

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОДНОСЛОЙНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ FeSe: МЕЛКИЕ ЗОНЫ И КОРРЕЛЯЦИИ

И. А. Некрасов <sup>a\*</sup>, Н. С. Павлов <sup>a\*\*</sup>, М. В. Садовский <sup>a,b\*\*\*</sup>

<sup>a</sup> Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук  
620016, Екатеринбург, Россия

<sup>b</sup> Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук  
620290, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 17 августа 2017 г.

Электронный спектр типичного однослойного сверхпроводника на основе монослойной пленки FeSe на подложке SrTiO<sub>3</sub> (FeSe/STO), полученный из рентгеновской фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES), требует ответа на ряд вопросов: какова причина возникновения мелкой зоны и ее так называемой «реплики» вблизи точки *M* и почему экспериментально не обнаружены дырочные поверхности Ферми вблизи точки  $\Gamma$ . Наши обширные LDA+DMFT-расчеты показывают, что явный учет электрон-электронных корреляционных эффектов для *3d*-состояний Fe приводит к практически количественному воспроизведению довольно сложной зонной структуры, которая наблюдается в экспериментах ARPES, в непосредственной близости от уровня Ферми FeSe/STO. В частности, хорошо воспроизводятся довольно необычные мелкие электронные зоны вблизи точки *M* зоны Бриллюэна. В данной работе проводится детальный анализ орбитального состава как теоретических, так и экспериментальных квазичастичных зон. Показано, что в FeSe/STO перенормированная электронными DMFT-корреляциями LDA-зона *3d<sub>xy</sub>*-состояний Fe сводится к квазичастичной зоне практически в той же области энергий, что и экспериментально наблюдаемая «реплика» зоны в окрестности точки *M*. Однако учет корреляционных эффектов оказывается недостаточным для подавления дырочных поверхностей Ферми вокруг точки  $\Gamma$ , которые не наблюдаются в большинстве экспериментов ARPES. Эти поверхности Ферми сохраняются даже при увеличении силы кулоновского прямого и/или обменного (хундовского) взаимодействия, в то время как общее согласие с данными ARPES ухудшается. Увеличение числа электронов также не приводит к исчезновению этой поверхности Ферми и при этом значительно ухудшает согласие LDA+DMFT-результатов с данными ARPES. Мы также приводим некоторые простые оценки величины взаимодействия электронов с оптическими фононами на интерфейсе FeSe/STO, приводящего к рассеянию «вперед», которые показывают, что этого взаимодействия, по-видимому, недостаточно для формирования «реплики» зоны в этой системе и значительного увеличения температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$ .

DOI: 10.7868/S0044451018040065

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Открытие класса сверхпроводников на основе пниктидов железа оживило интенсивный поиск и исследования новых высокотемпературных сверхпроводников (см. обзоры [1–6]). В настоящее время существует общее согласие в том, что, несмотря на многие сходства, природа сверхпроводимости в этих

материалах существенно отличается от таковой в ВТСП-купратах, а дальнейшие исследования этих новых систем могут привести к лучшему пониманию проблемы высокотемпературной сверхпроводимости в целом.

Фактически, за открытием сверхпроводимости в пниктидах железа вскоре последовало ее обнаружение в халькогениде железа FeSe, что вызвало большой интерес к данной системе из-за ее относительной «химической» простоты, хотя ее сверхпроводящие характеристики (при нормальных условиях) были довольно скромными ( $T_c \sim 8$  К). Электронная структура FeSe в настоящее время хорошо понята и

\* E-mail: nekrasov@iep.uran.ru

\*\* E-mail: pavlov@iep.uran.ru

\*\*\* E-mail: sadovski@iep.uran.ru

весьма похожа на таковую у пниктидов железа (см. обзор [7]).

Однако общая ситуация с халькогенидами железа резко изменилась с появлением интеркалированных систем на основе FeSe, с повышенными значениями  $T_c$  до 30–40 К. Вскоре стало понятно, что их электронная структура, как правило, имеет совершенно иную форму, нежели в пниктидах железа [8, 9]. Первой системой такого типа была  $A_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  ( $A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$ ) с  $T_c \sim 30$  К [10, 11]. Обычно считается, что сверхпроводимость в этой системе появляется в идеальной структуре типа 122, хотя большинство исследованных до сих пор образцов были многофазными, состоящими из смеси мезоскопических сверхпроводящих и изоляторных (антиферромагнитных) структур (например, таких как  $\text{K}_2\text{Fe}_4\text{Se}_5$ ), что усложняет исследования этой системы [12].

Дальнейшее увеличение  $T_c$  до 45 К было достигнуто интеркалированием слоев FeSe довольно большими молекулами в таких соединениях, как  $\text{Li}_x(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  [13] и  $\text{Li}_x(\text{NH}_2)_y(\text{NH}_3)_{1-y}\text{Fe}_2\text{Se}_2$  [14]. Рост  $T_c$  в этих системах иногда связывается с увеличением расстояния между слоями FeSe, т. е. с усилением двумерной природы данных материалов. Недавно начались активные исследования системы  $[\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x\text{OH}]\text{FeSe}$  со значением  $T_c \sim 43$  К [15, 16], для которой получены достаточно хорошие однофазные монокристаллические образцы.

Значительный прорыв в исследованиях сверхпроводников на основе халькогенидов железа связан с экспериментально обнаруженным рекордным значением  $T_c$  в эпитаксиальных пленках монослоя FeSe на подложке  $\text{SrTiO}_3$  (STO) [17]. Пленки FeSe, синтезированные в работе [17], а также в большинстве других работ, выращены на плоскости (001) подложки STO. Поскольку данные пленки очень нестабильны на воздухе, во многих работах резистивные переходы в основном изучались на пленках, покрытых аморфным кремнием или несколькими слоями FeTe, что значительно уменьшало наблюдаемые значения  $T_c$ . Уникальные измерения сопротивления пленок FeSe на STO, выполненные в работе [18] *in situ*, показали рекордные значения  $T_c > 100$  К. Однако до сих пор эти результаты не были подтверждены независимыми экспериментами. Во многих ARPES-экспериментах было измерено температурное поведение сверхпроводящей щели в пленках FeSe/STO, которое достаточно уверенно продемонстрировало значения  $T_c$  в диапазоне 65–75 К, а иногда даже выше.

Пленки, состоящие из нескольких слоев FeSe, обычно дают значения  $T_c$  намного ниже, чем для однослойных пленок [19]. Монослойная пленка FeSe на плоскости (110) STO, покрытая несколькими слоями FeTe, изучалась в работе [20]. Измерения удельного сопротивления, включая измерения верхнего критического магнитного поля  $H_{c2}$ , дали значение  $T_c \sim 30$  К. Сверхпроводящий переход в пленке FeSe, выращенной на подложке  $\text{BaTiO}_3$  (BTO), легированной Nb (с еще большими значениями постоянной решетки, около  $3.99 \text{ \AA}$ ), исследованный при помощи ARPES, был обнаружен при температуре  $T_c \sim 70$  К [21]. В работе [22] при помощи туннельной спектроскопии были получены довольно большие значения величины сверхпроводящей щели для монослоев FeSe, выращенных на плоскости (001)  $\text{TiO}_2$  (анатаза), которая, в свою очередь, выращивалась на плоскости (001)  $\text{SrTiO}_3$ . Константа решетки анатаза фактически очень близка к постоянной решетки объемного FeSe, поэтому данные пленки FeSe были по существу нерастянутыми.

Однослойные пленки FeSe также выращивались на подложке из графена, но величина  $T_c$  в таких системах была порядка 8–10 К, как и в объемном FeSe [23]. Это подчеркивает возможную уникальную роль подложек, таких как  $\text{Sr}(\text{Ba})\text{TiO}_3$ , в значительном увеличении  $T_c$ .

Более подробную информацию о пленках FeSe/STO и других монослойных системах FeSe можно найти в недавних обзорах [24, 25].

Электронный спектр пниктидов железа в настоящий момент хорошо изучен как в рамках теоретических расчетов, основанных на современной зонной теории, так и в ARPES-экспериментах [1–6]. Сейчас ясно, что почти вся физика, связанная со сверхпроводимостью, определяется электронными состояниями плоскости (слоя) FeAs. Спектр носителей в окрестности уровня Ферми  $\pm 0.5$  эВ, где формируется сверхпроводимость, практически содержит только  $3d$ -зоны Fe. Уровень Ферми пересекает до пяти зон (две или три дырочных и две электронных зоны), образуя типичный спектр полуметалла.

В этом довольно узком интервале энергий вблизи уровня Ферми дисперсии электронных  $3d$ -состояний Fe, в принципе, можно рассматривать как параболические [4, 26]. Большинство расчетов LDA+DMFT [27, 28] показывает, что роль электронных корреляций в пниктидах железа, в отличие от купратов, относительно незначительна. Она сводится к более или менее существенной эффективной перенормировке массы электронов проводимости, а также к общему сужению («сжатию») зон.

Наличие электронных и дырочных поверхностей Ферми одинакового размера, приблизительно удовлетворяющих условию нестинга, играет важную роль в теориях сверхпроводящего спаривания в арсенидах железа, основанных на антиферромагнитном спин-флуктуационном механизме спаривания [4]. Электронный спектр и поверхности Ферми в халькогенидах железа сильно отличаются от таковых в пниктидах железа, что ставит новые задачи для понимания микроскопического механизма сверхпроводимости в системах на основе FeSe.

Первые LDA-расчеты электронной структуры системы  $A_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  ( $A = \text{K}, \text{Cs}$ ) были выполнены вскоре после ее экспериментального открытия [29, 30]. Неожиданно было обнаружено, что электронный спектр  $A_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  системы качественно отличается от объемного FeSe и спектров практически всех известных систем на основе FeAs.

