

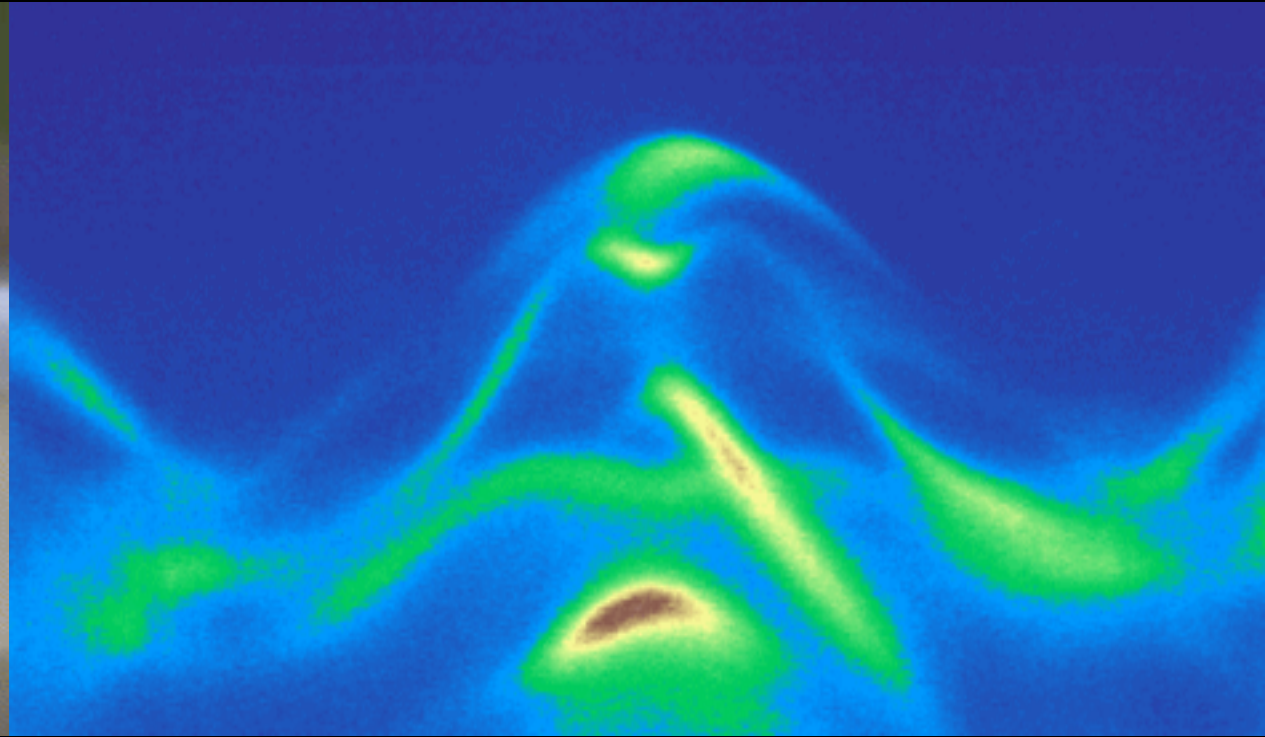
Курс: [Електронна структура та властивості низькорозмірних систем](#)

Лектор: Олександр Кордюк

### Лекції 10, 11: Загадка високотемпературної надпровідності

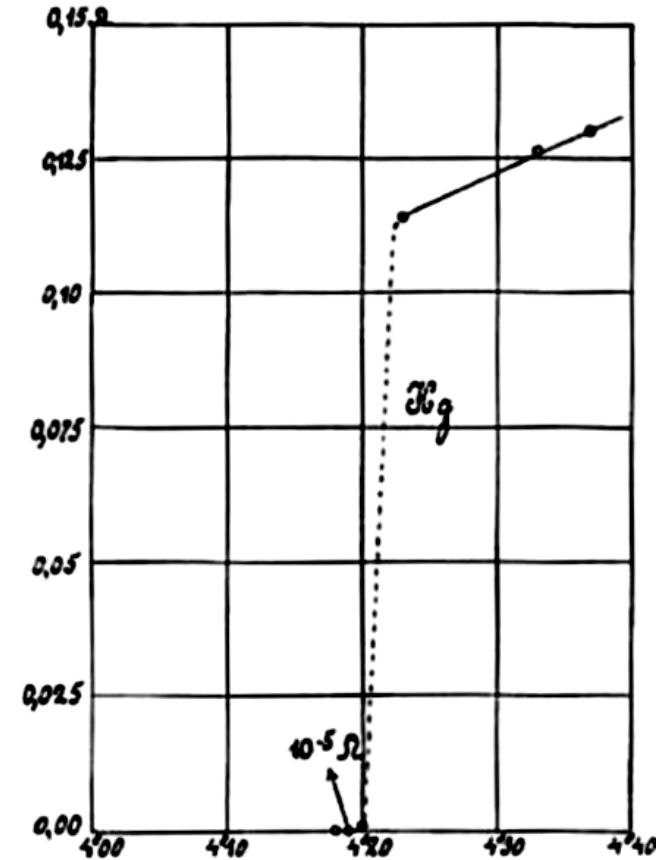
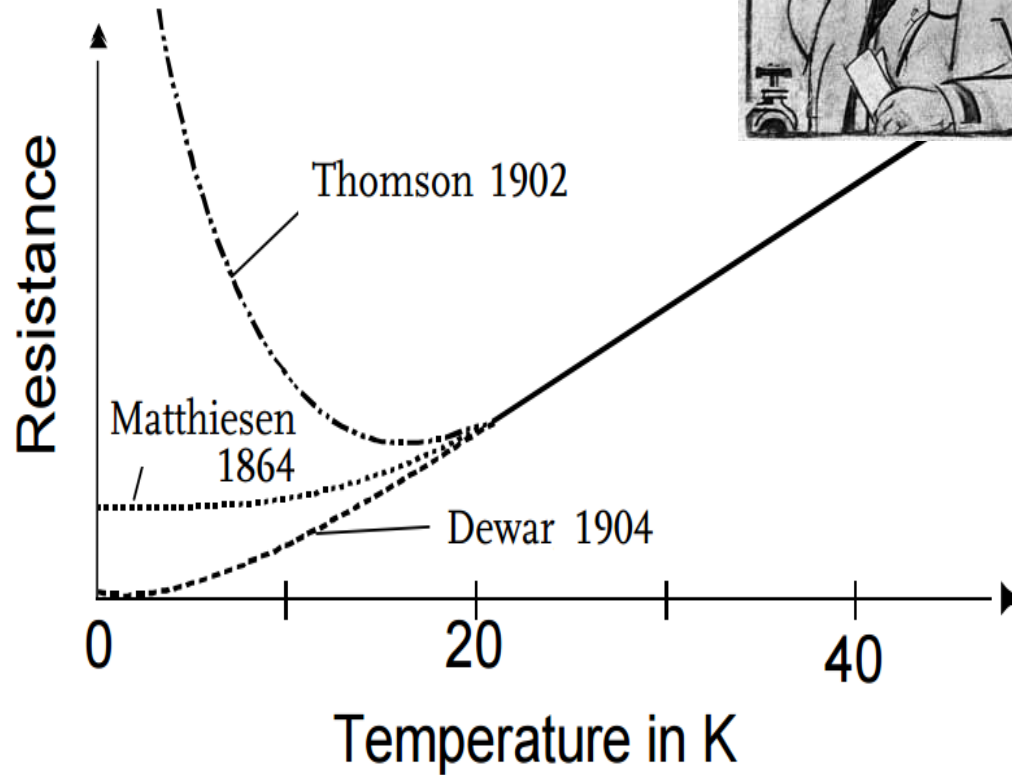
- Історія відкриття надпровідності. Чому ртуть?
- Антикореляція провідності та надпровідності.
- Мікроскопічна теорія (БКШ). Надпровідна щілина.
- "Відбитки" фононного спектру.
- Відкриття ВТНП та їх кристалічна структура.
- Електронна фазова діаграма ВТНП та псевдощілина.
- Особливості електронної структури купратів: нод та антинод.
- d-симетрія надпровідної щілини як проблема для рішення рівняння Еліашберга.
- Спарювання спіновими флуктуаціями.
- Надпровідники на основі заліза: кристалічна структура та фазові діаграми.
- Складна електронна структура як ключ до пошуку механізму ВТНП.
- Аналогія з купратами та шляхи підвищення критичної температури.

# High-Tc Superconductivity and Electronic Structure



# The history of superconductivity: the beginning

## 1911



Hg,  $T_c = 4.2\text{K}$

Why mercury?

# Superconducting Elements

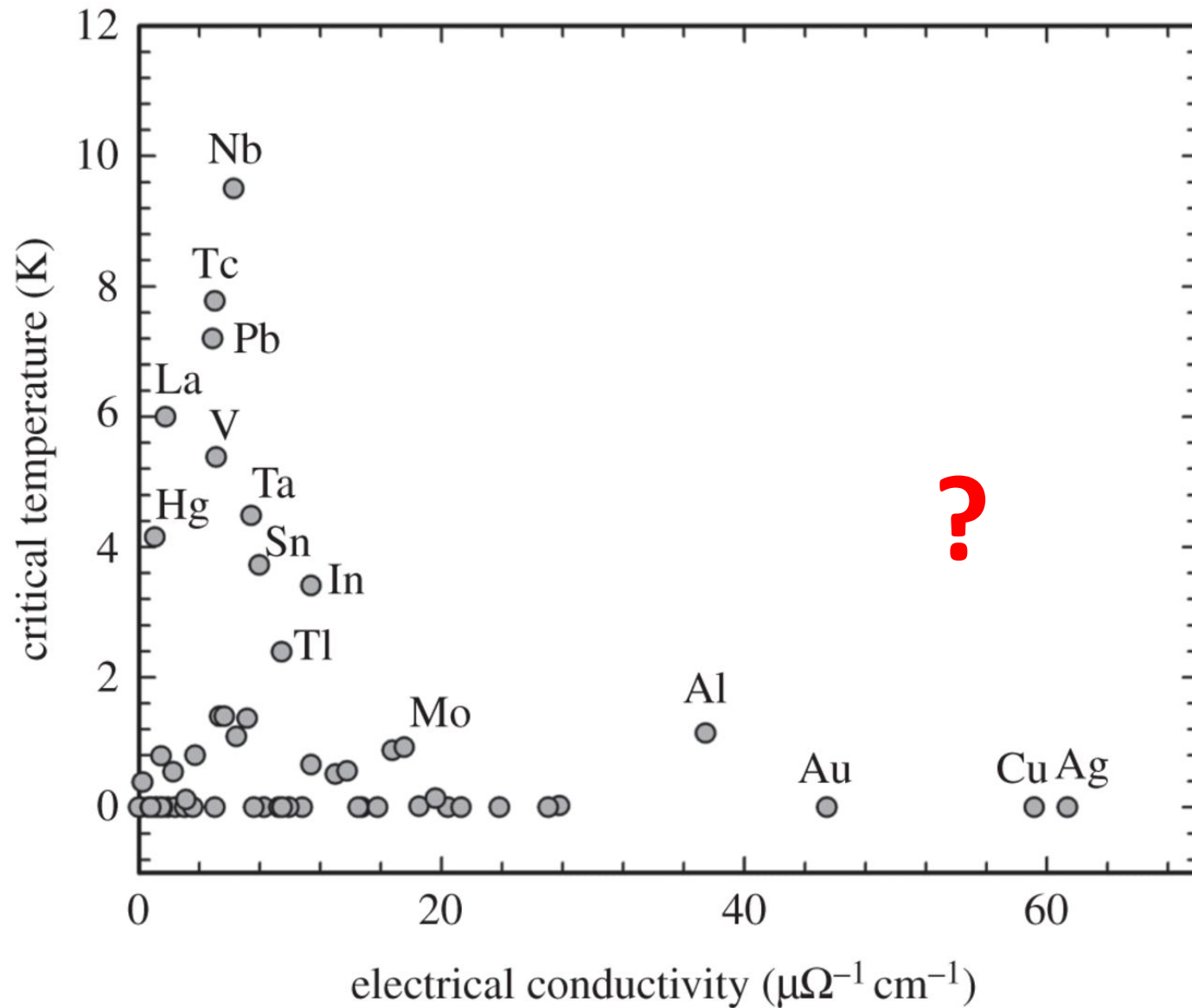
1	1	H																	2	2	He															
2	3	Li	4	Be																	5	6	7	8	9	10	B	C	N	O	F	Ne				
3	11	Na	12	Mg																	13	14	15	16	17	18	Al	Si	P	S	Cl	Ar				
4	19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
5	37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
6	55	Cs	56	Ba	57	La	72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn
7	87	Fr	88	Ra	89	Ac	104	Rf	105	Ha	106	Sg	107	Bh	108	Hs	109	Mt	110	Ds	111	Rg	112	Uub												

- In Bulk at Ambient Pressure
- At High Pressure
- In Modified Form



58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

# Superconducting Metals and Alloys

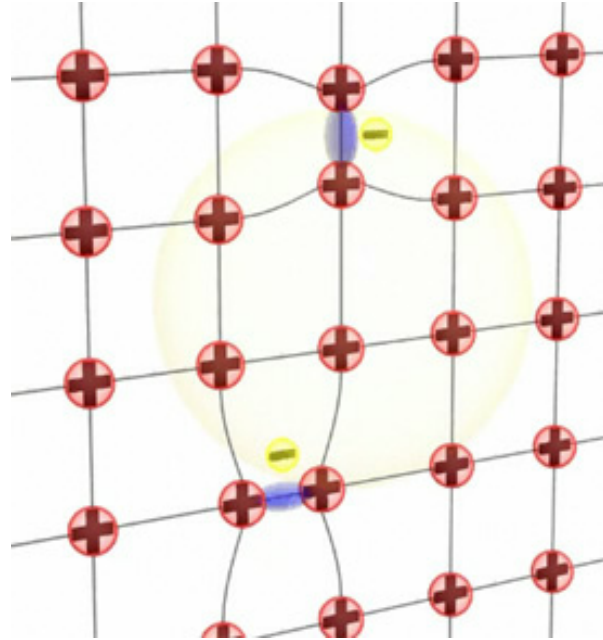


Element/compound	$T_c$ [K]
Al	1.19
Be	0.026
Ga	1.09
Hg	4.15
In	3.40
La	4.8
Nb	9.2
Pb	7.2
Sn	3.72
Ta	4.39
$V_3Ge$	6.0
$V_3Si$	17.1
$Nb_3Ge$	18.0
$Nb_3Sn$	23.2

