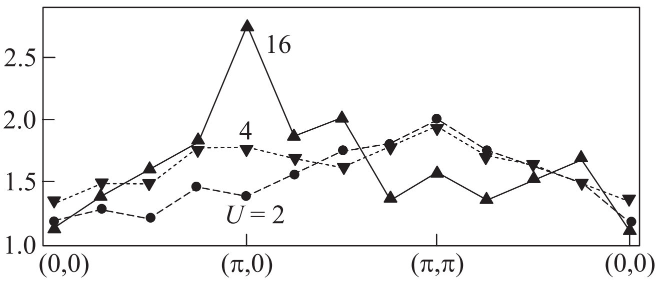

Рис. 6. Спиновая восприимчивость (13) как функция импульса для различных параметров взаимодействия при сохранении соотношений (3)

в первой зоне Бриллюэна при различных значениях параметра взаимодействия U для кластера 8×8. Наблюдается четкая тенденция смещения пика при увеличении взаимодействия от точки (π, π) к точке $(\pi, 0)$. Таким образом, в области малых параметров U, где согласно нашим данным наблюдаются парные корреляции, начинает проявляться и специфическое антиферромагнитное упорядочение (SDW-волна спиновой плотности), что также было отмечено в [6, 19, 20, 23, 25, 33].

Заключение. Итак, нами проведены расчеты парных корреляционных функций кластеров FeAs с числом ячеек 4×4, 6×6, 8×8 и 10×10 в рамках полной двухорбитальной модели квантовым методом МК при различных температурах и параметрах взаимодействия в условиях половинного заполнения зоны. Определена область параметров модели, отвечающая положительным значениям аномальных средних, что может привести к эффективному притяжению носителей заряда. Обнаружено, что при малом параметре взаимодействия ($U < 8$) возможно спаривание носителей заряда, отвечающее в основном симметрии A_{1g} и в меньшей степени симметрии B_{2g}. Показано, что сценарий спаривания носителей заряда имеет место на фоне образования волны спиновой плотности (SDW).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 14-08-00509 и 12-02-00561), а также Российского научного фонда.

1. Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).
2. Yu. Isyumov and E. Kurmaev, *High-Tc Superconductors Based on FeAs Compounds*, Springer (2010), 278 p.
3. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **85**, 849 (2013).
4. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
5. S. Raghu, X.-L. Qi, Ch.-X. Liu, D. J. Scalapino, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **77**, 220503(R) (2008).
6. A. Moreo, M. Daghofer, J. A. Riera, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **79**, 134502 (2009).
7. M. Daghofer, A. Nicholson, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **81**, 014511 (2010).
8. S.-L. Yu, J. Knang, and J.-X. Li, Phys. Rev. B **79**, 064517 (2009).
9. Q. Luo, G. Martins, D.-X. Yao, M. Daghofer, R. Yu, A. Moreo, and E. Dagatto, Phys. Rev. B **82**, 104508 (2010).
10. S. Graser, T. A. Maier, P. J. Hirschfeld, and D. J. Scalapino, New J. Phys. **11**, 025016 (2009).
11. M. B. Садовский, УФН **178**, 1243 (2008).
12. K. Ishida, Y. Nakai, and H. Hosono, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 062001 (2009).

13. M. V. Sadovskii, E. Z. Kuchinskii, and I. A. Nekrasov, J. Mag. Mag. Mat. **324**, 3481 (2012).
14. M. V. Medvedev, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **95**, 37 (2012).
15. Н. В. Прокофьев, Б. В. Свистунов, И. С. Тупицын, ЖЭТФ **87**, 310 (1998).
16. В. А. Кашурников, А. В. Красавин, ЖЭТФ **132**, 81 (2010).
17. В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Письма в ЖЭТФ **97**, 378 (2013).
18. K. Haule, J. H. Shim, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **100**, 226402 (2008).
19. A. Nicholson, W. Ge, X. Zhang, J. Riera, M. Daghofer, A. M. Oles, G. B. Martins, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **106**, 217002 (2011).
20. M. Okumura, N. Nakai, H. Nakamura, N. Hayashi, S. Yamada, and M. Machida, Physica C **469**, 932 (2009).
21. Y. Wan and Q.-H. Wang, arXiv:0806.0923.
22. K. Kubo and P. Thalmeier, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, SA121 (2011).
23. T. Ma, H.-Q. Lin, and J. Hu, Phys. Rev. Lett. **110**, 107002 (2013).
24. Y. Wu, G. Liu, and T. Ma, EPL **104**, 27013 (2013).
25. S. Liang, G. Alvarez, C. Sen, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **109**, 047001 (2012).
26. S. Liang, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **111**, 047004 (2013).
27. R. Applegate, R. P. Singh, C. C. Chen, and T. P. Devereaux, Phys. Rev B **85**, 054411 (2012).
28. D. J. Singh and M.-H. Du, Phys. Rev. Lett. **100**, 273003 (2008).
29. А. Абрикосов, Л. Горьков, И. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Добросвет, М. (1998).
30. N. Furukawa and M. J. Imada, Proc. Soc. Jpn. **60**, 810 (1991).
31. M. Daghofer, A. Moreo, J. A. Riera, E. Arrigoni, D. J. Scalapino, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **101**, 237004 (2008).
32. E. Berg, S. A. Kivelson, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **81**, 172504 (2010).
33. Y. Ran, F. Wang, H. Zhau, A. Vishwanath, and D.-H. Lee, Phys. Rev. B **79**, 014505 (2009).