Рассчитанные поверхности Ферми для  $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  [29] существенно отличаются от поверхностей Ферми систем на основе FeAs — в центре зоны Бриллюэна имеются относительно небольшие электронные поверхности Ферми, а электронные цилиндры в углах зоны Бриллюэна значительно больше. Формы поверхностей Ферми, типичные для объемных систем FeSe и FeAs, могут быть получены только на гораздо больших (по-видимому, экспериментально недоступных) уровнях дырочного легирования [29]. Эта форма поверхностей Ферми в системах  $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  была почти сразу подтверждена в ARPES-экспериментах [31]. Заметим, что в системе  $A_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  нельзя говорить о каком-либо, даже приближенном, нестинге электронных и дырочных поверхностей Ферми.

Расчеты электронной структуры методами LDA+DMFT и LDA'+DMFT для системы  $\text{K}_{1-x}\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  при различных уровнях легирования были выполнены в работах [32–34]. Результаты этих расчетов в целом хорошо согласуются с ARPES-данными [35, 36], которые демонстрируют сильное затухание квазичастиц в непосредственной близости от уровня Ферми и сильную перенормировку эффективных масс квазичастиц по сравнению с системами на основе FeAs.

Ниже мы проводим сравнение экспериментальных (ARPES) квазичастичных зон для наиболее интересного случая среди слоистых сверхпроводников FeSe/STO с результатами наших предыдущих LDA+DMFT-расчетов для FeSe/STO и изолированного монослоя FeSe [34]. Также в данной работе приведены LDA+DMFT-результаты для более широкого диапазона модельных параметров и проведен де-

тальный LDA+DMFT-анализ квазичастичных зон, в терминах исходной зонной LDA-структуры [37].

## 2. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА FeSe-И FeSe/STO-СИСТЕМ

Объемная система FeSe обладает, вероятно, самой простой кристаллической структурой среди высокотемпературных сверхпроводников на основе железа. Она имеет тетрагональную структуру с пространственной группой симметрии  $P4/nmm$  и параметрами решетки  $a = 3.765 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.518 \text{ \AA}$ . Экспериментально наблюдаются следующие кристаллографические позиции атомов: Fe ( $2a$ ) (000), Se ( $2c$ ) ( $0,0.5, z_{\text{Se}}$ ),  $z_{\text{Se}} = 0.2343$  [38]. В наших LDA-расчетах для изолированного монослоя FeSe были использованы именно эти кристаллографические параметры.

Кристаллическая структура FeSe/STO была взята из работы [39], в которой, в рамках LDA-расчета, была проведена структурная релаксация. В slab-подходе монослой FeSe был помещен на три слоя  $\text{TiO}_2\text{-SrO}$  для моделирования объемной подложки  $\text{SrTiO}_3$ . Использовались следующие параметры кристаллической структуры для FeSe/STO:  $a = 3.901 \text{ \AA}$ , расстояние Ti–Se  $3.13 \text{ \AA}$ , расстояние Fe–O —  $4.43 \text{ \AA}$ , расстояние между верхним (нижним) атомом Se и плоскостью атомов Fe —  $1.41 \text{ \AA}$  ( $1.3 \text{ \AA}$ ); атомные позиции Sr — ( $0.5 \text{ \AA}, 0.5 \text{ \AA}, -1.95 \text{ \AA}$ ), O — ( $0.5 \text{ \AA}, 0, 0$ ), ( $0, 0, -1.95 \text{ \AA}$ ), Ti — ( $0, 0, 0$ ).

Кристаллическая структура монослойной пленки FeSe на подложке STO показана на рис. 1. Здесь слой FeSe непосредственно примыкает к поверхностному слою  $\text{TiO}_2$  объемной подложки STO. Постоянная решетки в объемных образцах FeSe равна  $3.77 \text{ \AA}$ , в то время как STO имеет существенно большую постоянную решетки, равную  $3.905 \text{ \AA}$ , так что однослойная пленка FeSe должна быть заметно «растянута» по сравнению с объемным FeSe. Однако это растяжение быстро исчезает по мере роста числа последующих слоев.

## 3. ДЕТАЛИ РАСЧЕТОВ

Электронная структура изолированного монослоя FeSe (imlFeSe) и монослоя FeSe на подложке  $\text{SrTiO}_3$  рассчитывались в рамках метода FP-LAPW [40]. Проводилось проектирование функций Ванье для  $3d$ -состояний Fe и  $4p$ -состояний Se (imlFeSe) и для  $3d$ -состояний Fe,  $4p$ -состояний Se и для  $2p_y$ -состояний O верхнего слоя  $\text{TiO}_2$  в подложке  $\text{SrTiO}_3$ . Для этого использовались стандартный ин-

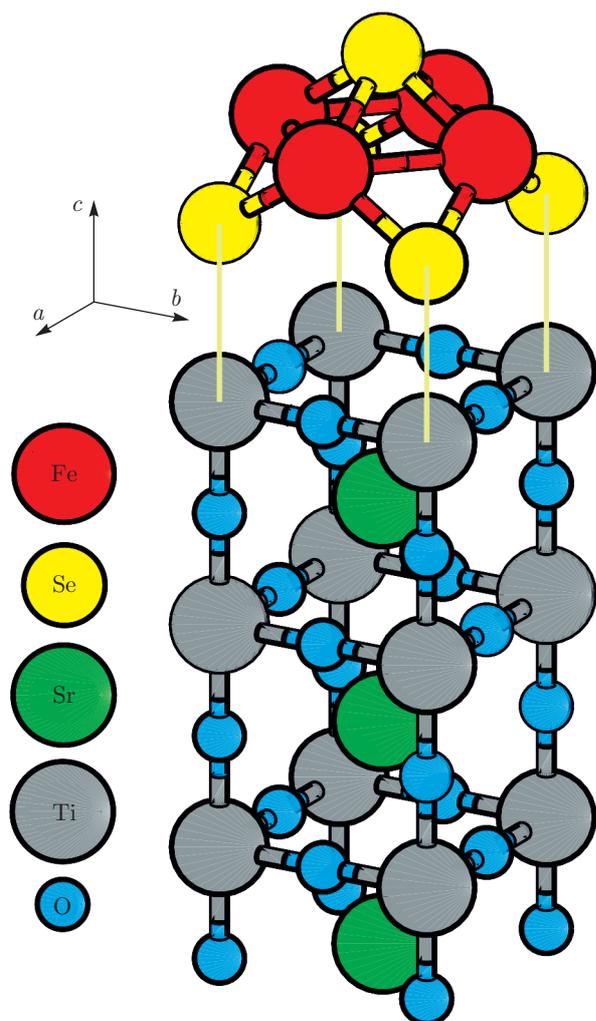


Рис. 1. Кристаллическая структура монослоя FeSe, расположенного на плоскости (001) SrTiO<sub>3</sub>; верхним слоем подложки является слой TiO<sub>2</sub>

терфейс wien2wannier [41] и техника проектирования wannier90 [42].

Расчеты DMFT (СТ-QMC) [43–46] выполнялись при величине обратной температуры  $\beta = 40$  эВ<sup>-1</sup> (около 290 К) с использованием порядка  $10^8$  шагов Монте-Карло. В данной работе мы рассмотрели несколько значений параметров взаимодействия модели Хаббарда вокруг типичных значений  $U = 5.0$  эВ и  $J = 0.9$  эВ для изолированного FeSe-слоя и FeSe/STO, а также несколько уровней легирования — 0.1, 0.2 и 0.3 электронов на один ион Fe, что дополняет результаты нашей предыдущей работы [34].

В данной работе использован самосогласованный FLL (fully-localized limit) вид поправки на двойной учет [47]. Таким образом, вычисленные значе-

ния заполнений  $3d$ -зоны Fe и соответствующие энергии поправки на двойной учет составляют  $E_{dc} = 31.63$  эВ,  $n_d = 7.35$  (imlFeSe),  $E_{dc} = 30.77$  эВ,  $n_d = 7.16$  (FeSe/STO).

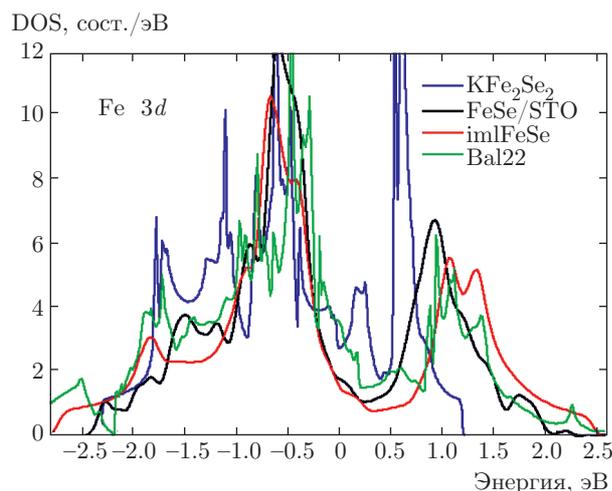
Контурные карты спектральных функций, рассчитанных в LDA+DMFT-подходе, были получены после аналитического продолжения локальной собственно-энергетической части  $\Sigma(\omega)$  с мацубаровских частот на действительные. С этой целью был применен метод паде-аппроксимантов [48], результаты которого, в свою очередь, были перепроверены с помощью метода максимальной энтропии [49] для функции Грина.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