# History of superconductivity: BCS

1957

Phonons  
 $T_c < 25\text{K}$

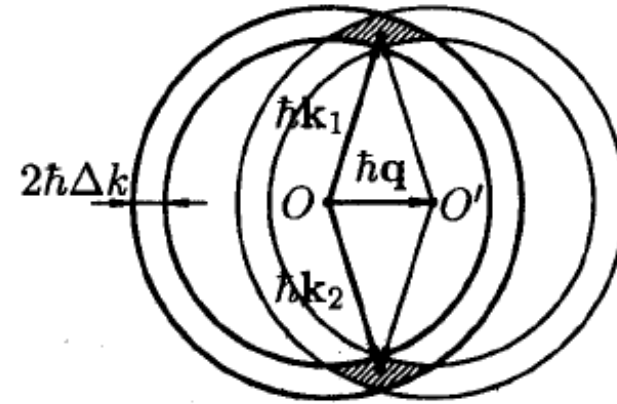
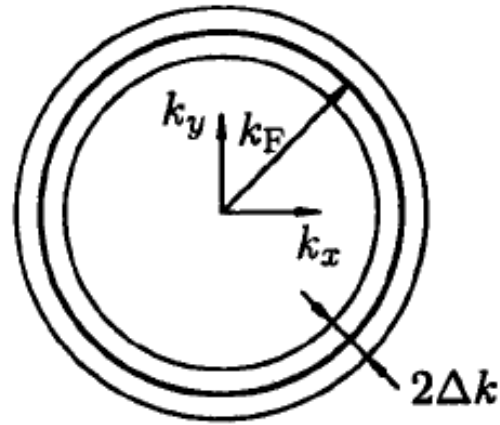
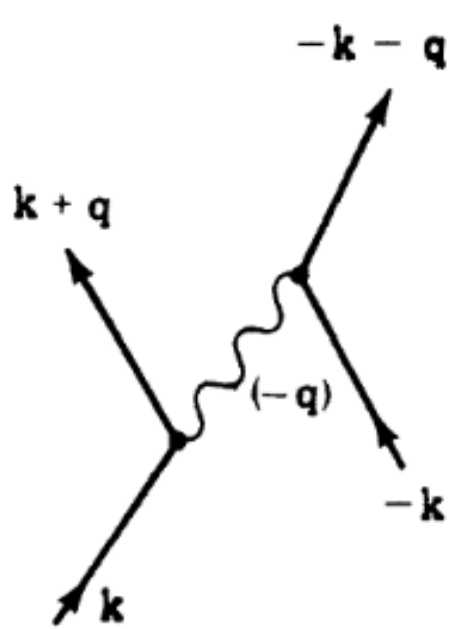


BCS

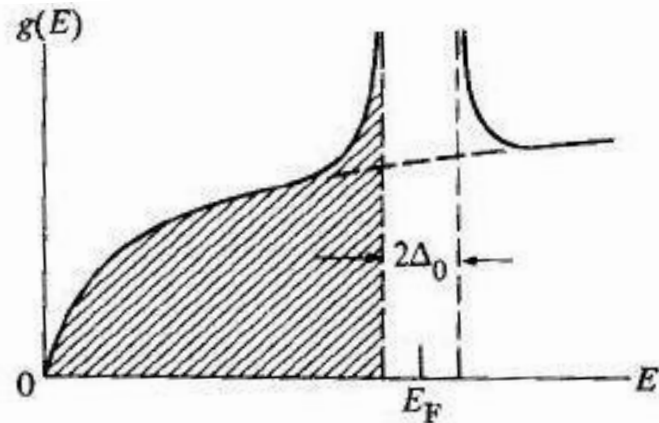
$$k_B T_c = 1.13 E_D e^{-1/N(0) V}$$

$$\Delta(T = 0) = 1.764 k_B T_c$$

# History of superconductivity: BCS

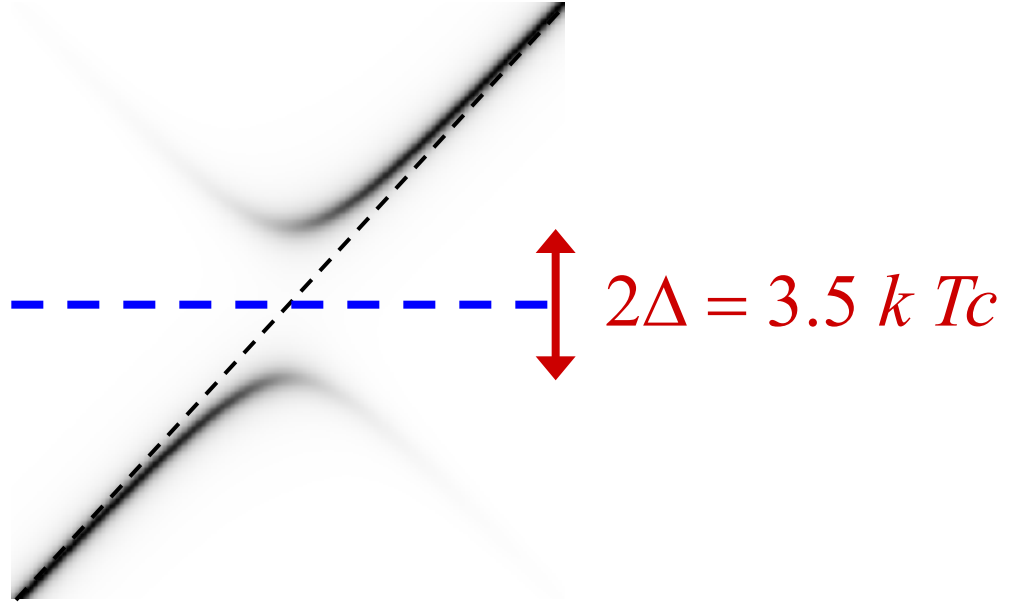


$$\Delta k / k_F \sim \hbar \omega_D / \epsilon_F, \quad \epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m.$$



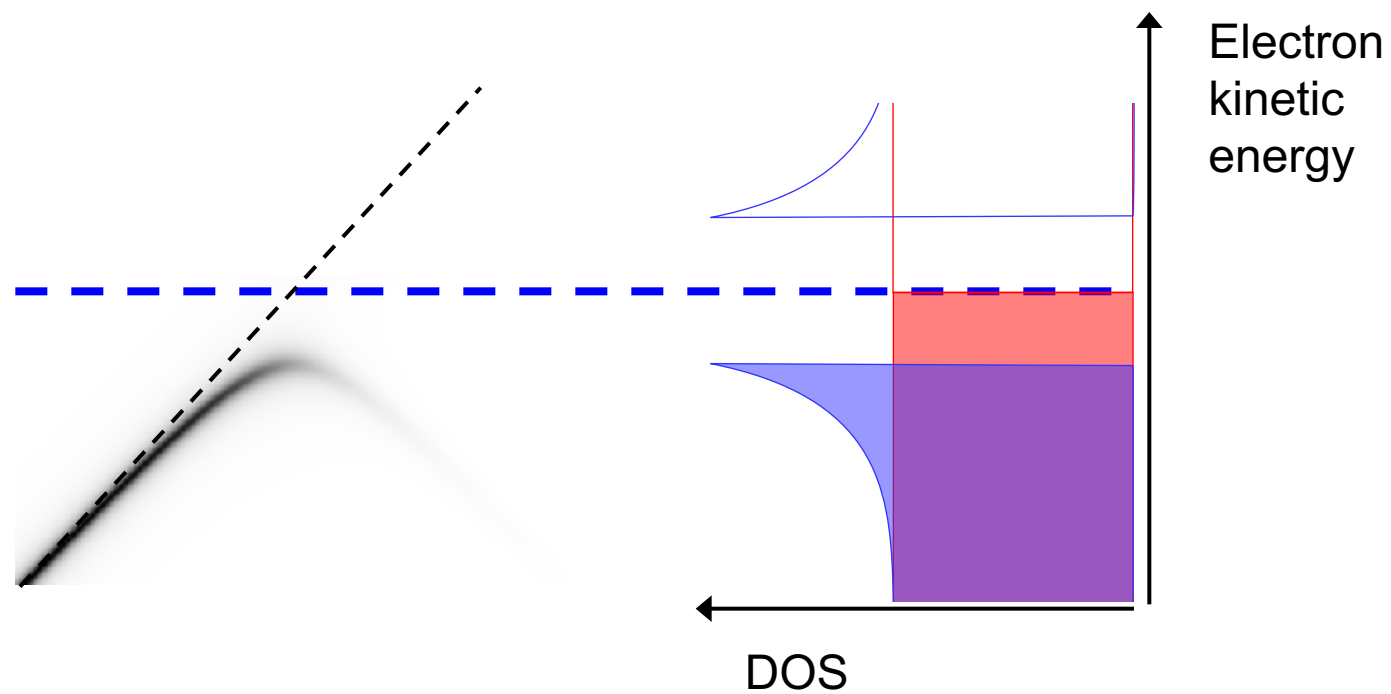
$$\Delta(T \rightarrow T_c) \approx 3.07 k_B T_c \sqrt{1 - (T/T_c)}$$

# Energy scales: superconducting gap



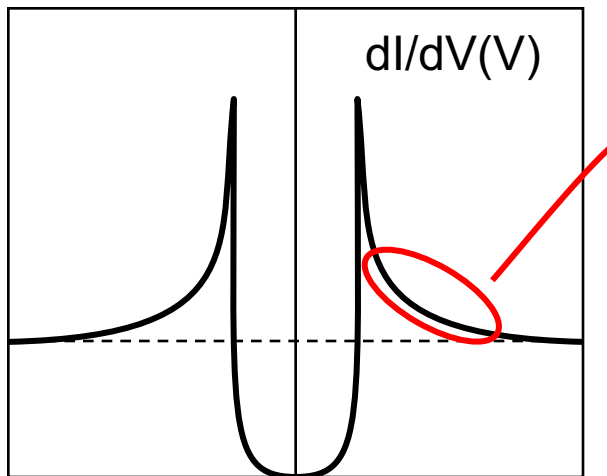
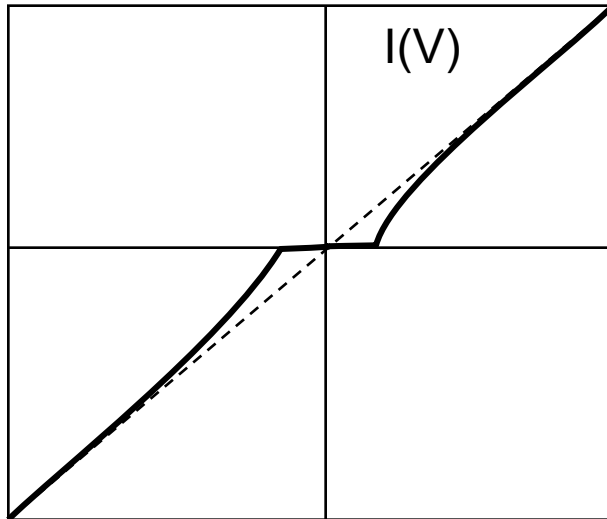


# Energy scales: superconducting gap

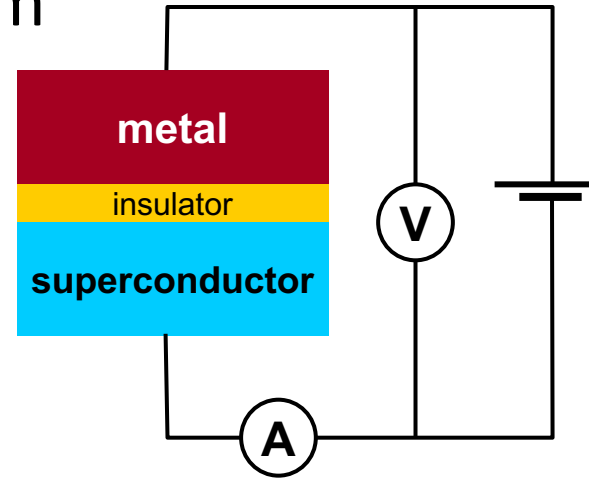
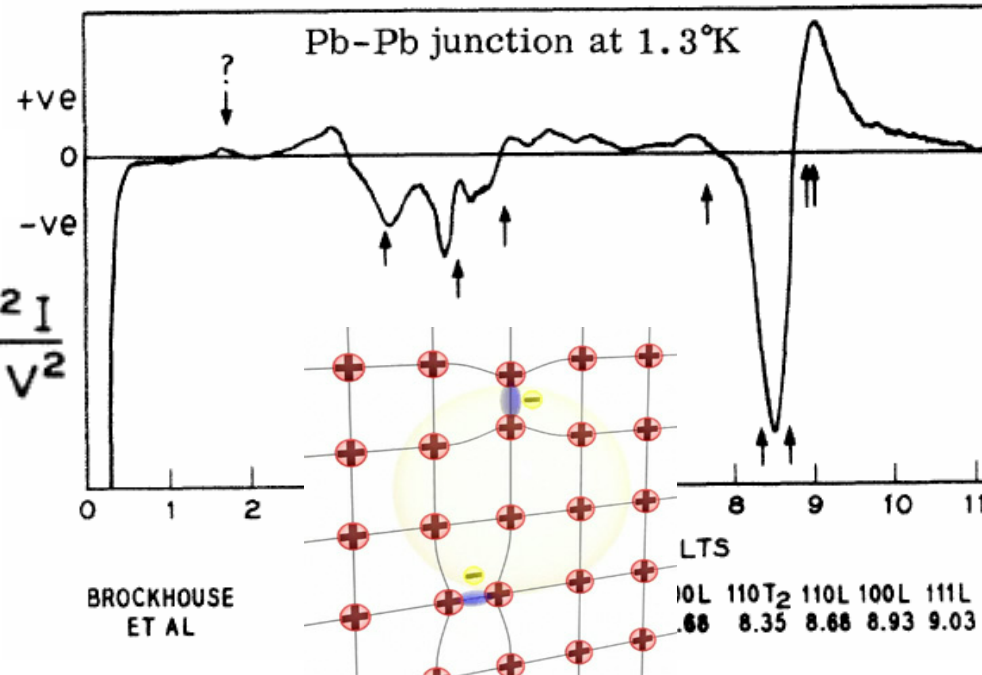