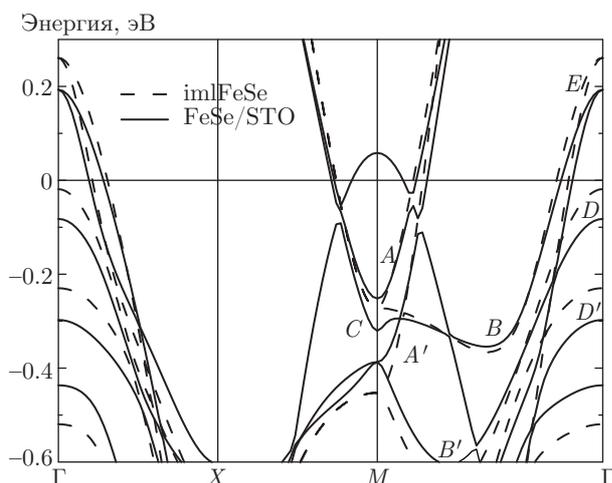
Оказалось, что в слоистых FeSe-системах корреляционные эффекты приводят к более значительной перенормировке рассчитанных LDA-методом дисперсий, в отличие от арсенидов железа. В арсенидах железа квазичастичные полосы вблизи уровня Ферми хорошо определены, а в системе  $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$  в окрестности уровня Ферми наблюдается сильное подавление интенсивности квазичастичных зон [32–34]. Перенормировка массы квазичастиц или, другими словами, корреляционное сужение зон на уровне Ферми достигает в халькогенидах значений 4–5, тогда как в арсенидах железа этот коэффициент составляет лишь 2–3 при тех же значениях параметров взаимодействия. Это можно понять в терминах  $W$  — ширины «голой»  $3d$ -зоны Fe, полученной из LDA-расчетов. Как показано на рис. 2, наибольшая ширина зоны  $W = 5.2$  эВ соответствует изолированному монослою FeSe (красная кривая), затем идет Ba122 (зеленая кривая) —  $W = 4.8$  эВ, FeSe/STO (черная кривая) —  $W = 4.3$  эВ и, наконец, самую узкую зону имеет система  $KFe_2Se_2$  (синяя кривая) —  $W = 3.5$  эВ. В свою очередь, такое понижение  $W$  можно объяснить ростом постоянной решетки в данном ряде систем от imlFeSe к  $KFe_2Se_2$ .

##### 4.1. Результаты DFT/LDA-расчетов

Для дальнейшего детального анализа LDA+DMFT-результатов необходимо начать со сравнения LDA-спектров изолированного монослоя FeSe и спектра FeSe/STO системы, показанных на рис. 3. Данные спектры имеют форму, характерную для систем на основе FeAs и объемного FeSe, как подробно описано выше. Однако ARPES-эксперименты [50–52] демонстрируют совершенно иную картину зон вблизи уровня Ферми. Фактически,



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Полученные в LDA плотности  $3d$ -состояний Fe (DOS) для различных сверхпроводников на основе железа: imlFeSe (красная кривая,  $W = 5.2$  эВ), Ba122 (зеленая кривая,  $W = 4.8$  эВ), FeSe/STO (черная кривая,  $W = 4.3$  эВ), KFe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> (синяя кривая,  $W = 3.5$  эВ). Уровень Ферми соответствует нулевой энергии



**Рис. 3.** Полученные в LDA зоны для парамагнитного изолированного монослоя FeSe (штриховая линия) и парамагнитного FeSe/STO (сплошная линия). Буквы обозначают зоны таким же образом, как и на рис. 4. Уровень Ферми соответствует нулевой энергии

в монослоях FeSe на STO вокруг точки  $M$  зоны Бриллюэна наблюдаются только электронные листы поверхности Ферми, а дырочные листы, центрированные вокруг точки  $\Gamma$  (в центре зоны), просто отсутствуют [50]. Таким образом, подобно интеркалированным FeSe-системам, в данном случае нестинг поверхностей Ферми невозможен — просто нет поверхностей Ферми, которые могли бы совместиться!

Одной из возможных причин противоречия между ARPES-экспериментами [50] и зонными расчетами, связанного с отсутствием дырочных цилиндров в точке  $\Gamma$ , может быть различие постоянных решетки объемного FeSe и подложки STO. Наши расчеты показали, что при изменении параметра решетки  $a$  и высоты Se над плоскостью железа  $z_{Se}$  в диапазоне  $\pm 5\%$  относительно аналогичных значений для объемного FeSe не возникает качественных изменений поверхностей Ферми в FeSe и дырочные цилиндры в точке  $\Gamma$  всегда остаются более или менее неизменными.

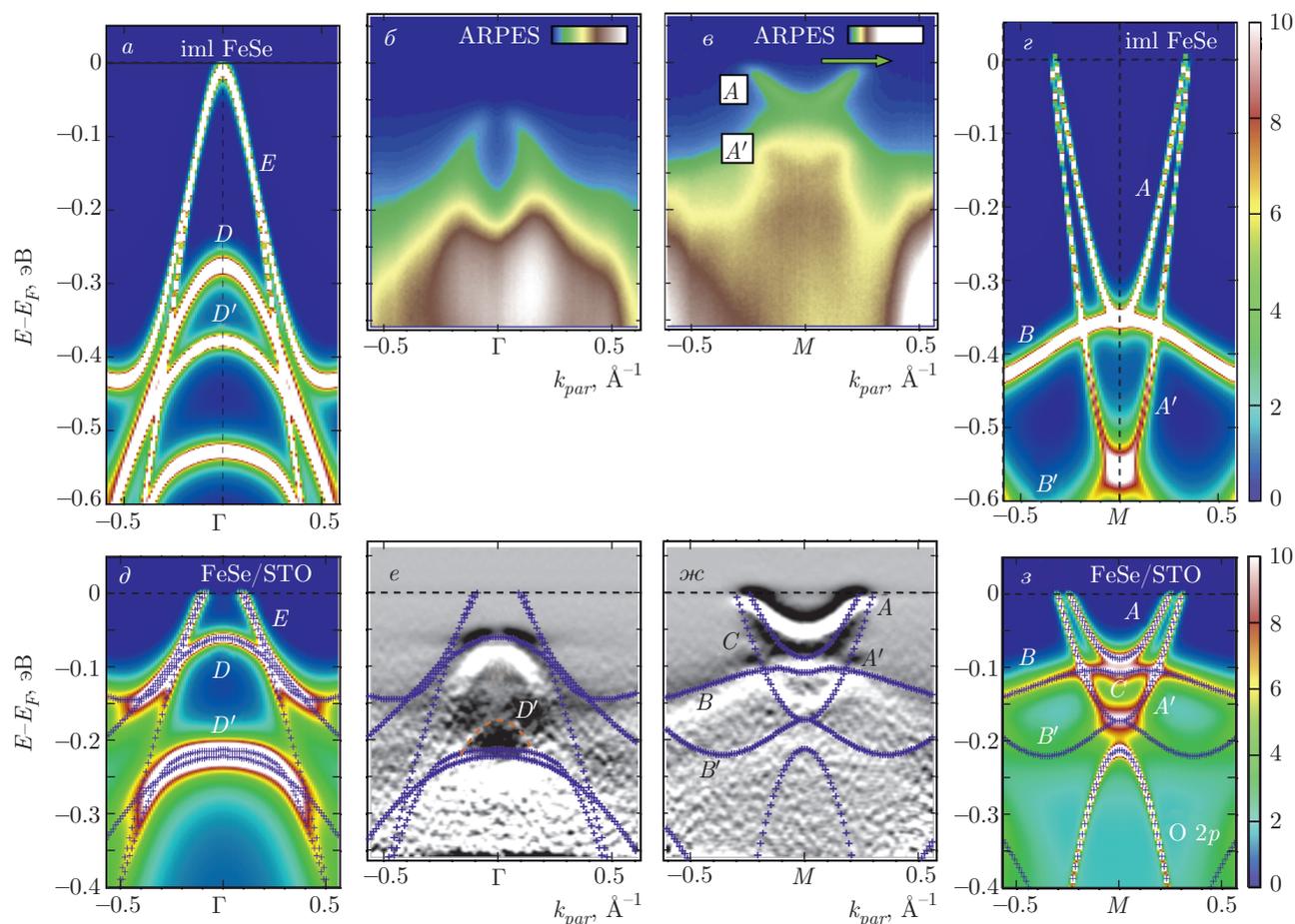
Однако есть еще одно довольно простое объяснение отсутствия дырочных цилиндров — наблюдаемые поверхности Ферми можно получить, предполагая, что система легирована электронами. Чтобы «избавиться» от дырочных цилиндров в точке  $\Gamma$ , уровень Ферми нужно сместить вверх по энергии на величину около 0.2–0.25 эВ, что соответствует уровню легирования 0.15–0.2 электрона на ион Fe (см. рис. 3).

Причина такого легирования, строго говоря, до конца еще не понята. Существует распространенное мнение, что оно связано с образованием кислородных вакансий в подложке SrTiO<sub>3</sub> (в верхнем слое TiO<sub>2</sub>), на различных технологических этапах, используемых при подготовке пленки, таких как отжиг, травление и т. д. Следует отметить, что образование электронного газа в интерфейсах SrTiO<sub>3</sub> является довольно широко известным явлением, которое долгое время изучалось [53]. В то же время, для системы FeSe/STO этот вопрос не был детально проанализирован и остается непроясненным (см., однако, недавние работы [54, 55]).

#### 4.2. Результаты LDA+DMFT-расчетов

Рассмотрим теперь подробно результаты наших LDA+DMFT-расчетов, дополняющие обсуждение, проведенное в работе [34].