$$2\Delta = 3.5 k T_c$$

# Experimental proof of the mechanism of superconductivity



$$\frac{d^2 I}{dV^2}$$



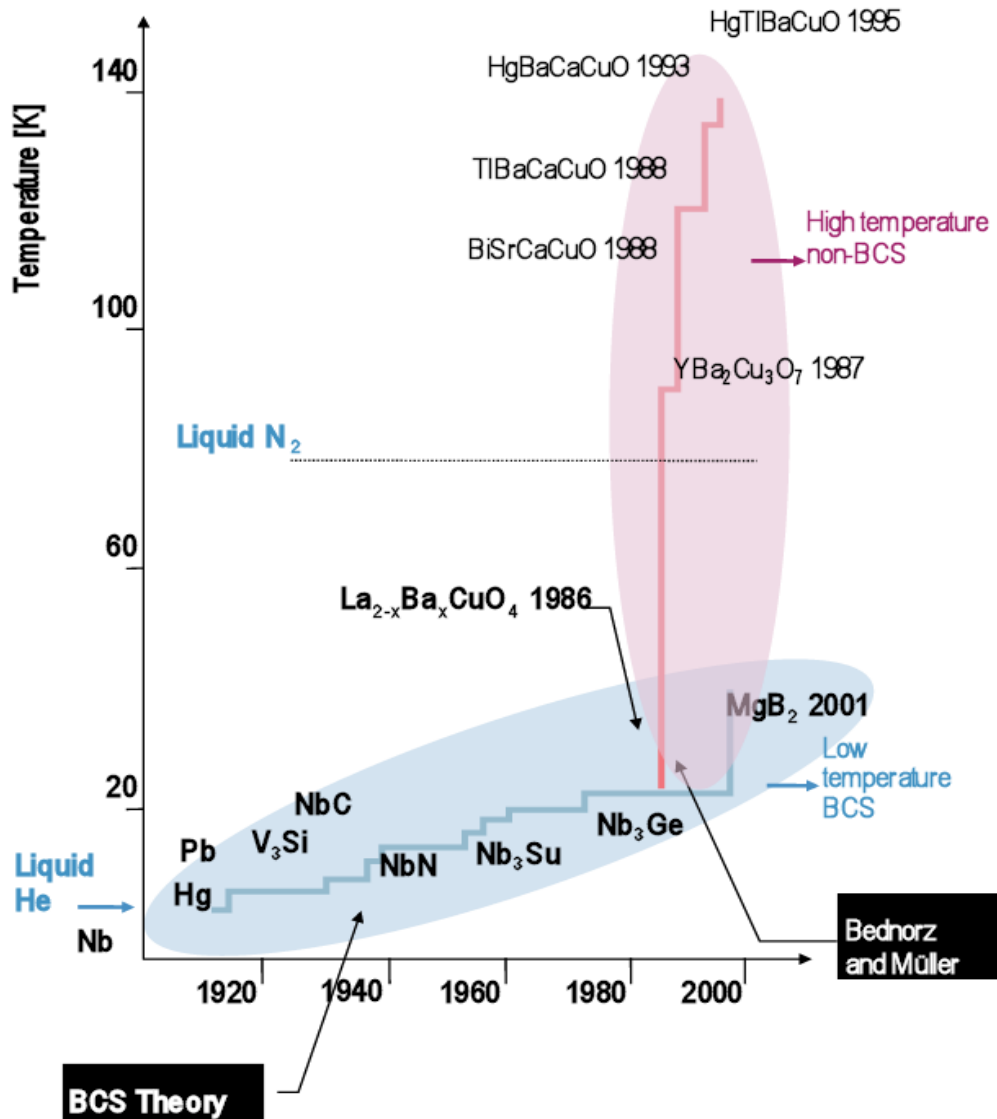
# Історія надпровідності: ВТНП

1986



Muller & Bednorz

# History of superconductivity: HTSC



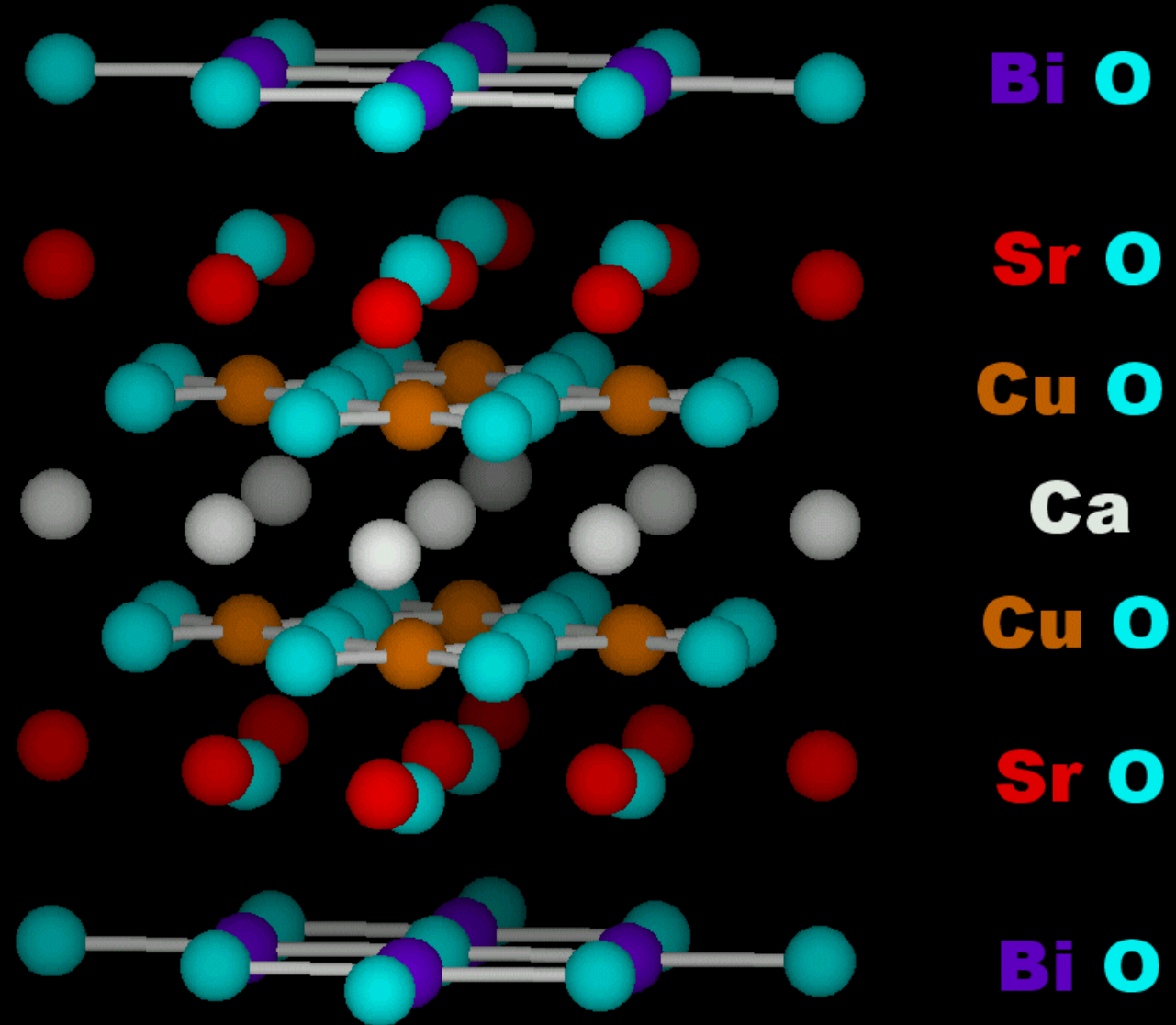
Muller & Bednorz

compound	$T_c$ (K)
Nd <sub>1.85</sub> Ce <sub>0.15</sub> CuO <sub>4</sub>	24
La <sub>1.85</sub> Sr <sub>0.15</sub> CuO <sub>4</sub>	40
YBa <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	92
Bi <sub>2</sub> Sr <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>10</sub>	110
Tl <sub>2</sub> Ba <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>10</sub>	127
Hg <sub>2</sub> Ba <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	134

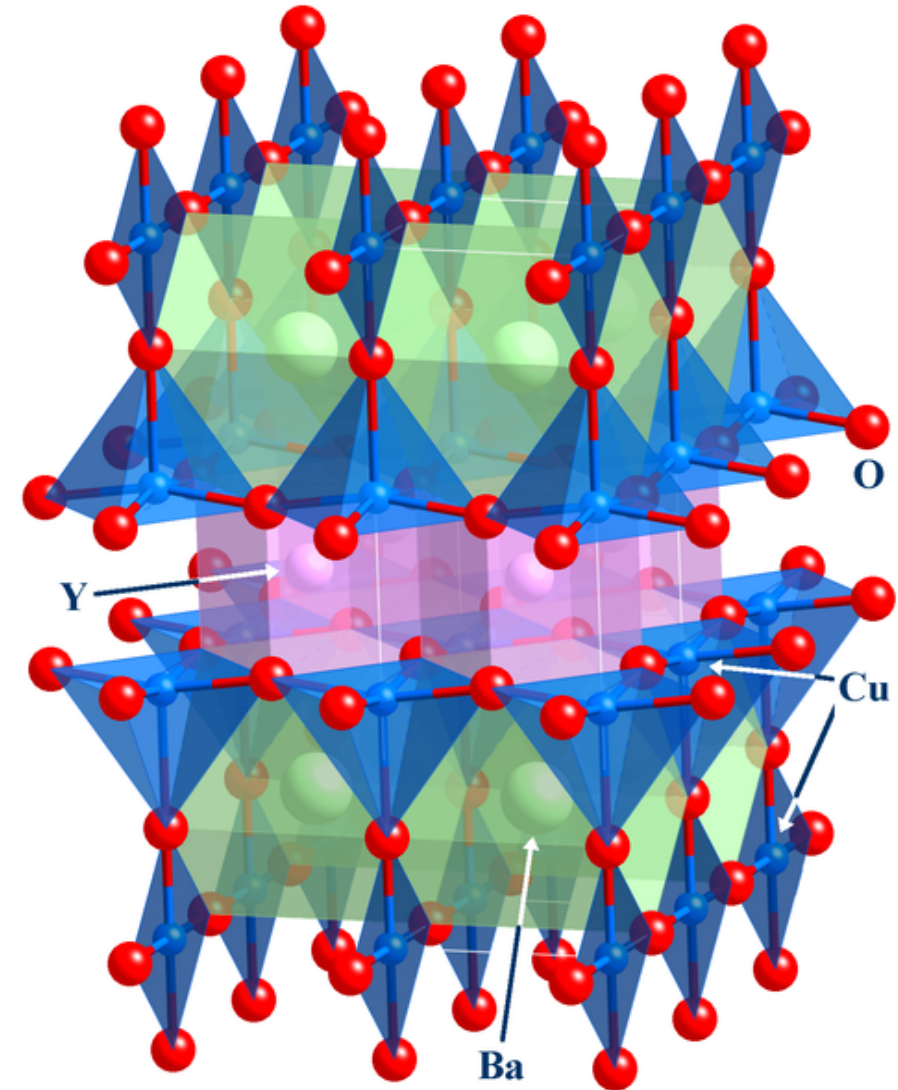
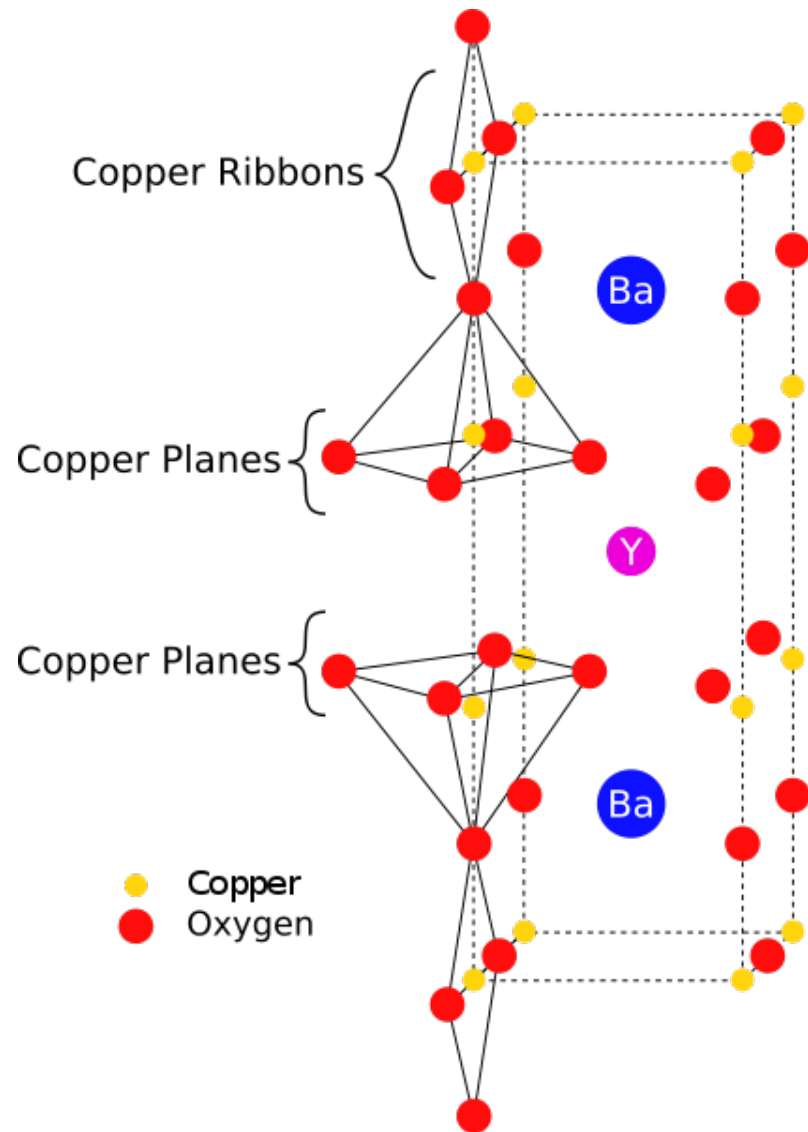


**BSCCO**

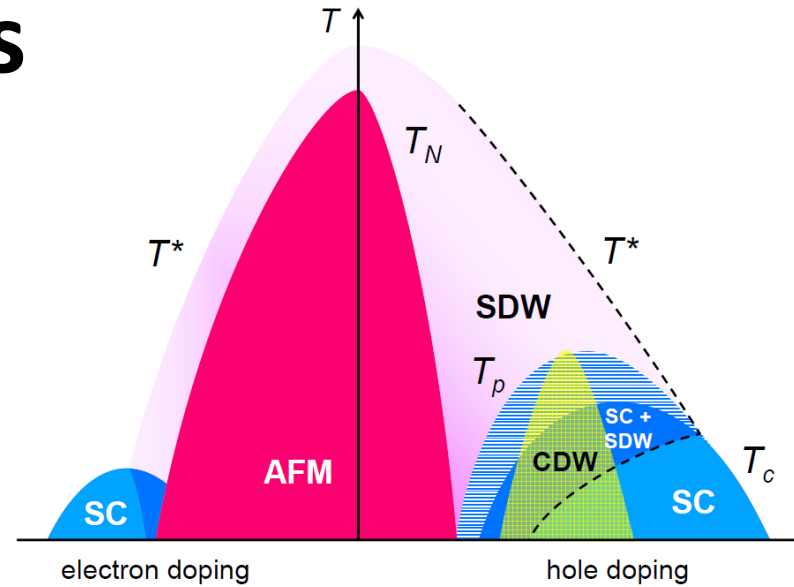
**Bi-2212**



# HTSC: YBCO



# Physics of cuprates



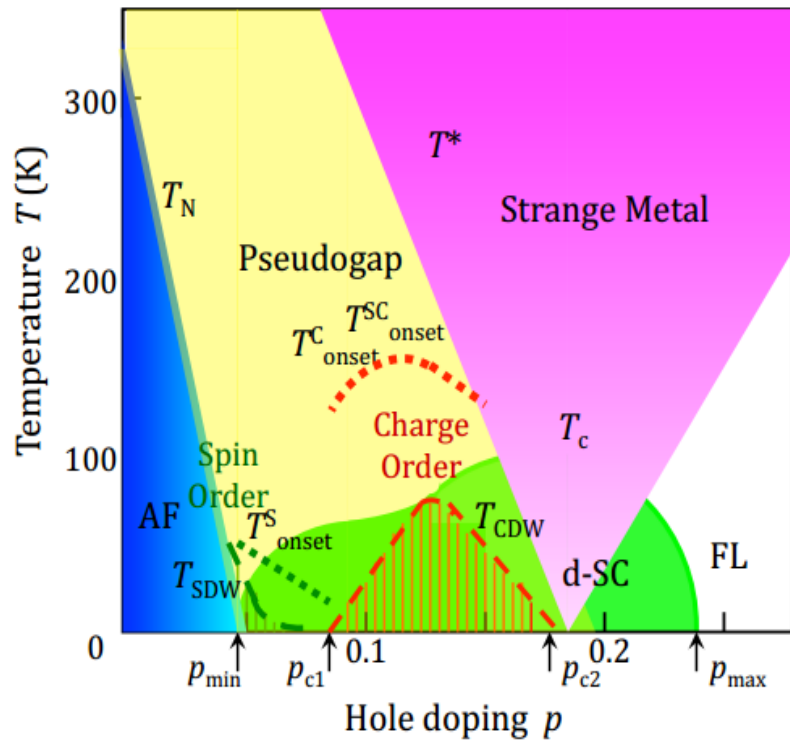
Physics is complex.

The structure is simple - the  $\text{CuO}_2$  plane.

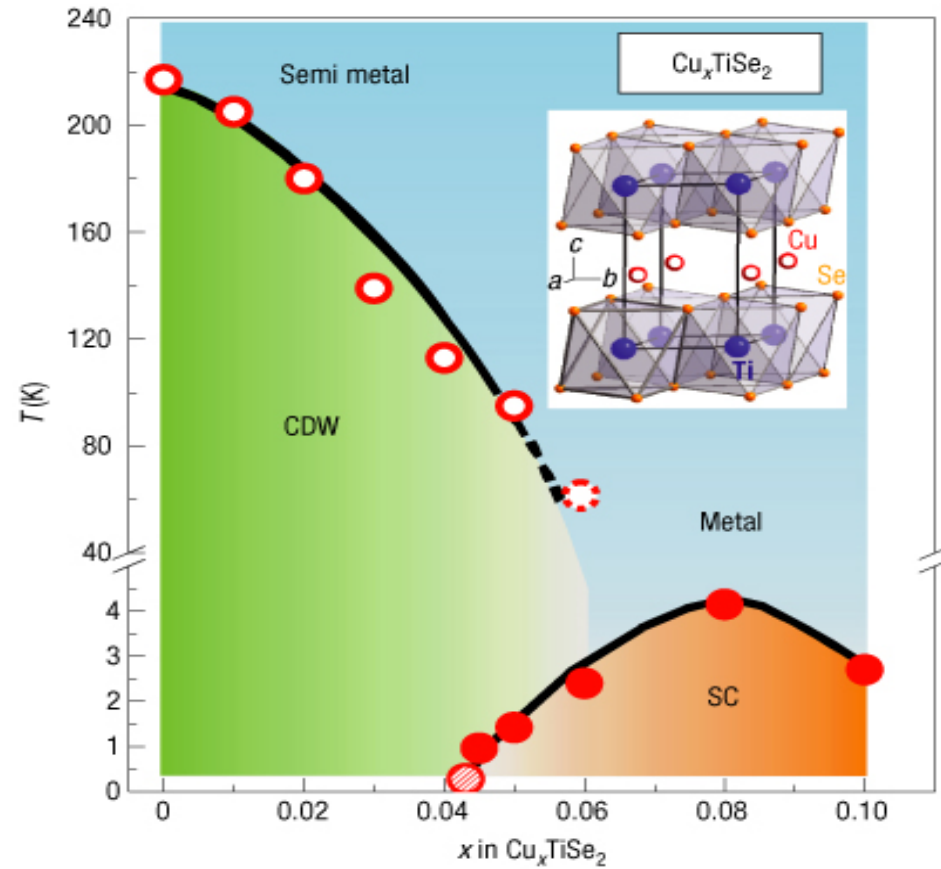
Simple electronic structure.

Smooth electronic interaction.

# Competing orders relation to electronic structure?



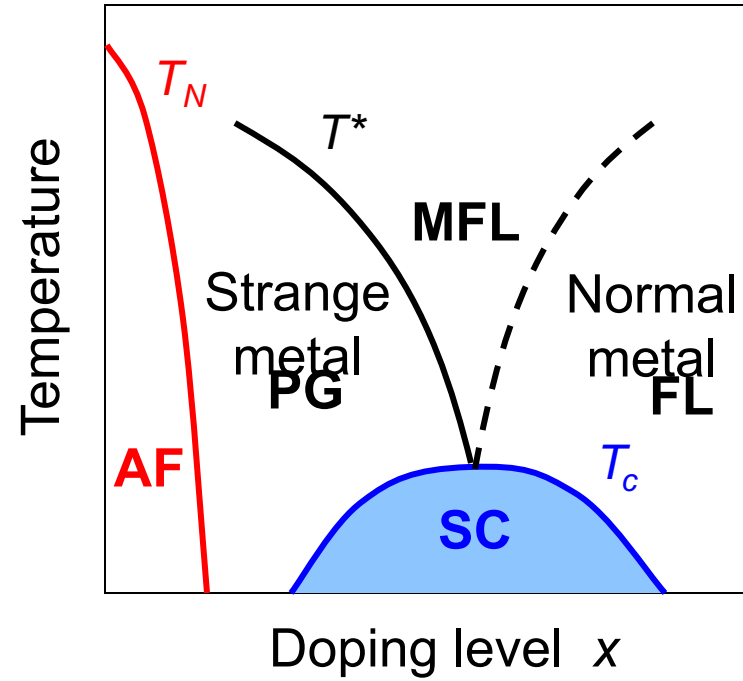
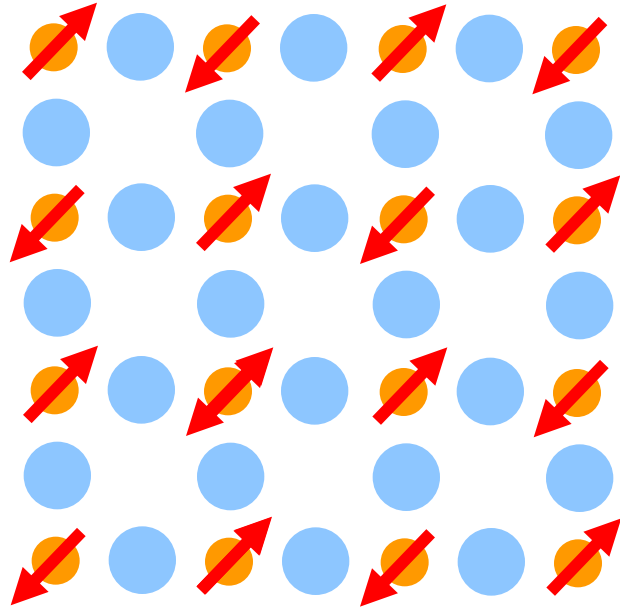
B Keimer, SA Kivelson,  
MR Norman... 2014