На рис. 4 представлено сравнение LDA+DMFT-результатов (показаны на рис. 4*a,г,д,з*) с экспериментальными данными ARPES [56], показанными на рис. 4*б,в,е,ж*. Карты спектральных LDA+DMFT-функций изолированного монослоя FeSe при электронном легировании  $0.3e/\text{FeSe}$  показаны на рис. 4*а,г* соответственно в точках  $\Gamma$ ,  $M$ . Рассчитанные карты спектральных LDA+DMFT-функций для FeSe/STO при электронном легировании  $0.2e/\text{FeSe}$  показаны на рис. 4*д,з* в точках  $\Gamma$ ,  $M$ . Для непосредственного сравнения с экспериментальными данными на рис. 4*д,е,ж,з*



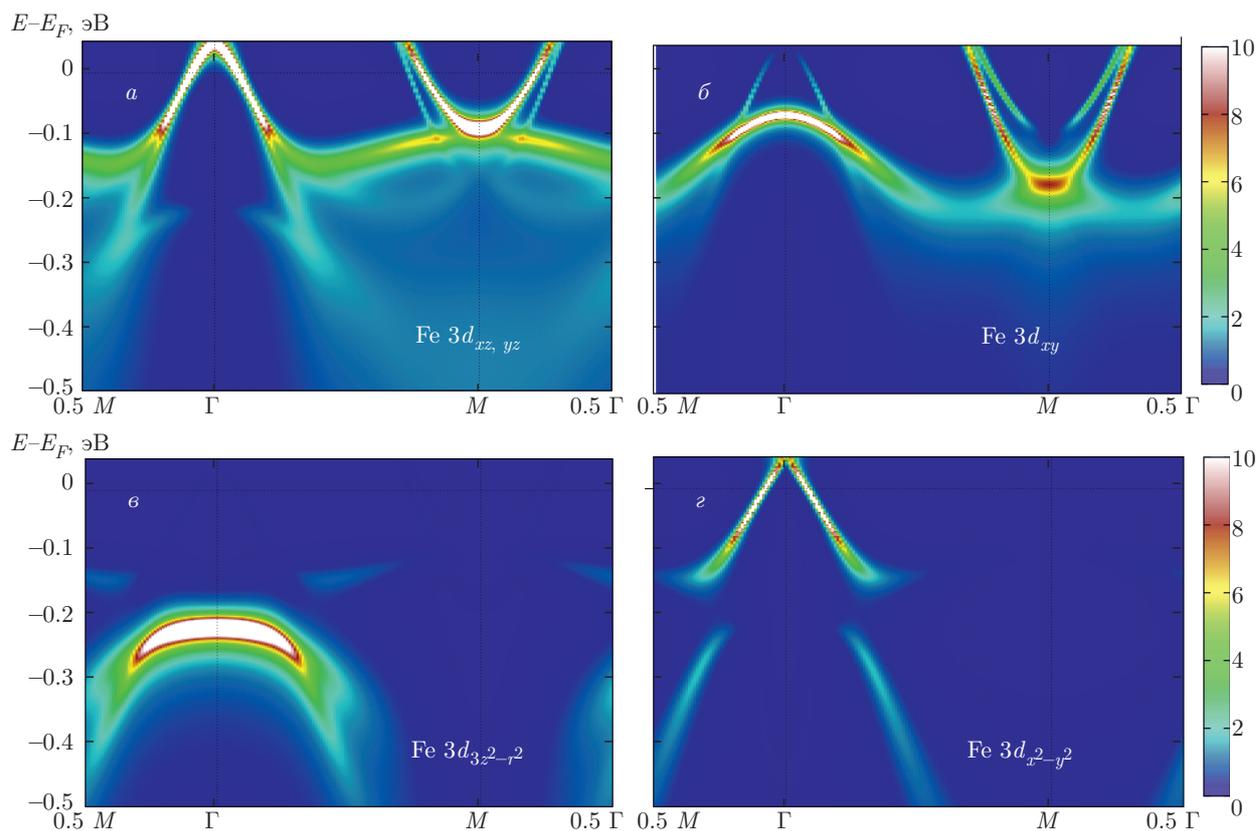
**Рис. 4.** *a, z* — Карты спектральных LDA+DMFT-функций для изолированного монослоя FeSe [34]; *б, в* — спектральные функции из ARPES-экспериментов в окрестности точек  $\Gamma$  и  $M$  в зоне Бриллюэна; *е, жс* — соответствующие вторые производные ARPES-данных для FeSe/STO [56], на которые наложены максимумы спектральных LDA+DMFT-функций (крестики); *д, з* — карты спектральных LDA+DMFT-функций [34] для FeSe/STO (крестиками обозначены максимумы спектральных функций). Для обозначения сходных элементов зонной структуры в экспериментальных и теоретических данных использованы буквы *A, B, C, D, E* аналогично рис. 3 для LDA-зон. Уровень Ферми соответствует нулевой энергии

максимумы теоретических спектральных функций (крестики) наложены на соответствующие ARPES-карты. Как говорилось ранее, полученная в LDA-расчетах ширина  $W$   $3d$ -зоны Fe в изолированном монослое FeSe составляет 5.2 эВ, что значительно превышает значение  $W = 4.3$  эВ, полученное для FeSe/STO. Это связано с увеличением постоянной решетки от  $a = 3.765 \text{ \AA}$  до  $a = 3.901 \text{ \AA}$  при переходе от изолированного монослоя FeSe к FeSe/STO (см. также рис. 2). Таким образом, для одной и той же силы электрон-электронного взаимодействия и близкого уровня легирования LDA+DMFT-расчеты демонстрируют существенно различное сужение квазичастичных зон из-за корреляционных эффектов. Соответственно, перенормировка квазичастичной массы в изолированном монослое FeSe

составила 1.5 (так же, как и в объемном FeSe) и 3 в системе FeSe/STO. Видно, что система FeSe/STO более коррелирована по сравнению с объемным FeSe или изолированным монослоем FeSe за счет увеличения величины отношения  $U/W$ .

Большинство особенностей, наблюдаемых в ARPES-экспериментах (рис. 4*е, жс*), можно усмотреть и в рассчитанных нами спектральных LDA+DMFT-функциях (рис. 4*д, з*). Экспериментальные квазичастичные зоны вокруг точки  $M$ , отмеченные как *A, B* и *C* (рис. 4*жс, з*), в основном сформированы  $3d_{xz}$ -,  $3d_{yz}$ -зонами Fe (рис. 5*а*), тогда как квазичастичные зоны *A'* и *B'* имеют преимущественно  $3d_{xy}$ -характер Fe (рис. 5*б*).

Квазичастичная зона *C* в FeSe/STO вблизи точки  $M$  возникла из-за снятия вырождения между



**Рис. 5.** Карты спектральных LDA+DMFT-функций для различных  $3d$ -орбиталей Fe монослоя FeSe на подложке SrTiO<sub>3</sub>: а) —  $3d_{xz}$ ,  $3d_{yz}$ -зоны Fe, б) —  $3d_{xy}$ -зона Fe, в) —  $3d_{3z^2-r^2}$ -зона Fe, г) —  $3d_{x^2-y^2}$ -зона Fe. Уровень Ферми соответствует нулевой энергии

$3d_{xz}$ -,  $3d_{yz}$ -зонами Fe (рис. 4з) в отличие от изолированного FeSe-слоя (рис. 4з). Происхождение этого расщепления зон напрямую связано с разностью высот  $z_{\text{Se}}$  ниже и выше плоскости ионов Fe из-за наличия интерфейса с подложкой SrTiO<sub>3</sub>.

Фактически, все квазичастичные зоны в окрестности точки  $M$  могут быть хорошо представлены как  $3d$ -зоны Fe, «сжатые» в 3 раза из-за электронных корреляций. Этот факт явно подтверждается зонной LDA-структурой, показанной на рис. 3, где разные зоны отмечены буквами, идентичными символам, используемым на рис. 4.

Вблизи точки  $M$  также наблюдается  $2p_y$ -зона O (в интервале энергий ниже  $-0.2$  эВ (рис. 4з)), принадлежащая верхнему слою TiO<sub>2</sub>, прилегающему к FeSe. Вследствие выбранного в LDA+DMFT легирования  $2p_y$ -зона O опускается ниже уровня Ферми, в отличие от LDA-расчета (см. рис. 3), где  $2p_y$ -зона O пересекает уровень Ферми и образует дырочный карман. Учет корреляционных взаимодействий исключает возможные эффекты нестинга с этими кислородными зонами, которые можно было бы ожи-

дать, исходя из LDA-результатов [37].

Появление зоны  $A'$  (и в некоторых работах  $B'$ ) в FeSe/STO обычно объясняется с рассеянием «вперед» на оптическом фононе с энергией 100 мэВ на подложке STO [56–60]. Ниже в разд. 5 будут даны некоторые оценки величины такого электрон-фононного взаимодействия, которое фактически оказывается экспоненциально малым для случая FeSe/STO, что делает этот сценарий формирования зоны «реплики» маловероятным. Наши LDA+DMFT-расчеты ясно показывают, что зона  $A'$  чисто электронной природы проявляется почти точно при энергиях наблюдаемой «реплики», без всякого взаимодействия с фононами. Квазичастичные массы (как указано в таблице) зон  $A$  и  $A'$  отличаются друг от друга не более чем на 10%. Если внимательно рассмотреть окрестность точки  $M$ , то формы зон  $A$  и  $A'$  практически совпадают с точностью, равной точности экспериментальных данных. Заметим, что одинаковые формы зон  $A$  и  $A'$  (или, что то же самое, одинаковые квазичастичные массы) являются основой феноменологического описа-

**Таблица.** Квазичастичные массы для FeSe/STO, полученные в LDA+DMFT-расчетах для различных величин модельных параметров  $U$ ,  $J$ ,  $n$  для орбиталей  $3d$ -оболочки Fe

$U = 5.0$ эВ, $J = 0.9$ эВ (пост.)	$d_{x^2-y^2}$	$d_{yz}$	$d_{3z^2-r^2}$	$d_{xz}$	$d_{xy}$
+0.1e/FeSe	2.47	4.25	2.36	4.04	4.32
+0.2e/FeSe	2.03	3.07	2.04	2.93	3.12
+0.3e/FeSe	1.84	2.42	1.83	2.33	2.47
+0.2e/FeSe, $J = 0.9$ эВ (пост.)					
$U = 4.0$ эВ	1.71	2.29	1.74	2.21	2.34
$U = 5.0$ эВ	2.03	3.07	2.04	2.93	3.12
$U = 6.0$ эВ	2.74	5.11	2.57	4.84	5.14
+0.2e/FeSe, $U = 5.0$ эВ (пост.)					
$J = 0.7$ эВ	1.49	1.73	1.56	1.69	1.75
$J = 0.8$ эВ	1.63	2.05	1.70	1.99	2.08
$J = 0.9$ эВ	2.03	3.07	2.04	2.93	3.12

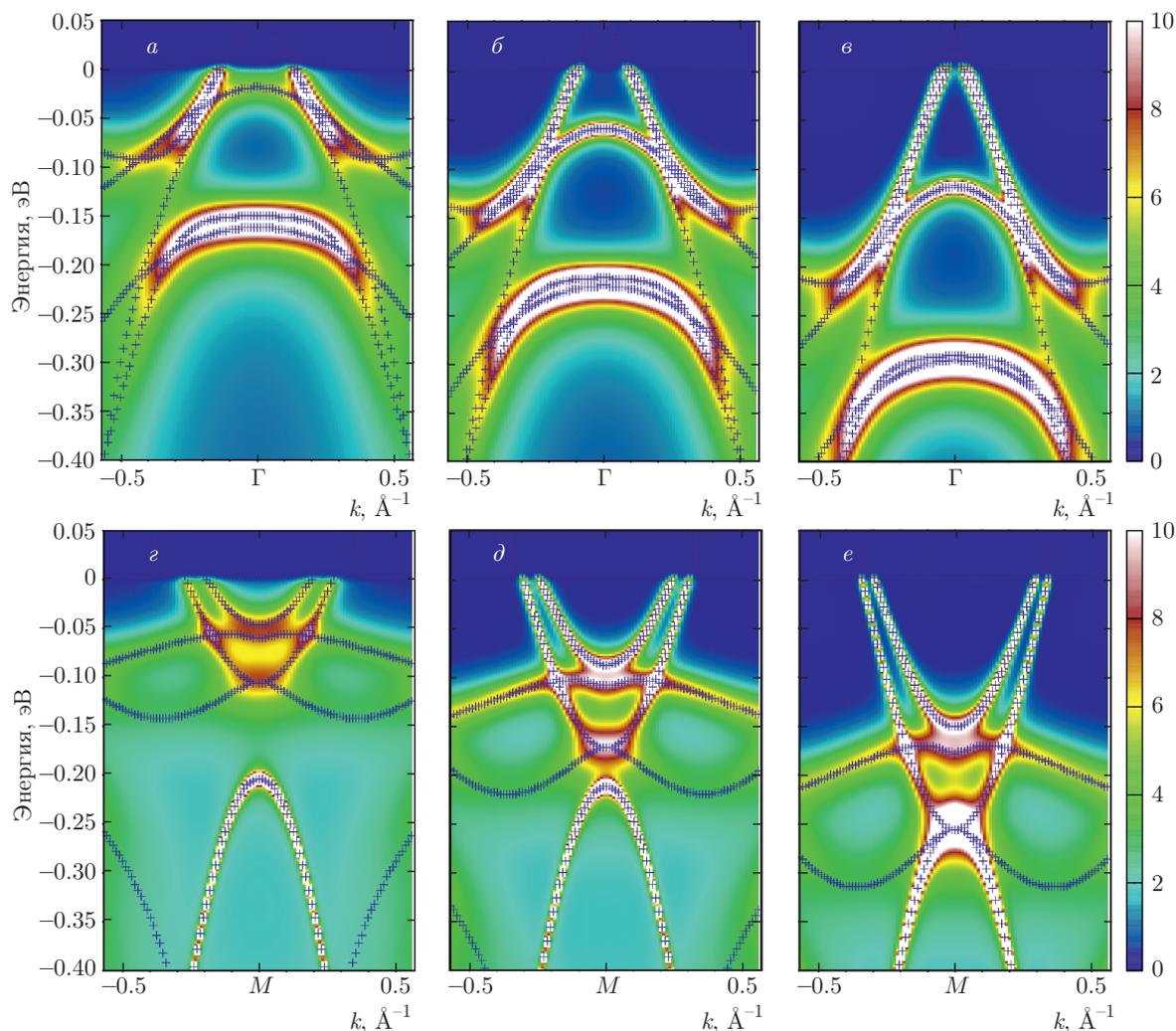
ния зоны «реплики» [56, 59]. Следует отметить, что зона  $B'$  хорошо видна в наших LDA+DMFT-результатах (рис. 4ж,з) также без введения какого-либо электрон-фононного взаимодействия. В отличие от случая  $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$  [34], в системе FeSe/STO зона  $A'$  хорошо видна в ARPES-экспериментах вблизи точки  $M$ , в то время как возле уровня Ферми эта зона сильно подавлена. Возможно, это может быть связано с эффектами матричных элементов, что обсуждалось в работах [61, 62], а также в работах [28, 61] применительно к соединению NaFeAs. Опять же, принимая во внимание результаты по системе  $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ , можно предположить, что полосы  $A'$  и  $B'$  являются общей особенностью материалов на основе FeSe чисто электронной природы и должны быть экспериментально наблюдаемы независимо от электрон-фононного сценария возникновения зон «реплик».

Таким образом, для системы FeSe/STO мы получили общее согласие между результатами LDA+DMFT-расчетов [34] (рис. 4з) и данными ARPES [56] (рис. 4ж) для относительных положений квазичастичных зон на полуколичественном уровне. Заметим, что поверхности Ферми, которые могут быть извлечены из наших LDA+DMFT-расчетов, образованные зонами  $A$  и  $A'$ , почти такие же, как поверхности Ферми, наблюдаемые в точке  $M$  в ARPES.

Обсудим теперь зоны вокруг точки  $\Gamma$ , которые показаны на рис. 4а,б,д,е. Ситуация тут намного проще, чем в случае окрестности точки  $M$ . Здесь можно увидеть только две зоны, наблюдаемые в эксперименте (рис. 4е). Квазичастичная зона  $D$  имеет преимущественно  $3d_{xy}$ -характер Fe (см. рис. 5а), а квазичастичная зона  $D'$  образована из  $3d_{3z^2-r^2}$ -зоны Fe (см. рис. 5б). Относительные положения квазичастичных зон  $D$  и  $D'$  по энергии, рассчитанные из LDA+DMFT, очень схожи с ARPES-данными.

Основное несоответствие LDA+DMFT-результатов и ARPES-данных связано с квазичастичной зоной  $E$ , показанной на рис. 4д, которая не наблюдается в ARPES-эксперименте. Это гибридная зона, состоящая из  $3d_{xz}$ -,  $3d_{yz}$ -,  $3d_{xy}$ -состояний Fe (см. рис. 5). В принципе, некоторые проявления данной зоны можно усмотреть в экспериментальных данных рис. 4е около энергии  $-0.17$  эВ вблизи  $\mathbf{k} = 0.5 \text{ \AA}^{-1}$ . Удивительно, но это обстоятельство упущено в обсуждении в работе [56]. Фактически, сигнал ARPES от зоны  $E$  может быть ослаблен из-за вклада  $3d_{xy}$ -зоны Fe [28, 61, 62] и, следовательно, может быть экспериментально неотличим от сигнала зоны  $D$ .

В попытке достичь лучшего согласия с экспериментом, с учетом всего сказанного выше, мы провели LDA+DMFT-расчеты спектров FeSe/STO для более сильного кулоновского взаимодействия при различных уровнях легирования. На рис. 6 представлена зависимость спектральной