Morosan *Nature Physics* 2006



# Hole doping

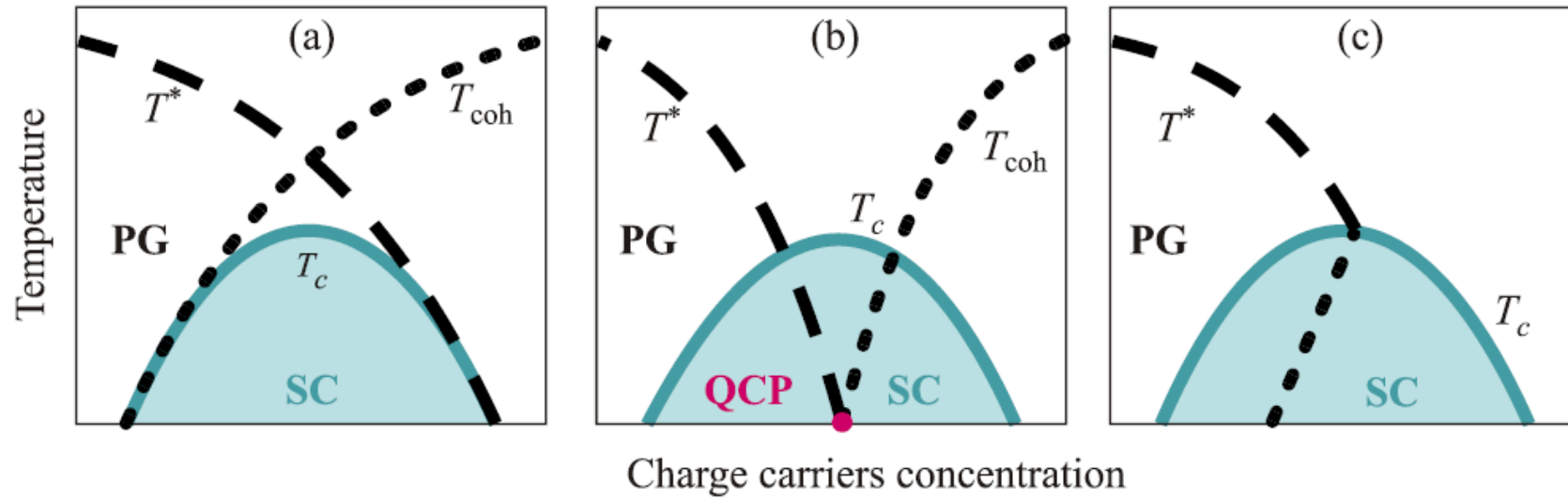


**FL** – Fermi Liquid

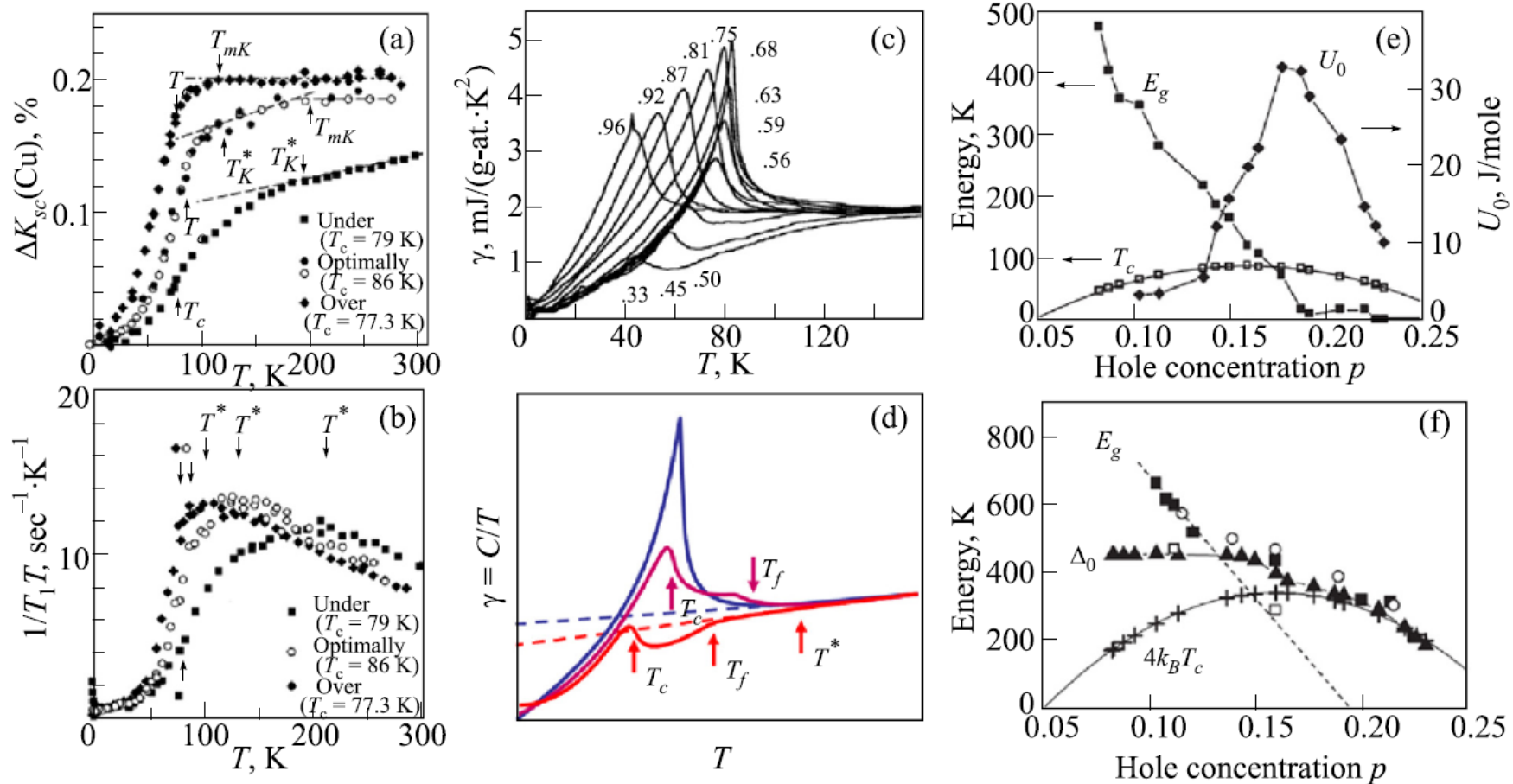
**MFL** – Marginal Fermi Liquid

**PG** – Pseudo Gap state

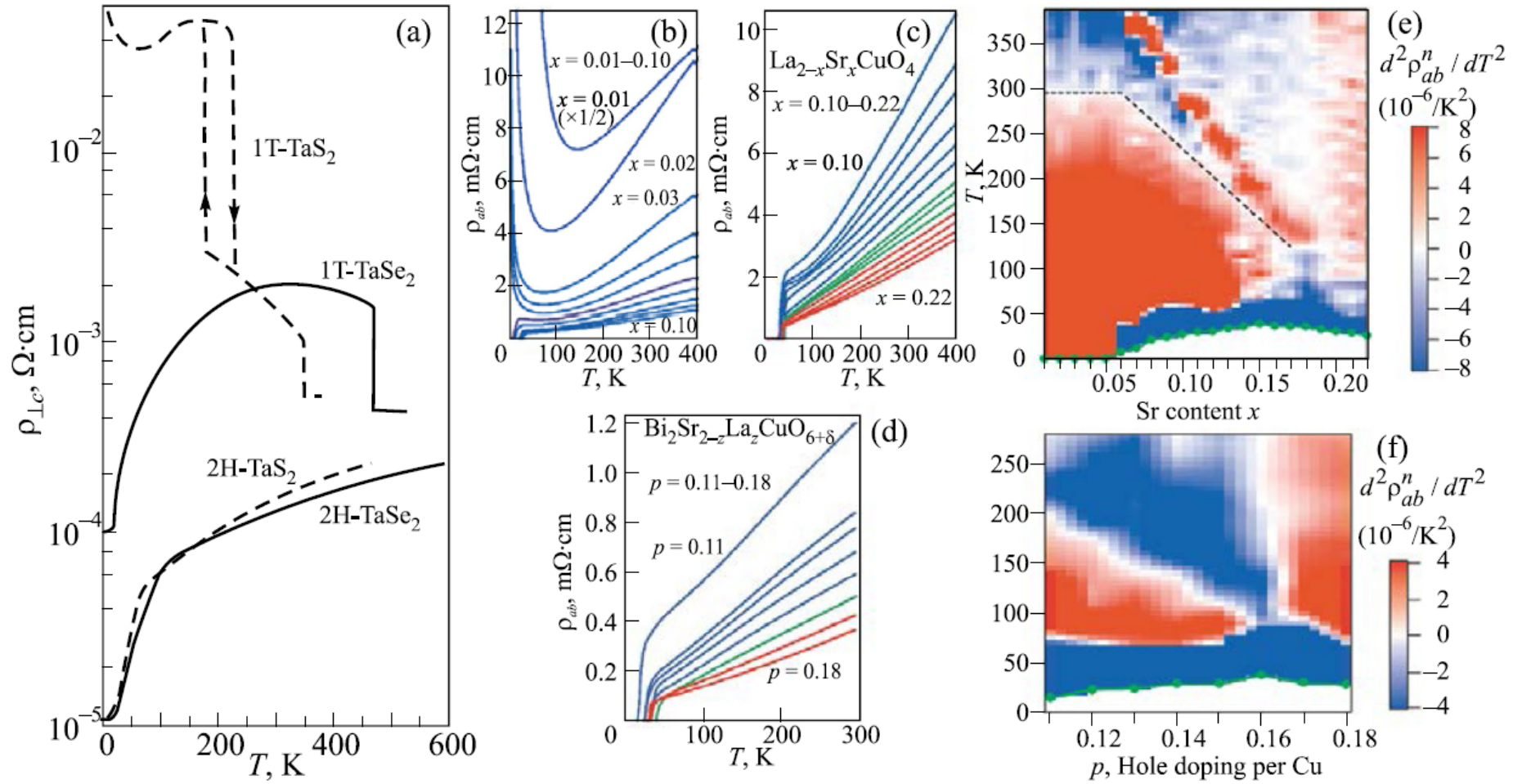
# Theories of the pseudogap



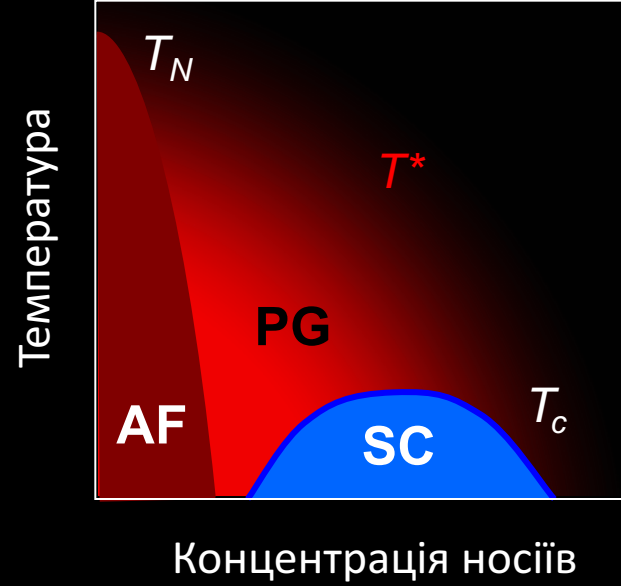
# Pseudogap in NMR and heat capacity



# Pseudogap in Resistivity

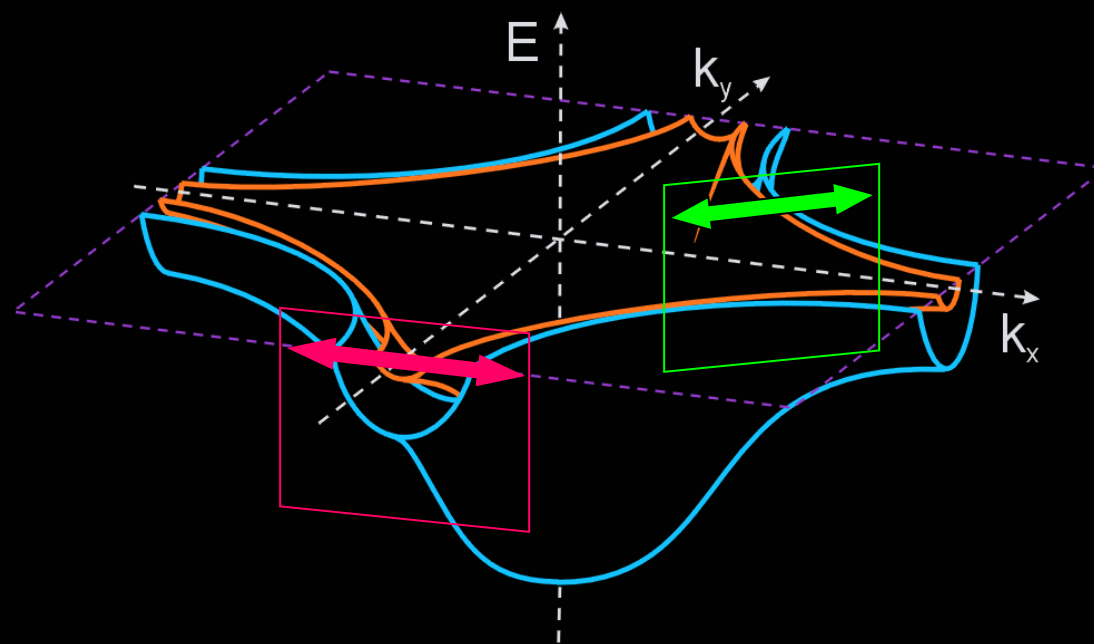
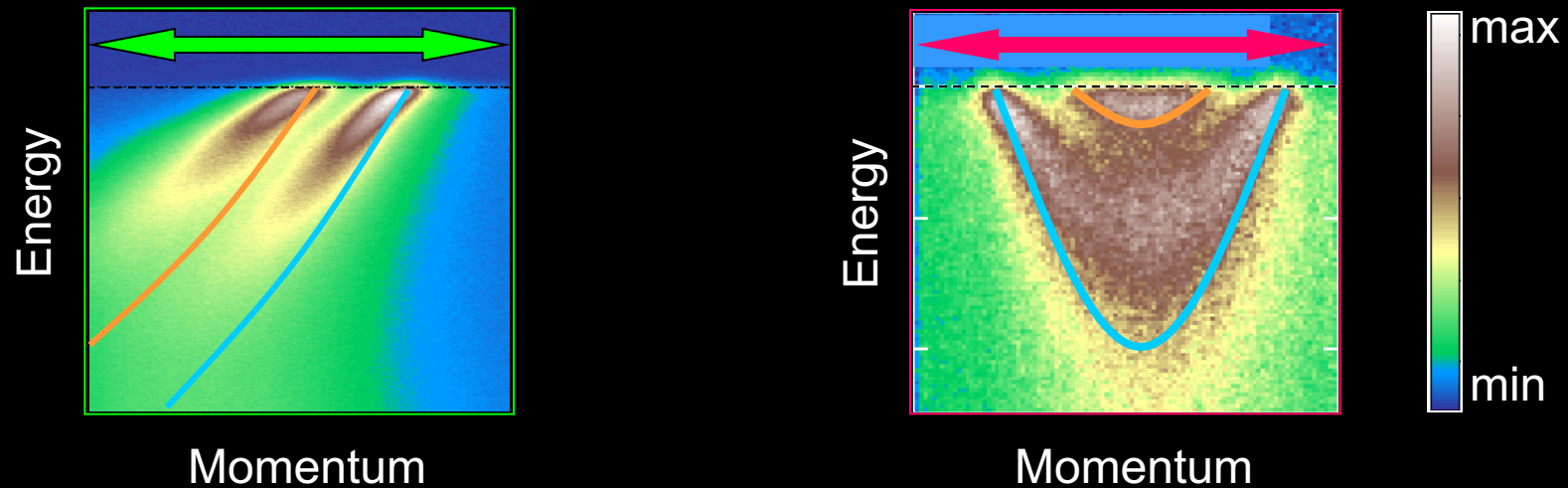






Магніто-електронна взаємодія у ВТНП

# ВТНП = LDA + Власна енергія ( $\Sigma$ )



$$\text{ВТНП} = \text{LDA} + \Sigma + \text{???}$$

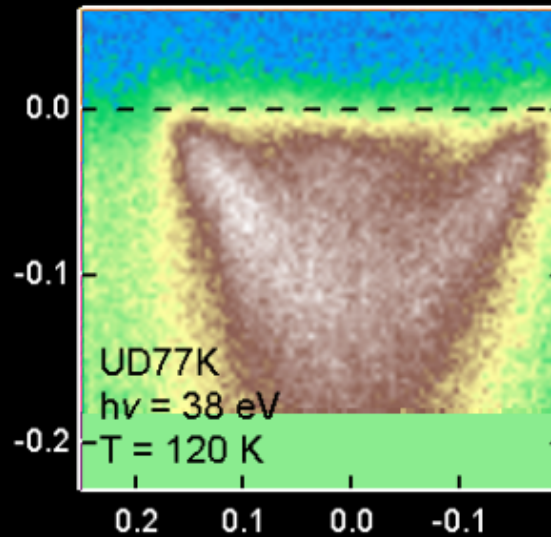
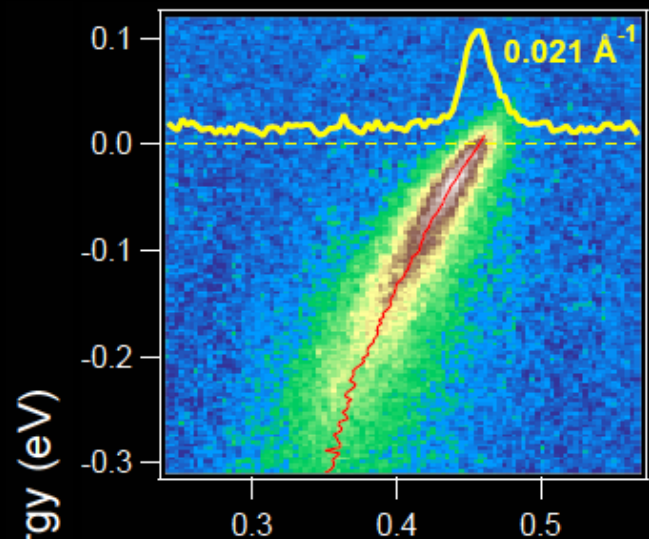
- Що визначає власну енергію і формує спектр у нормальному стані:  
нод (фонони), антинод (спінові флуктуації)?
- Механізм надпровідного спарювання?
- Природа та роль псевдощілини?



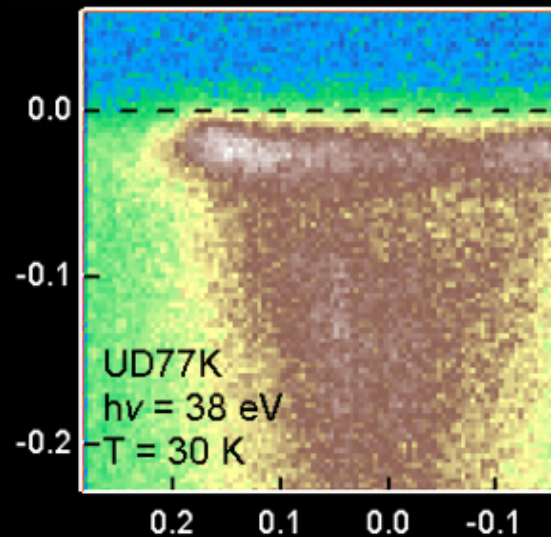
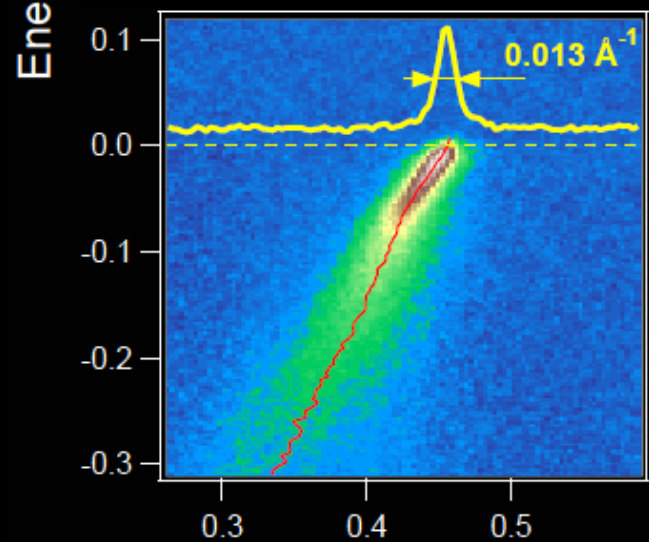
Нод

Антинод

$T > T_c$



$T < T_c$

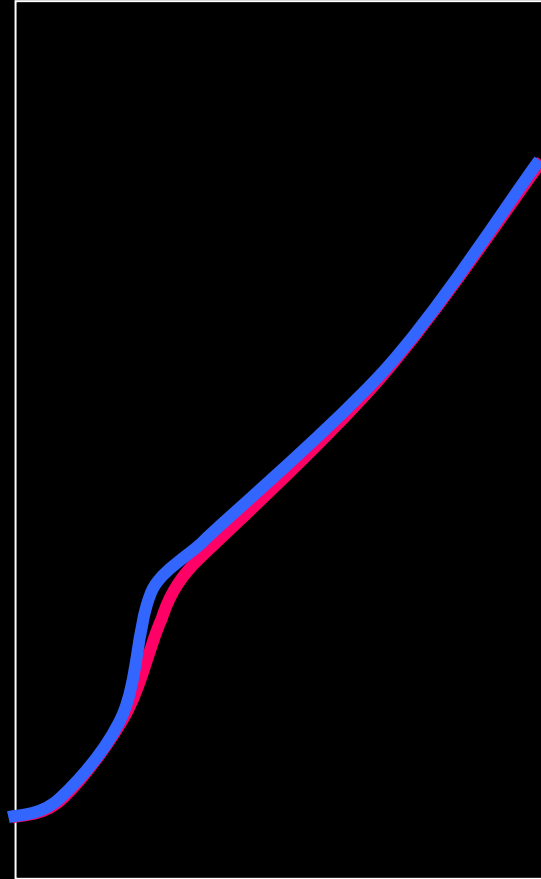


Momentum ( $\text{\AA}^{-1}$ )