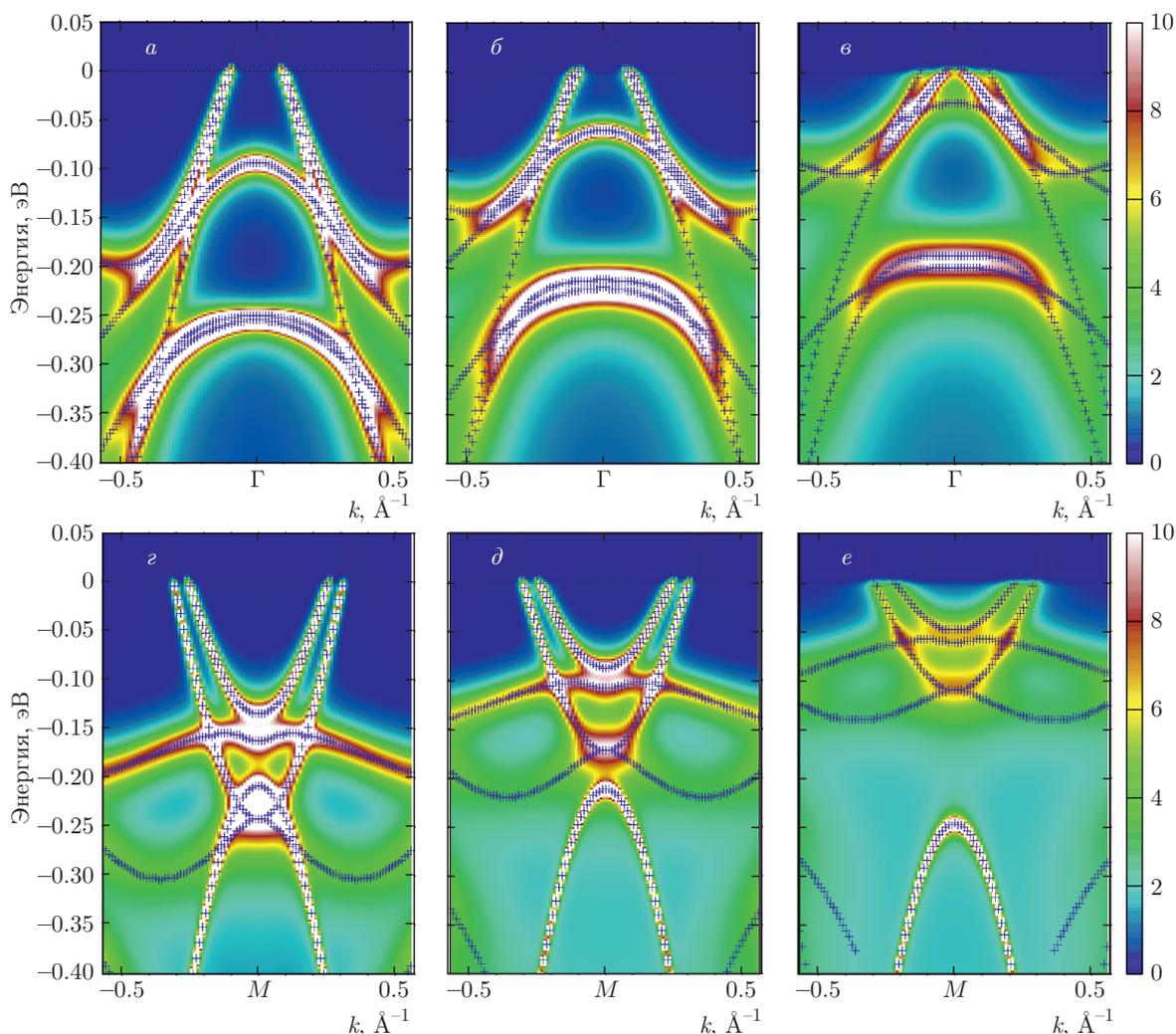


**Рис. 6.** Карты спектральных LDA+DMFT-функций для FeSe/STO при различных уровнях электронного легирования (на ион Fe) (+0.1e, +0.2e, +0.3e, слева направо) для  $U = 5.0$  эВ и  $J = 0.9$  эВ вблизи точек  $\Gamma$  (верхний ряд) и точек  $M$  (нижний ряд). Уровень Ферми соответствует нулевой энергии

LDA+DMFT-функции монослоя FeSe на подложке SrTiO<sub>3</sub> (FeSe/STO) от легирования при  $U = 5$  эВ и  $J = 0.9$  эВ. Были рассмотрены три уровня легирования: +0.1, +0.2 и +0.3 электрона на ион Fe. В общем случае такое электронное легирование приводит к более или менее жесткому сдвигу зон. Однако с ростом электронного легирования сила корреляционных эффектов уменьшается, как следует из верхней части таблицы. В особенности отметим, что корреляции становятся почти в два раза слабее для  $t_{2g}$ -орбиталей. Это довольно хорошо известное поведение для сверхпроводников на основе железа [63]. Здесь следует отметить, что уровень легирования +0.3e почти приводит к исчезновению поверхности Ферми в точке  $\Gamma$  (см. верхний ряд справа на рис. 6), что соответствует картине,

наблюдающейся в ARPES-эксперименте. Однако при этом легировании общее согласие между спектральными LDA+DMFT- и ARPES-функциями намного хуже, чем в случае допирования +0.2e, о котором говорилось выше.

На рис. 7 показана зависимость спектральных LDA+DMFT-функций от величины кулоновского взаимодействия ( $U = 4.0, 5.0, 6.0$  эВ) для FeSe/STO. Как и следовало ожидать, увеличение  $U$  приводит к усилению корреляционных эффектов (см. середину таблицы). Увеличение  $U$  приводит к более или менее равномерному сжатию зон. Наилучшее согласие теории с обнаруженными в ARPES квазичастичными зонами достигается для  $U = 5$  эВ. Таким образом, видно, что увеличение  $U$  не приводит к исчезновению дырочной поверхности Ферми вблизи точки  $\Gamma$ .



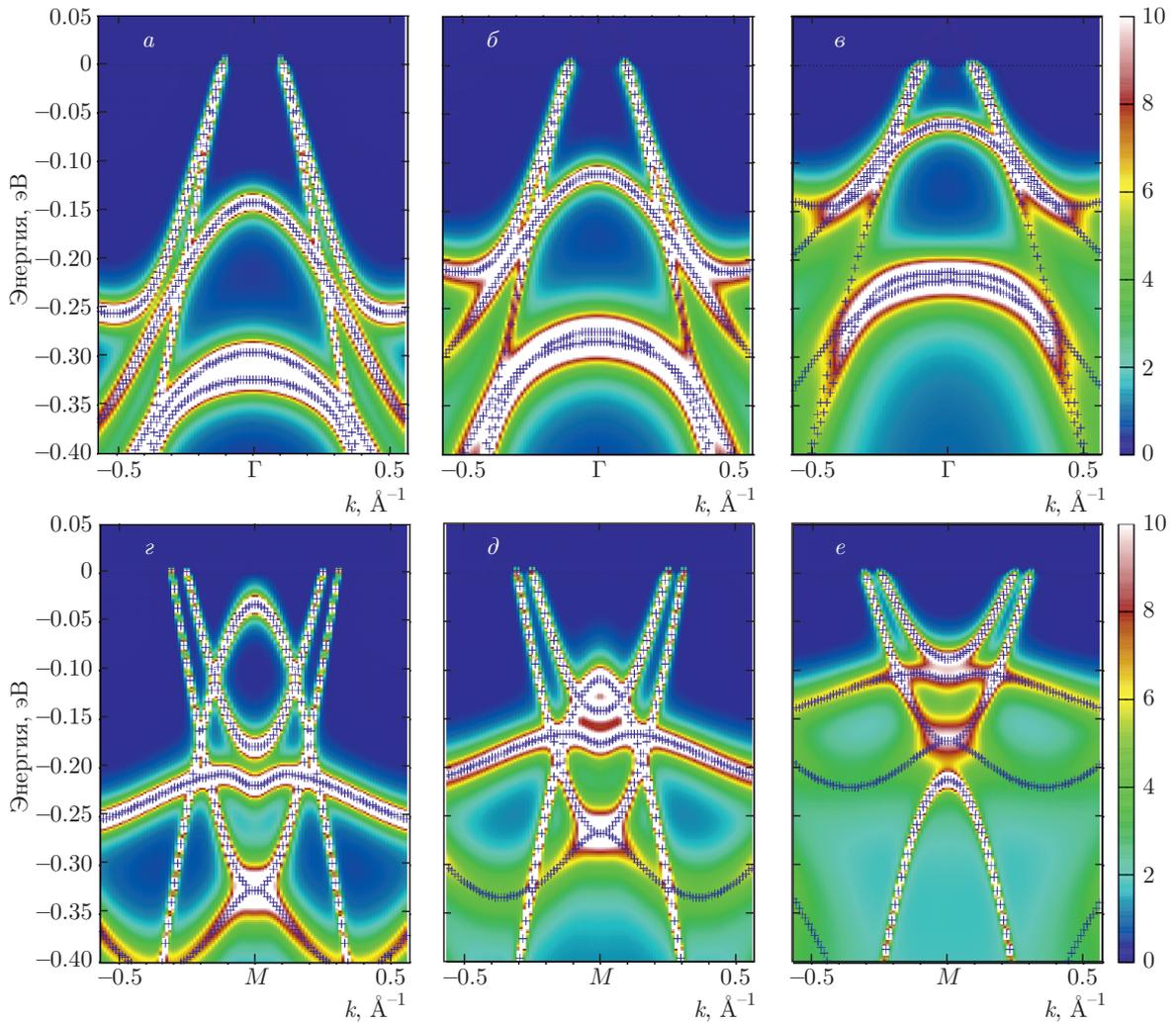
**Рис. 7.** Карты спектральных LDA+DMFT-функций для FeSe/STO для различных величин кулоновского взаимодействия  $U$  (4, 5, 6 эВ, слева направо) для  $n = +0.2e$  и  $J = 0.9$  эВ вблизи точек  $\Gamma$  (верхний ряд) и точек  $M$  (нижний ряд). Уровень Ферми соответствует нулевой энергии

Возможно, самое сильное влияние на спектр FeSe/STO может быть достигнуто изменением величины обменного взаимодействия Хунда  $J$ . В некотором смысле это ожидалось с самого начала, поскольку сверхпроводники на основе железа, по общему мнению, — это так называемые «хундовские металлы» [64]. На рис. 8 показан вид спектральной LDA+DMFT-функции для  $J = 0.7, 0.8, 0.9$  эВ. В случае роста  $J$  корреляционное сжатие квазичастичных зон более очевидно по сравнению со случаем увеличения  $U$  (рис. 8). Величина квазичастичной перенормировки массы изменяется примерно в два раза с увеличением  $J$  от 0.7 до 0.9 эВ (см. таблицу внизу).

В итоге можно сказать, что довольно умеренное изменение параметров модели для системы FeSe/STO может привести к значительному изменению ее электронной структуры, так что экспериментально наблюдаемый спектр определяется в результате довольно тонкой взаимной настройки этих параметров.

### 5. ЗОНА «РЕПЛИКА» И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С ОПТИЧЕСКИМИ ФОНОНАМИ В FeSe/STO

Как упоминалось ранее, наиболее популярное объяснение появления зоны «реплики» вокруг точки  $M$  в FeSe/STO связано с учетом взаимодействия



**Рис. 8.** Карты спектральных LDA+DMFT-функций для FeSe/STO для различных величин обменного кулоновского взаимодействия  $J$  (0.7, 0.8, 0.9 эВ, слева направо) для  $n = +0.2e$  и  $U = 5$  эВ вблизи точек  $\Gamma$  (верхний ряд) и точек  $M$  (нижний ряд). Уровень Ферми соответствует нулевой энергии

электронов FeSe с оптическим фоном подложки STO с энергией около 100 мэВ. Эта идея была предложена в работе [56], где зона «реплика» была впервые обнаружена экспериментально. В этой работе (еще см. [65]) также было показано, что из-за особой природы данного электрон-фононного взаимодействия на интерфейсе FeSe и STO соответствующая константа связи экспоненциальна по величине передаваемого импульса и может быть записана как

$$g(\mathbf{q}) = g_0 \exp(-|\mathbf{q}|/q_0), \quad (1)$$

где типичное значение величины  $q_0 \sim 0.1\pi/a \ll p_F$  ( $a$  — постоянная решетки, а  $p_F$  — импульс Ферми), что приводит к рассеянию электронов на оптических фоновых почти «вперед». Эта картина получила дальнейшее развитие в модельном подходе

[59, 60], где было показано, что такое взаимодействие может привести к значительному увеличению температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  в соответствии с более ранними идеями, разработанными Долговым и Куличем [66, 67] (см. также обзор в работе [25]). Однако существенный эффект здесь может быть достигнут только для случая достаточно большой эффективной константы связи электронов с такими рассеивающими «вперед» фоновыми.

Стандартная безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия теории Элиашберга для случая оптического (эйнштейновского) фоновых на интерфейсе FeSe/STO может быть записана следующим образом [68] ( $N$  — количество узлов решетки):

$$\lambda = \frac{2}{N\Omega_0} \times \frac{\sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} |g(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon(\mathbf{p}) - \mu) \delta(\epsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - \mu - \Omega_0)}{\sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon(\mathbf{p}) - \mu)}, \quad (2)$$

где мы явно ввели частоту (оптического) фонона  $\Omega_0$  в  $\delta$ -функцию, которой обычно пренебрегают в адиабатическом приближении. В системе FeSe/STO у нас фактически  $\Omega_0 > E_F$ , так что очевидно, что в данном случае конечность этой частоты должна учитываться.

Для простых оценок предположим линеаризованный характер спектра электронов ( $v_F$  — скорость Ферми):  $\xi_p \equiv \epsilon(\mathbf{p}) - \mu \approx v_F(|\mathbf{p}| - p_F)$ , что позволяет провести все вычисления явно в аналитическом виде. Теперь, подставляя выражение (1) в формулу (2) для двумерного случая, можно записать

$$\lambda = \frac{2}{\Omega_0} g_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \delta(\xi_p) \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \exp\left(-\frac{2q}{q_0}\right) \times \\ \times \delta(\xi_p - \Omega_0 + v_F q \cos \phi) = \frac{2g_0^2}{\Omega_0} \frac{a^2}{4\pi^2} \times \\ \times \int_0^{\infty} dq q \exp\left(-\frac{2q}{q_0}\right) \int_0^{2\pi} d\phi \delta(v_F q \cos \phi - \Omega_0). \quad (3)$$

Тогда после вычисления всех необходимых интегралов получим

$$\lambda = \frac{g_0^2 a^2}{\pi^2 v_F^2} K_1\left(\frac{2\Omega_0}{v_F q_0}\right), \quad (4)$$

где  $K_1(x)$  — функция Бесселя от чисто мнимого аргумента (функция Макдональда). Применяя хорошо известную асимптотику  $K_1(x)$  и отбрасывая ряд несущественных констант, получим

$$\lambda \sim \lambda_0 \frac{q_0}{4\pi p_F} \quad (5)$$

при  $\Omega_0/v_F q_0 \ll 1$  и

$$\lambda \sim \lambda_0 \frac{\Omega_0}{\pi \varepsilon_F} \sqrt{\frac{v_F q_0}{\Omega_0}} \exp\left(-\frac{2\Omega_0}{v_F q_0}\right) \quad (6)$$

при  $\Omega_0/v_F q_0 \gg 1$ . Здесь мы ввели стандартную безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия

$$\lambda_0 = \frac{2g_0^2}{\Omega_0} N(0), \quad (7)$$

где  $N(0)$  — плотность электронных состояний на уровне Ферми на одну проекцию спина.

Теперь становится очевидным, что константа спаривания экспоненциально подавлена при  $\Omega_0/v_F q_0 > 1$ , что типично для интерфейса FeSe/STO, где  $\Omega_0 > E_F \gg v_F q_0$  [25], что делает появление зоны «реплики» и увеличение  $T_c$  благодаря взаимодействию электронов FeSe с оптически-ми фононами STO весьма маловероятным. Аналогичные выводы были сделаны из расчетов *ab initio* в работе [69], а также из анализа экранирования электрон-фононного взаимодействия на интерфейсе FeSe/STO в работе [70].

Выше было показано, что LDA+DMFT-расчеты для системы FeSe/STO дают совершенно иное объяснение происхождения зоны «реплики», не связанное с электрон-фононным взаимодействием.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты наших обширных LDA+DMFT-расчетов для монослоя FeSe на подложке STO говорят в пользу сценария формирования загадочных мелких зон в точке  $M$  из-за корреляционных эффектов в  $3d$ -состояниях Fe. Детальный анализ наблюдаемых в ARPES-экспериментах квазичастичных зон и результатов LDA+DMFT-расчетов показывает, что ближайшая к уровню Ферми мелкая зона (около энергии 50 мэВ) образуется вырожденными  $3d_{xz^-}$ ,  $3d_{yz}$ -зонами Fe, перенормированными за счет корреляционных эффектов. Более того, вторая мелкая зона (около энергии 150 мэВ) может быть хорошо объяснена просто как перенормированная корреляциями  $3d_{xy}$ -зона Fe. Данная зона располагается практически при тех же энергиях, что и так называемая зона «реплика», наблюдаемая в ARPES-экспериментах на FeSe/STO, которая обычно приписывается взаимодействию электронов с оптическими фононами STO. Влияние подложки STO сводится только к снятию вырождения  $3d_{xz^-}$ ,  $3d_{yz}$ -зон Fe в окрестности точки  $M$ . Таким образом, можно заключить, что такая довольно необычная зонная структура вблизи уровня Ферми с несколькими электронными мелкими зонами является общей особенностью монослоев FeSe и, возможно, может быть полностью разрешена в будущих ARPES-экспериментах.

Наши оценки величины взаимодействия электронов с оптическим фононом показывают, что она экспоненциально мала для значений параметров, характерных для FeSe/STO, так что общепринятая на данный момент интерпретация природы зоны «реплики» как следствия этого взаимодействия представляется довольно нереалистичной.

По-видимому, корреляционные эффекты не могут полностью подавить дырочную поверхность Ферми в точке Г, которая не наблюдается в большинстве ARPES-экспериментов в системе FeSe/STO. В то же время для большинства зон, близких к точке Г, полученных в LDA+DMFT-расчетах, согласие с ARPES-экспериментами достаточно хорошее.

Было также показано, что увеличение электронного легирования и/или величины кулоновского взаимодействия не улучшает общего согласия LDA+DMFT-расчетов с данными ARPES.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФАНО в рамках госконтракта № 0389-2014-0001, при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 17-02-00015) и в рамках программы Президиума РАН «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости». Работа Н. С. П. также поддержана грантом Президента России для молодых ученых МК-5957.2016.2. Расчеты, проведенные методом СТ-QMC, были выполнены на суперкомпьютере «УРАН» Института математики и механики УрО РАН.