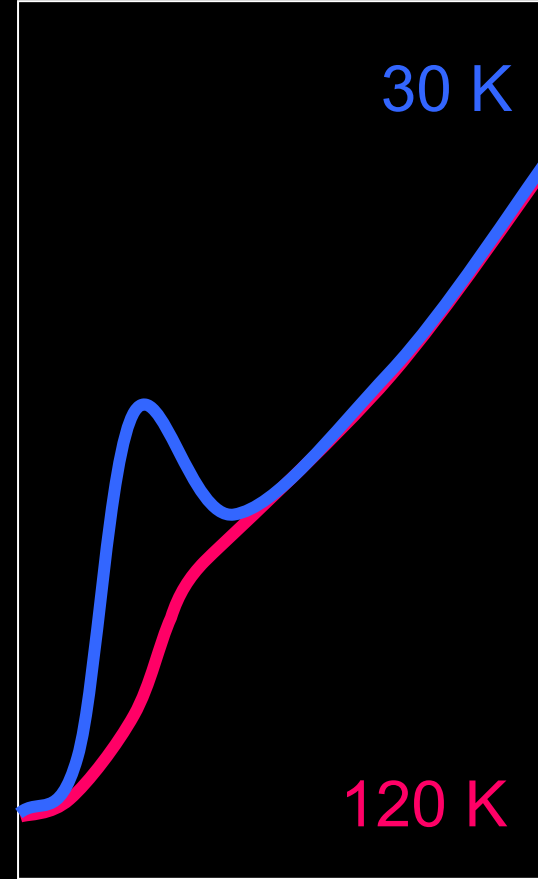
Нод

Антинод

Швидкість розсіяння



Енергія



Енергія

## Нод

## Антинод

Kordyuk et al. *PRL* 2004

Kordyuk et al. *PRB* 2004

Kordyuk et al. *PRB* 2005

Kordyuk et al. *PRL* 2006

Borisenko et al. *PRL* 2006

Inosov et al. *PRL* 2007

Inosov et al. *PRB* 2008

Kordyuk et al. *PRL* 2002

Borisenko et al. *PRL* 2003

Kim et al. *PRL* 2003

Borisenko et al. *PRL* 2004

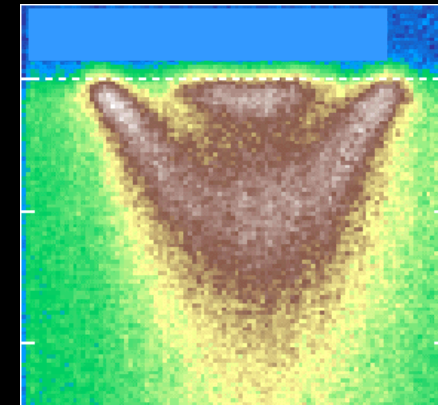
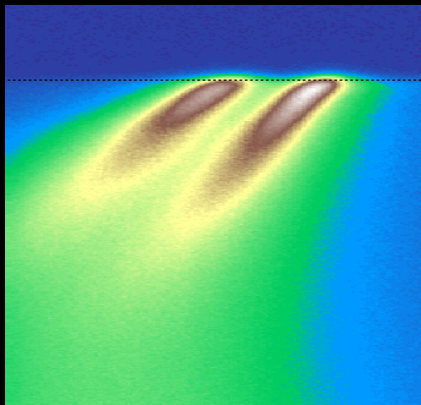
Inosov et al. *PRB* 2008

Kordyuk et al. *PRB* 2009

Kordyuk & Borisenko *FNT* 2006

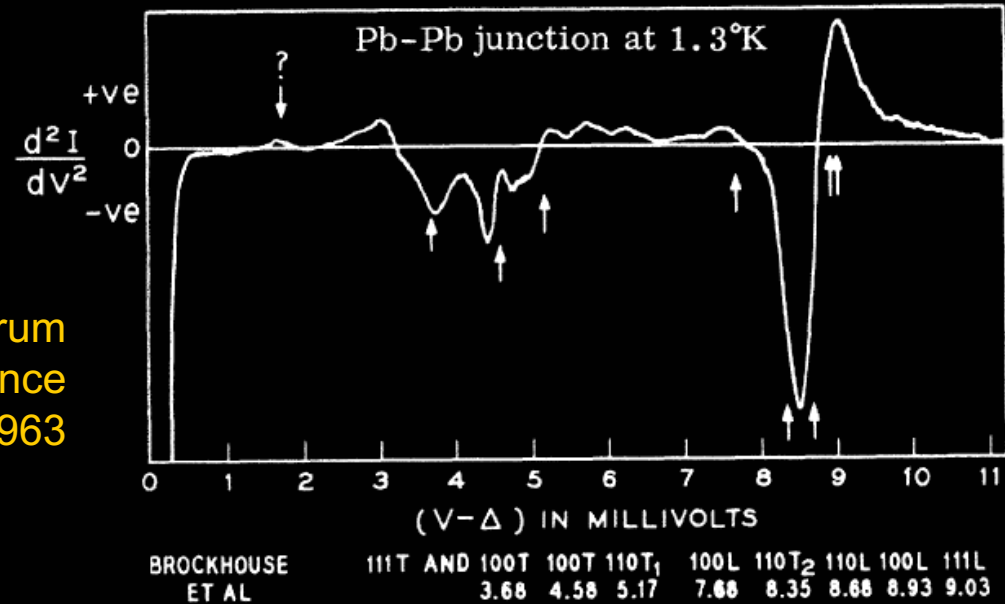
Dahm et al. *Nature Phys* 2009

Kordyuk et al. *EPJ ST* 2010



# Історія про “відбитки пальців” (fingerprints)

“fingerprints” of the phononic spectrum  
in tunneling differential conductance  
by Rowell *PRL* 1963



$$\Delta(\omega) = \frac{1}{Z(\omega)} \int_0^{\omega_c} d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(\omega')}{(\omega'^2 - \Delta^2(\omega'))^{1/2}} \right\} [K_+(\omega', \omega) - N(0)U_c]$$

$$[1 - Z(\omega)]\omega = \int_0^{\infty} d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\omega'}{(\omega'^2 - \Delta^2(\omega'))^{1/2}} \right\} K_-(\omega', \omega)$$

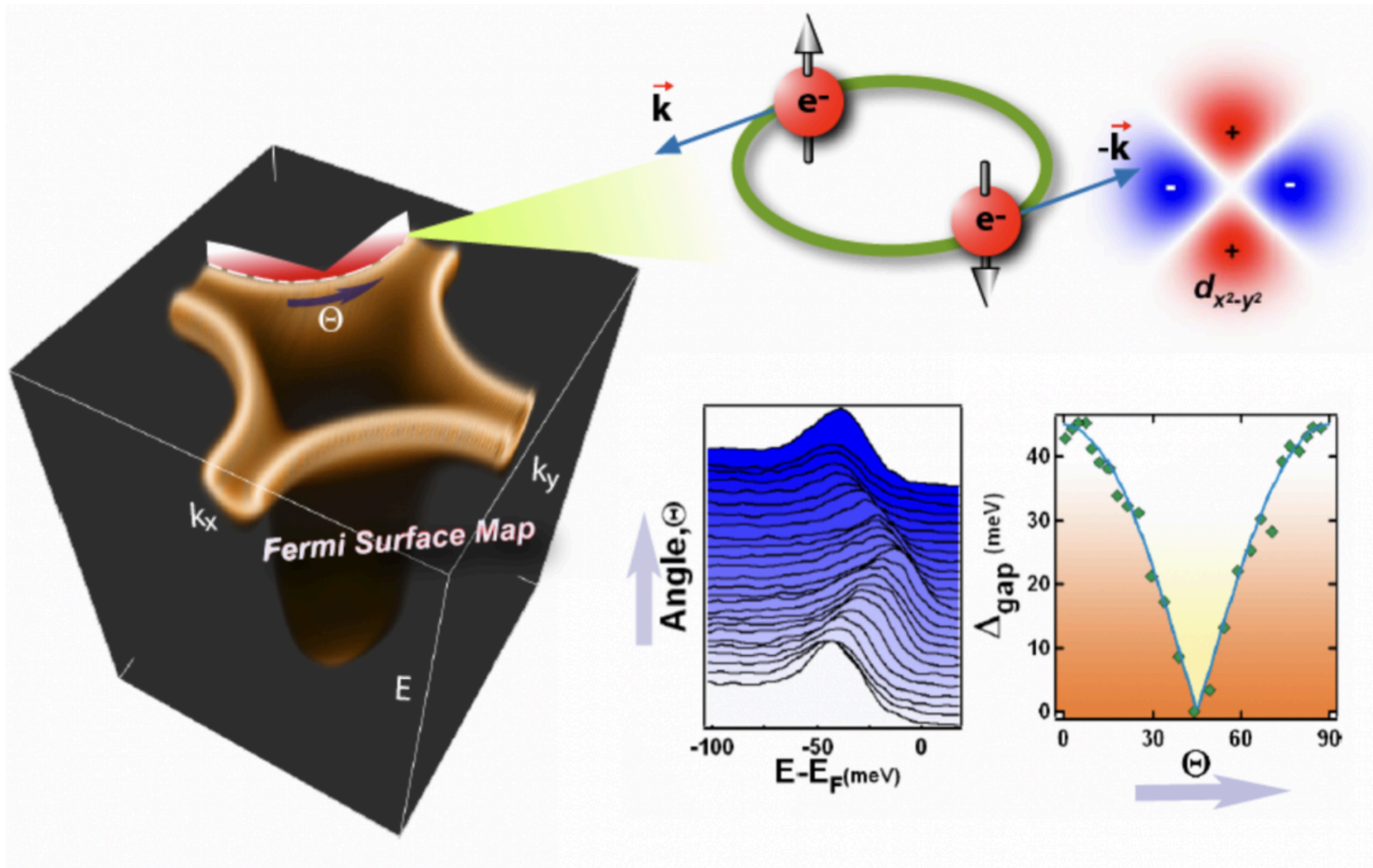
$$K_{\pm}(\omega, \omega') = \sum_{\lambda} \int_0^{\infty} d\nu \alpha_{\lambda}^2(\nu) F_{\lambda}(\nu) \left[ \frac{1}{\omega' + \omega + \nu + i\delta} \pm \frac{1}{\omega' - \omega + \nu - i\delta} \right]$$

el-ph coupling constant

phonon DOS

Scalapino *PR* 1966

# d-wave superconducting gap

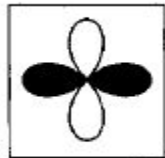


# d-wave order: tri-crystal experiment

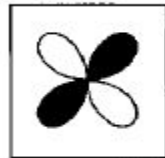
Pairing is d symmetry.

Phase sensitive measurements.

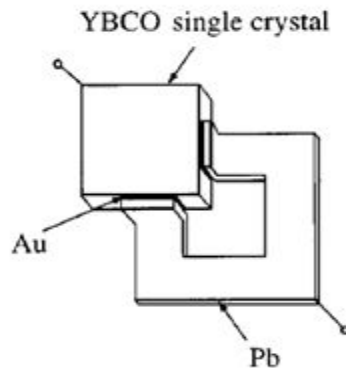
$$\langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \propto \Psi(\mathbf{k})$$



$$\Delta_{d_{x^2-y^2}}(\mathbf{k}) = \Delta_{d_{x^2-y^2}}^0 (\cos k_x - \cos k_y)$$

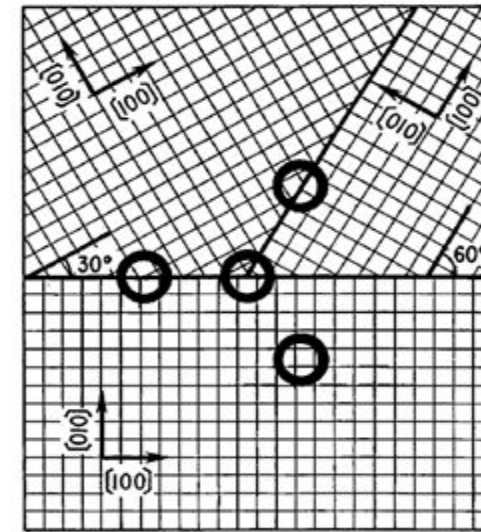
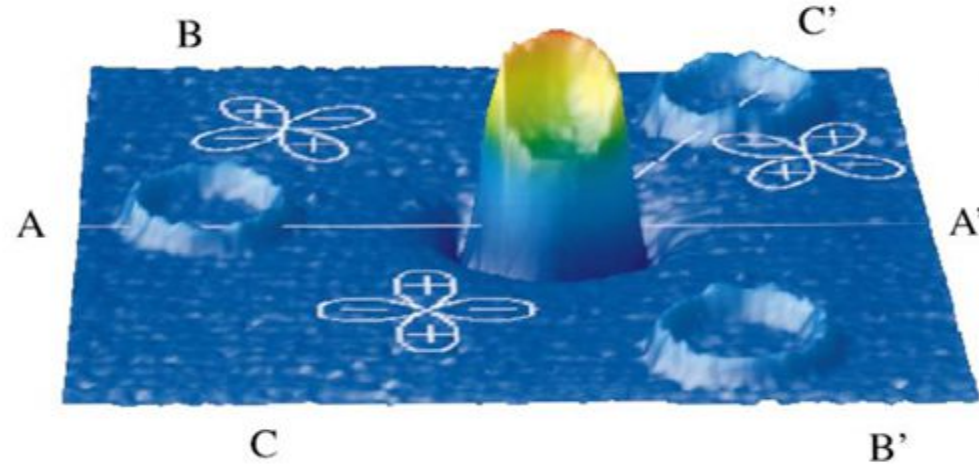