## ЛИТЕРАТУРА

1. М. В. Садовский, УФН **178**, 1243 (2008).
2. К. Ishida, Y. Nakai, and H. Hosono, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 062001 (2009).
3. D. C. Johnston, Adv. Phys. **59**, 803 (2010).
4. P. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, and I. I. Mazin, Rep. Progr. Phys. **74**, 124508 (2011).
5. G. R. Stewart, Rev. Mod. Phys. **83**, 1589 (2011).
6. А. А. Кордюк, Физика низких температур **38**, 1119 (2012).
7. Y. Mizuguchi and Y. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 102001 (2010).
8. M. Sadovskii, E. Kuchinskii and I. Nekrasov, J. Magn. Mater. **324**, 3481 (2012).
9. И. А. Некрасов, М. В. Садовский, Письма в ЖЭТФ **99**, 687 (2014).
10. J. Guo, S. Jin, G. Wang, S. Wang, K. Zhu, T. Zhou, M. He, and X. Chen, Phys. Rev. B **82**, 180520 (2010).
11. Y. J. Yan, M. Zhang, A. F. Wang, J. J. Ying, Z. Y. Li, W. Qin, X. G. Luo, J. Q. Li, J. P. Hu, and X. H. Chen, Sci. Rep. **2** (2012), 10.1038/srep00212.
12. A. Krzton-Maziopa, V. Svitlyk, E. Pomjakushina, R. Puzniak, and K. Conder, J. Phys.: Condens. Matter. **28**, 293002 (2016).
13. T. Hatakeda, T. Noji, T. Kawamata, M. Kato, and Y. Koike, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 123705 (2013).
14. M. Burrard-Lucas, D. G. Free, S. J. Sedlmaier, J. D. Wright, S. J. Cassidy, Y. Hara, A. J. Corkett, T. Lancaster, P. J. Baker, S. J. Blundell, and S. J. Clarke, Nature Mater. **12**, 15 (2013).
15. X. F. Lu, N. Z. Wang, H. Wu, Y. P. Wu, D. Zhao, X. Z. Zeng, X. G. Luo, T. Wu, W. Bao, G. H. Zhang, F. Q. Huang, Q. Z. Huang, and X. H. Chen, Nature Mater. **14**, 325 (2014).
16. U. Pachmayr, F. Nitsche, H. Luetkens, S. Kamusella, F. Brückner, R. Sarkar, H.-H. Klauss, and D. Johrendt, Angewandte Chemie International Edition **54**, 293 (2015).
17. Q.-Y. Wang, Z. Li, W.-H. Zhang, Z.-C. Zhang, J.-S. Zhang, W. Li, H. Ding, Y.-B. Ou, P. Deng, K. Chang, J. Wen, C.-L. Song, K. He, J.-F. Jia, S.-H. Ji, Y.-Y. Wang, L.-L. Wang, X. Chen, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, Chinese Phys. Lett. **29**, 037402 (2012).
18. J.-F. Ge, Z.-L. Liu, C. Liu, C.-L. Gao, D. Qian, Q.-K. Xue, Y. Liu, and J.-F. Jia, Nature Mater. **14**, 285 (2014).
19. Y. Miyata, K. Nakayama, K. Sugawara, T. Sato, and T. Takahashi, Nature Mater. **14**, 775 (2015).
20. G. Zhou, D. Zhang, C. Liu, C. Tang, X. Wang, Z. Li, C. Song, S. Ji, K. He, L. Wang, X. Ma, and Q.-K. Xue, Appl. Phys. Lett. **108**, 202603 (2016).
21. R. Peng, H. C. Xu, S. Y. Tan, H. Y. Cao, M. Xia, X. P. Shen, Z. C. Huang, C. Wen, Q. Song, T. Zhang, B. P. Xie, X. G. Gong, and D. L. Feng, Nature Comm. **5**, 5044 (2014).
22. H. Ding, Y.-F. Lv, K. Zhao, W.-L. Wang, L. Wang, C.-L. Song, X. Chen, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, Phys. Rev. Lett. **117**, 067001 (2016).
23. C.-L. Song, Y.-L. Wang, Y.-P. Jiang, Z. Li, L. Wang, K. He, X. Chen, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, Phys. Rev. B **84** (2011), 10.1103/PhysRevB.84.020503.
24. X. Liu, L. Zhao, S. He, J. He, D. Liu, D. Mou, B. Shen, Y. Hu, J. Huang, and X. J. Zhou, J. Phys.: Condens. Matter. **27**, 183201 (2015).
25. М. В. Садовский, УФН **186**, 1035 (2016).
26. К. З. Кучинский и М. В. Садовский, Письма в ЖЭТФ **91**, 729 (2010).

27. S. L. Skornyakov, A. V. Efremov, N. A. Skorikov, M. A. Korotin, Y. A. Izyumov, V. I. Anisimov, A. V. Kozhevnikov, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **80** (2009), 10.1103/PhysRevB.80.092501.
28. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 30 (2015).
29. I. A. Nekrasov and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 181 (2011).
30. I. R. Shein and A. L. Ivanovskii, *Phys. Lett. A* **375**, 1028 (2011).
31. L. Zhao, D. Mou, S. Liu, X. Jia, J. He, Y. Peng, L. Yu, X. Liu, G. Liu, S. He, X. Dong, J. Zhang, J. B. He, D. M. Wang, G. F. Chen, J. G. Guo, X. L. Chen, X. Wang, Q. Peng, Z. Wang, S. Zhang, F. Yang, Z. Xu, C. Chen, and X. J. Zhou, *Phys. Rev. B* **83** (2011), 10.1103/PhysRevB.83.140508.
32. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **97**, 18 (2013).
33. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **144**, 1061 (2013).
34. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 354 (2017).
35. 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** (2013), 10.1103/PhysRevLett.110.067003.
36. X. H. Niu, S. D. Chen, J. Jiang, Z. R. Ye, T. L. Yu, D. F. Xu, M. Xu, Y. Feng, Y. J. Yan, B. P. Xie, J. Zhao, D. C. Gu, L. L. Sun, Q. Mao, H. Wang, M. Fang, C. J. Zhang, J. P. Hu, Z. Sun, and D. L. Feng, *Phys. Rev. B* **93** (2016), 10.1103/PhysRevB.93.054516.
37. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, M. V. Sadovskii, and A. A. Slobodchikov, *Физика низких температур* **42**, 1137 (2016).
38. A. Subedi, L. Zhang, D. J. Singh, and M. H. Du, *Phys. Rev. B* **78** (2008), 10.1103/PhysRevB.78.134514.
39. F. Zheng, Z. Wang, W. Kang, and P. Zhang, *Sci. Rep.* **3**, 2213 (2013).
40. P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, *An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, Vienna University of Technology, Institute of Materials Chemistry, Getreidemarkt 9/165-TC, A-1060 Vienna, Austria 2016; WIEN2k 16.1 (Release 12/12/2016) ISBN 3-9501031-1-2.
41. J. Kuneš, R. Arita, P. Wissgott, A. Toschi, H. Ikeda, and K. Held, *Comp. Phys. Comm.* **181**, 1888 (2010).
42. A. A. Mostofi, J. R. Yates, Y.-S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt, and N. Marzari, *Comp. Phys. Comm.* **178**, 685 (2008).
43. P. Werner, A. Comanac, L. de'Medici, M. Troyer, and A. J. Millis, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 076405 (2006).
44. K. Haule, *Phys. Rev. B* **75**, 155113 (2007).
45. E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349 (2011).
46. O. Parcollet, M. Ferrero, T. Ayril, H. Hafermann, I. Krivenko, L. Messio, and P. Seth, *Comp. Phys. Comm.* **196**, 398 (2015), [http://ipht.cea.fr/triqs].
47. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **143**, 713 (2013).
48. H. J. Vidberg and J. W. Serene, *J. Low Temp. Phys.* **29**, 179 (1977).
49. M. Jarrell and J. Gubernatis, *Phys. Rep.* **269**, 133 (1996).
50. D. Liu, W. Zhang, D. Mou, J. He, Y.-B. Ou, Q.-Y. Wang, Z. Li, L. Wang, L. Zhao, S. He, Y. Peng, X. Liu, C. Chen, L. Yu, G. Liu, X. Dong, J. Zhang, C. Chen, Z. Xu, J. Hu, X. Chen, X. Ma, Q. Xue, and X. Zhou, *Nature Comm.* **3**, 931 (2012).
51. J. J. Lee, F. T. Schmitt, R. G. Moore, S. Johnston, Y.-T. Cui, W. Li, M. Yi, Z. K. Liu, M. Hashimoto, Y. Zhang, D. H. Lu, T. P. Devereaux, D.-H. Lee, and Z.-X. Shen, *Nature* **515**, 245 (2014).
52. L. Zhao, A. Liang, D. Yuan, Y. Hu, D. Liu, J. Huang, S. He, B. Shen, Y. Xu, X. Liu, L. Yu, G. Liu, H. Zhou, Y. Huang, X. Dong, F. Zhou, K. Liu, Z. Lu, Z. Zhao, C. Chen, Z. Xu, and X. J. Zhou, *Nature Comm.* **7**, 10608 (2016).
53. H. Fu, K. V. Reich, and B. I. Shklovskii, *ЖЭТФ* **149**, 530 (2016).
54. Y. Zhou and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **93**, 224506 (2016).
55. M. X. Chen, Z. Ge, Y. Y. Li, D. F. Agterberg, L. Li, and M. Weinert, *Phys. Rev. B* **94**, 245139 (2016).
56. J. J. Lee, F. T. Schmitt, R. G. Moore, S. Johnston, Y.-T. Cui, W. Li, M. Yi, Z. K. Liu, M. Hashimoto, Y. Zhang, D. H. Lu, T. P. Devereaux, D.-H. Lee, and Z.-X. Shen, *Nature* **515**, 245 (2014).
57. L. P. Gor'kov, *Phys. Rev. B* **93**, 060507 (2016).
58. L. P. Gor'kov, *Phys. Rev. B* **93**, 054517 (2016).

59. L. Rademaker, Y. Wang, T. Berlijn, and S. Johnston, *New J. Phys.* **18**, 022001 (2016).
60. Y. Wang, K. Nakatsukasa, L. Rademaker, T. Berlijn, and S. Johnston, *Supercond. Sci. Technol.* **29**, 054009 (2016).
61. M. Sunagawa, K. Terashima, T. Hamada, H. Fujiwara, T. Fukura, A. Takeda, M. Tanaka, H. Takeya, Y. Takano, M. Arita, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, K. Suzuki, H. Usui, K. Kuroki, T. Wakita, Y. Muraoka, and T. Yokoya, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 073704 (2016).
62. M. D. Watson, T. K. Kim, A. A. Haghighirad, N. R. Davies, A. McCollam, A. Narayanan, S. F. Blake, Y. L. Chen, S. Ghannadzadeh, A. J. Schofield, M. Hoesch, C. Meingast, T. Wolf, and A. I. Coldea, *Phys. Rev. B* **91**, 155106 (2015).
63. L. de'Medici, G. Giovannetti, and M. Capone, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 177001 (2014).
64. Z. P. Yin, K. Haule, and G. Kotliar, *Nature Mater.* **10**, 932 (2011).
65. M. L. Kulić and O. V. Dolgov, *New J. Phys.* **19**, 013020 (2017).
66. O. V. Danylenko, O. V. Dolgov, M. L. Kulić, and V. Oudovenko, *Eur. Phys. J. B* **9**, 201 (1999).
67. M. L. Kulić, *AIP Conf. Proc.* **715**, 75 (2004).
68. P. B. Allen, *Phys. Rev. B* **6**, 2577 (1972).
69. Y. Wang, A. Linscheid, T. Berlijn, and S. Johnston, *Phys. Rev. B* **93**, 134513 (2016).
70. Y. Zhou and A. J. Millis, arXiv:1703.04021 (2017).