$$\Delta_{d_{xy}}(\mathbf{k}) = \Delta_{d_{xy}}^0 (\sin k_x \sin k_y)$$



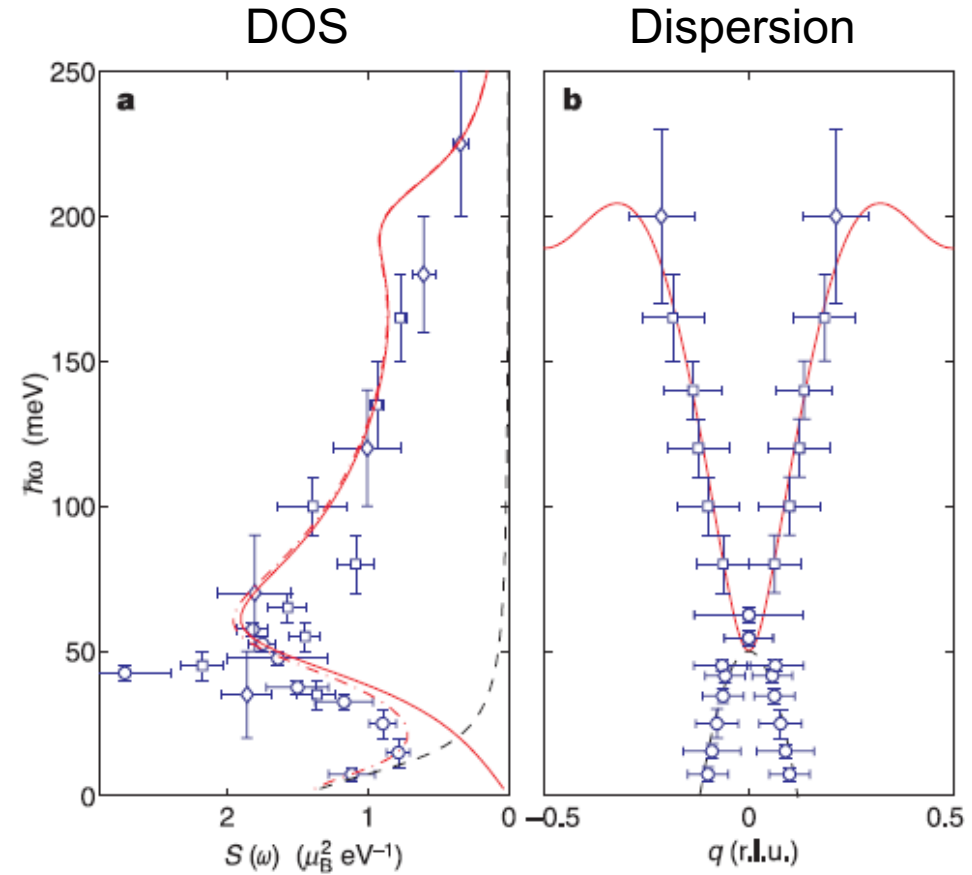
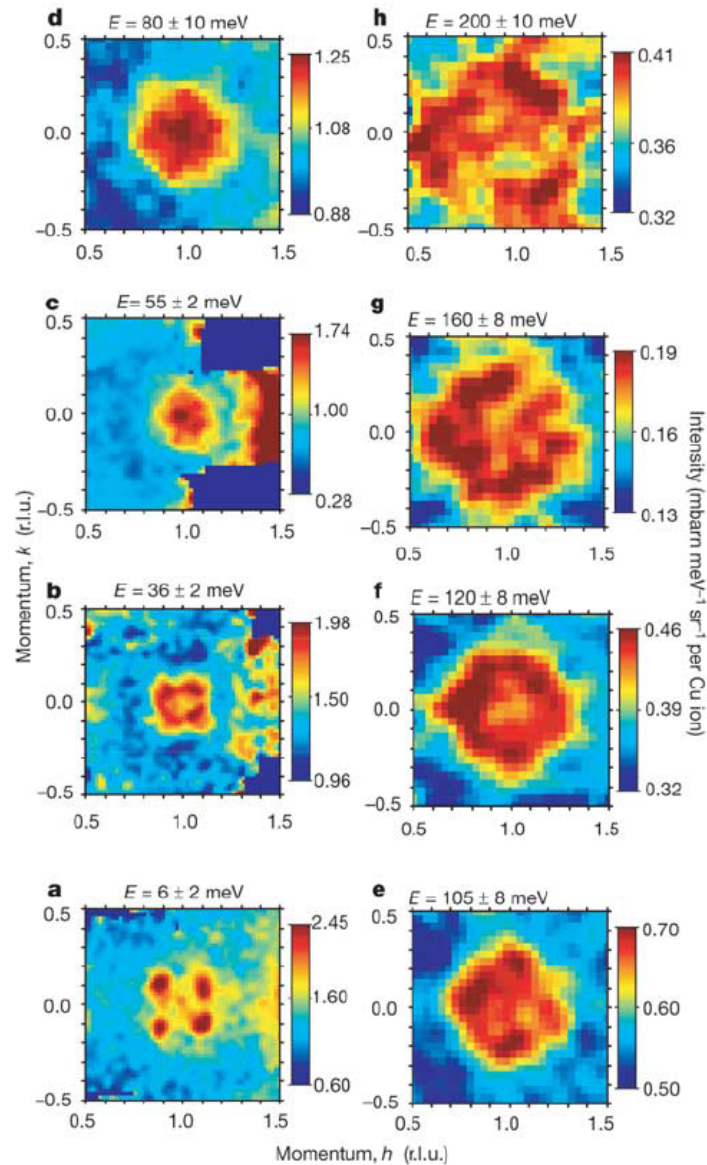
1. tri-crystal experiment, IBM 1993.  
 $\frac{1}{2}$  flux vortex at the junction.  
 Standard  $hc/2e$  vortex everywhere else.

2. Corner SQUID.  
 Wollman et al 1993.



Tsuei and Kirtley Rev Mod Phys 2000.

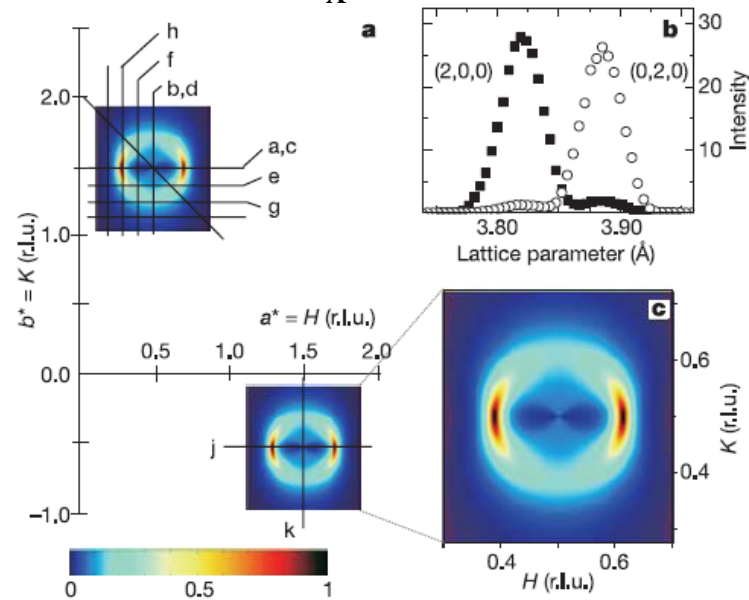
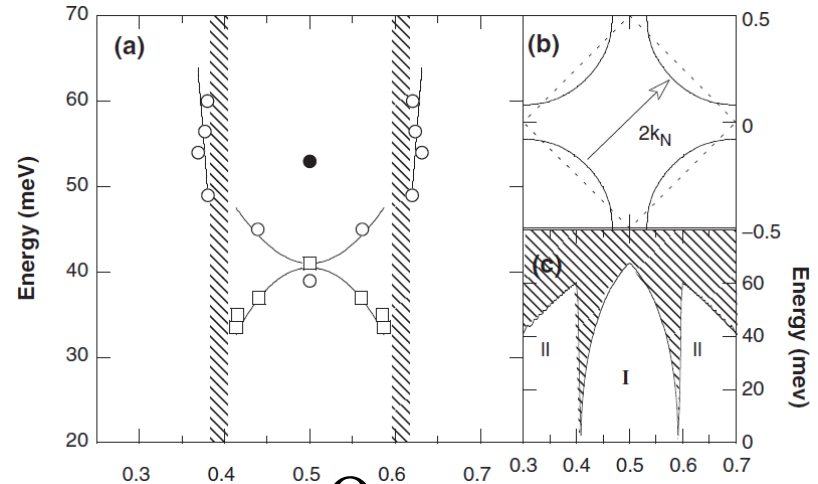
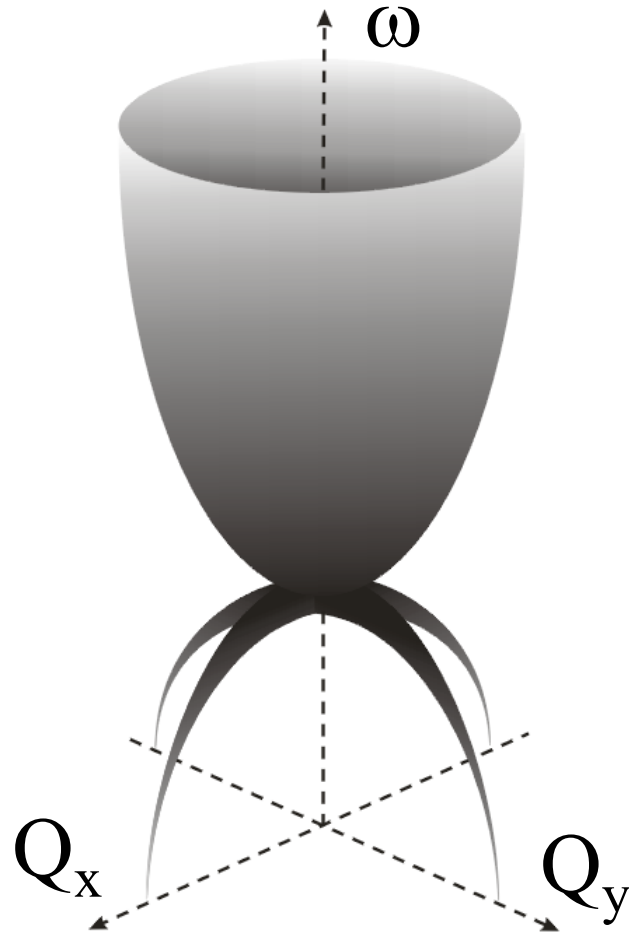
# Spin susceptibility structure



$\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  ('Zurich' oxide)

Tranquada *Nature* 2004

# Spin susceptibility structure

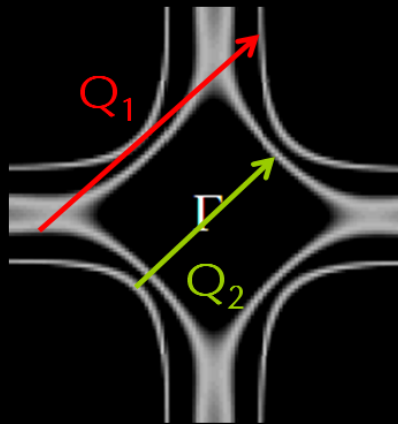


$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$



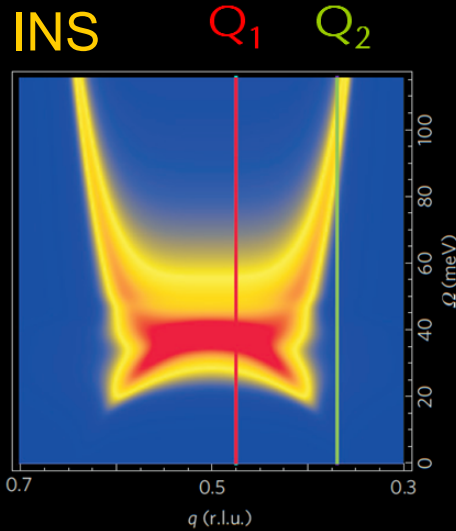
# Спінові флуктуації — медіатор високотемпературної надпровідності

ARPES



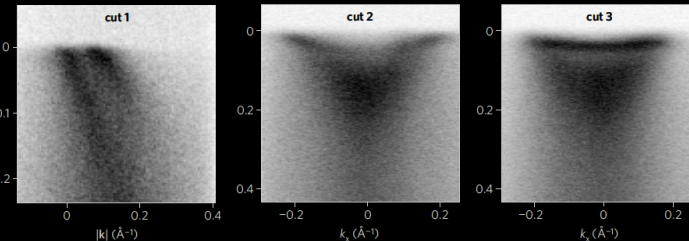
$\text{Im } G_0(\mathbf{k}, \omega)$

INS

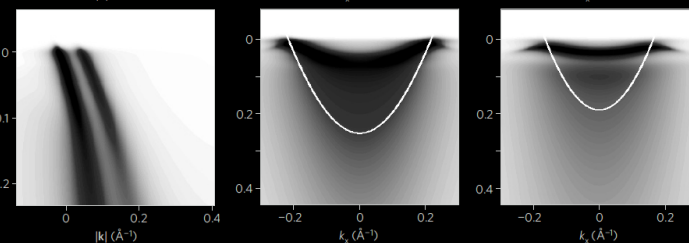


$\text{Im } \chi(\mathbf{q}, \Omega)$

ARPES



Розрах.



$\text{Im } G(\mathbf{k}, \omega)$

Схематична формула купратів:

$$G_0^{-1} + \underbrace{\alpha^2 G \star \chi}_{\Sigma} = G^{-1}$$

$$G_0^{-1} + \alpha^2 G \star \underbrace{G \star G}_{\chi} = G^{-1}$$

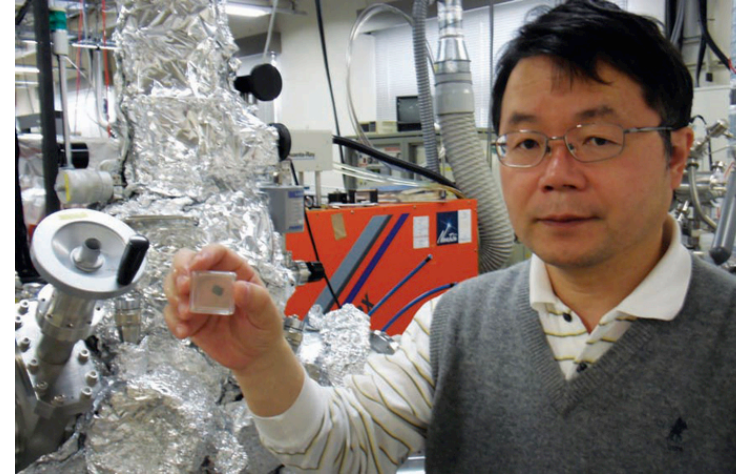
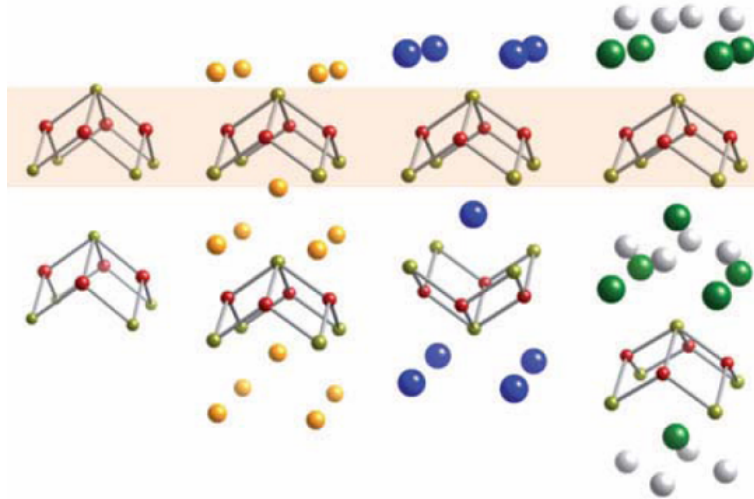
$G_0, G$  — функції Гріна «голих» електронів та квазічастинок (одночастинкові спектри),  $\Sigma$  — власна енергія,  $\chi$  — спектр спінових флуктуацій (двохчастинковий спектр),  $\alpha$  — константа зв'язку,  $\star$  — операція типу кореляції.

1. Шляхом порівняння ARPES та нейтронних (INS) спектрів показано, що основною причиною ренормалізації в купратах є взаємодія електронів зі **спіновими флуктуаціями**, спектр яких визначається сприйнятливістю електронів провідності.
2. За наявними експериментальними параметрами, магнітний механізм парування передбачає  $T_c \sim 150$  К.

D. Inosov et al., [PRB 2007](#)  
 T. Dahm et al., [Nature Phys 2009](#)  
 A. Kordyuk et al., [EPJ ST 2010](#)

# New history of superconductivity: Iron Age

## 2008

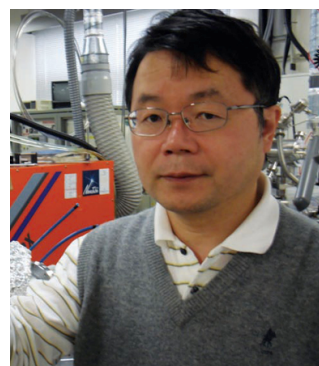
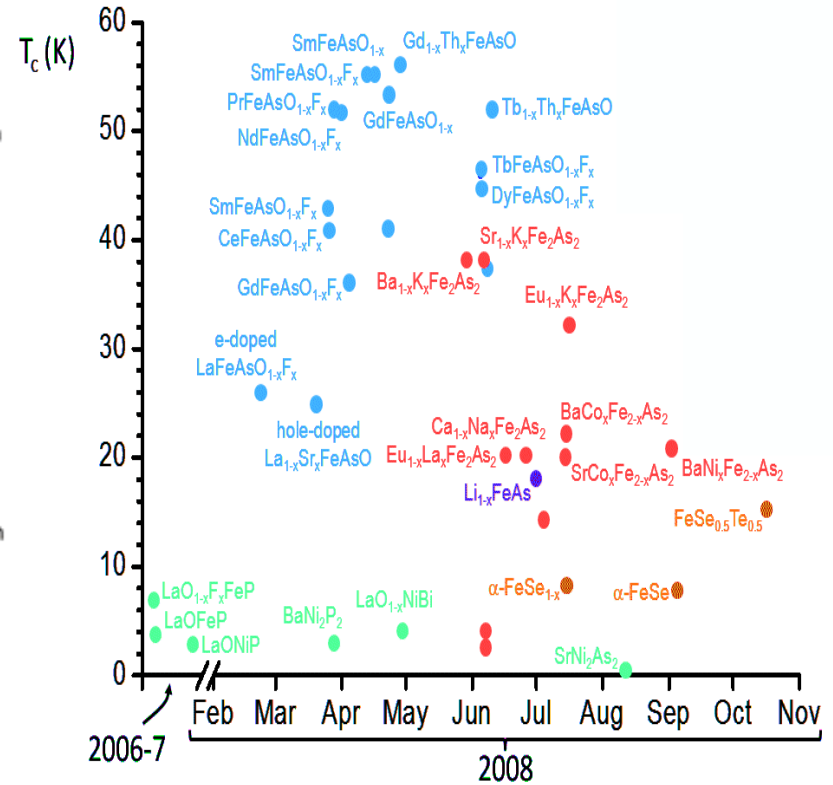
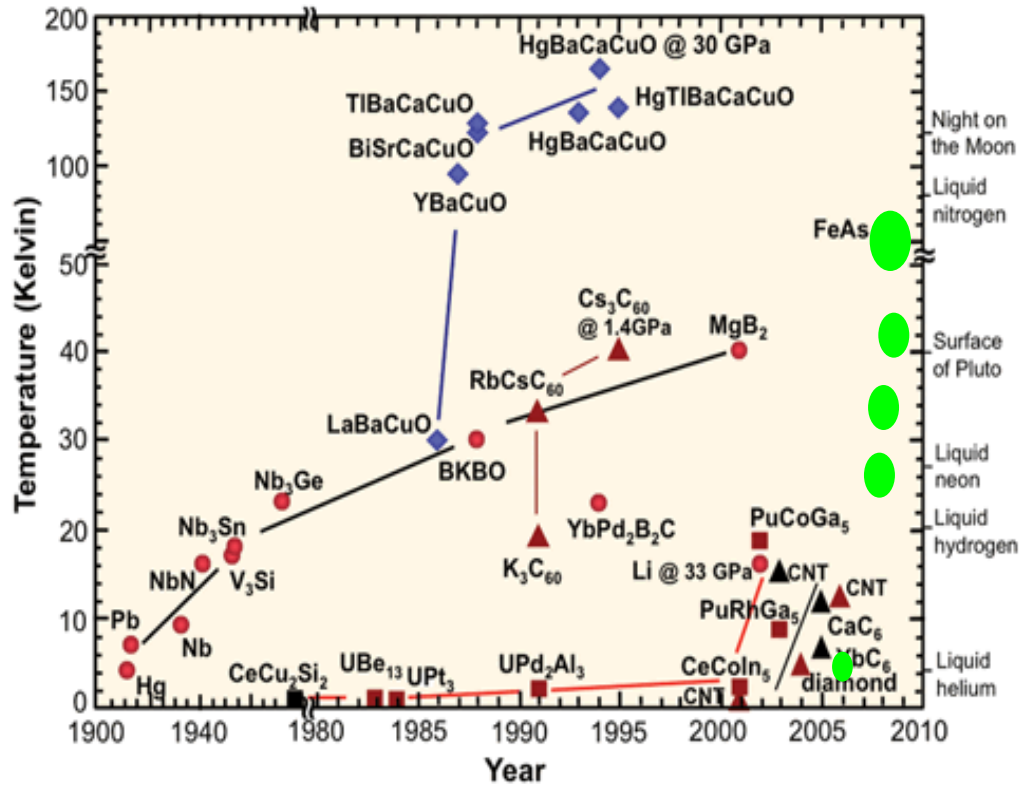


Hideo Hosono

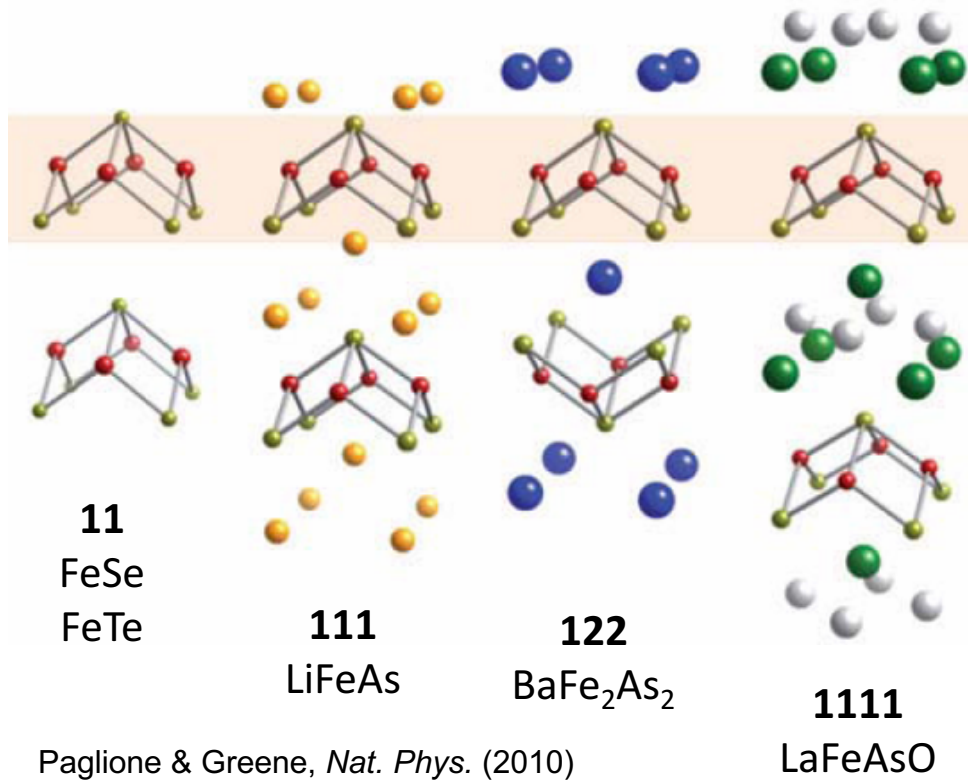
$\text{LaFeAs}(\text{OF})$ ,  $T_c = 26\text{K}$ , up to  $56\text{K}$



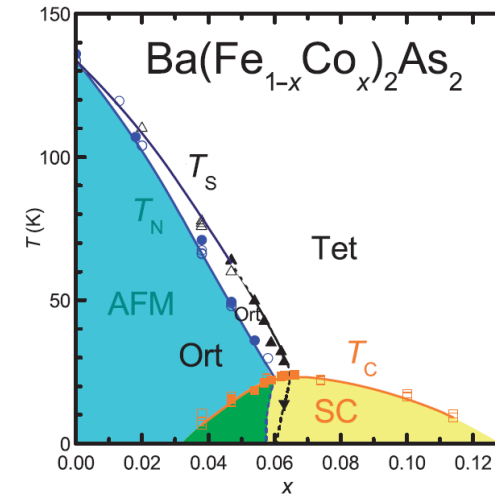
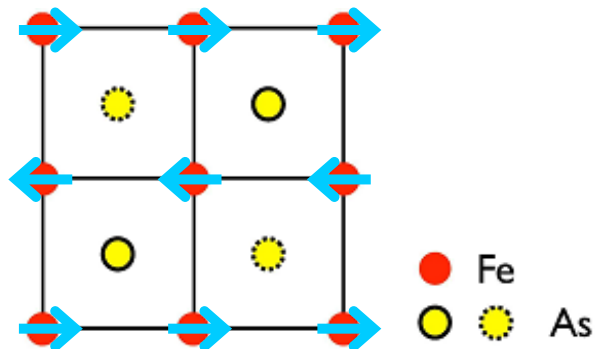
# High-temperature superconductivity, HTSC



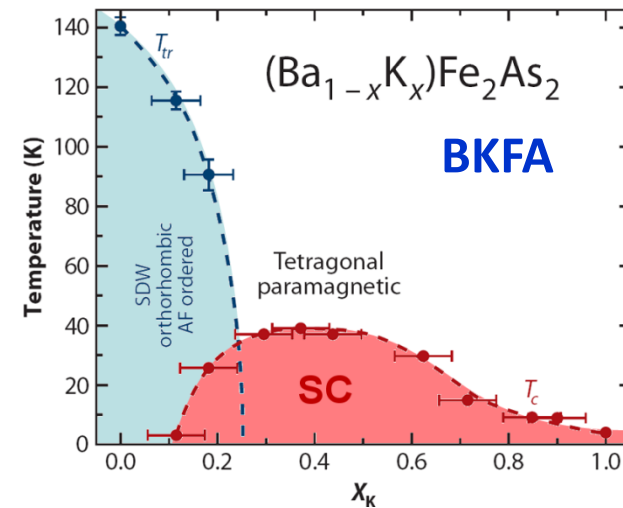
# Iron-based superconductors (FeSC)



Paglione & Greene, *Nat. Phys.* (2010)

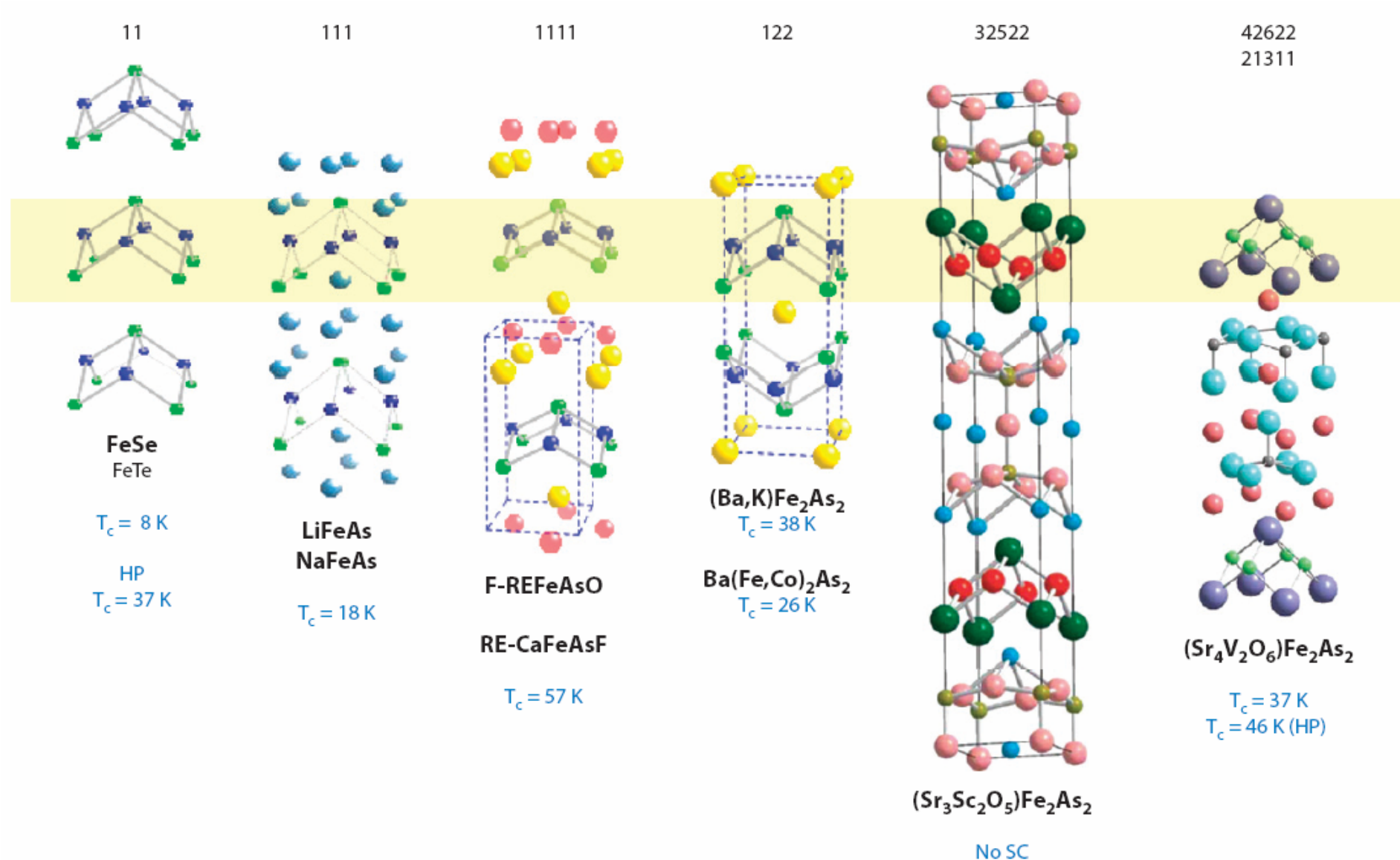


S.Nandi *et al.* [PRL 2010](#)

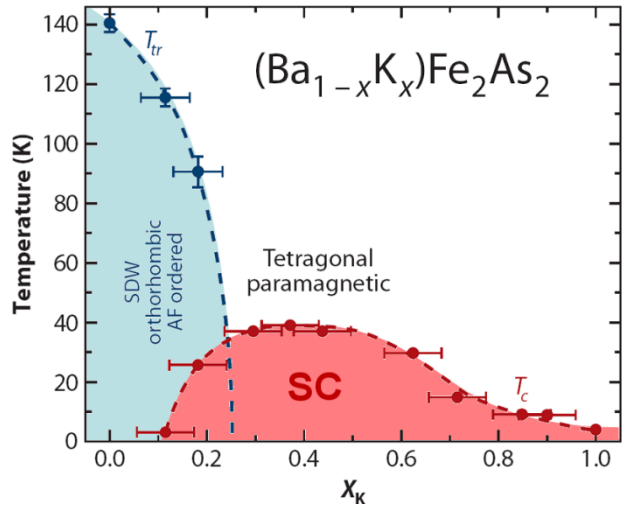


H.-H.Wen & S.Li [Annu. Rev. Cond. Mat. Phys. 2011](#)

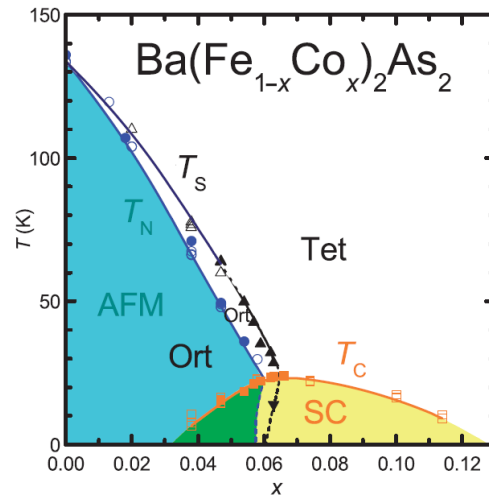
# Iron-based superconductors



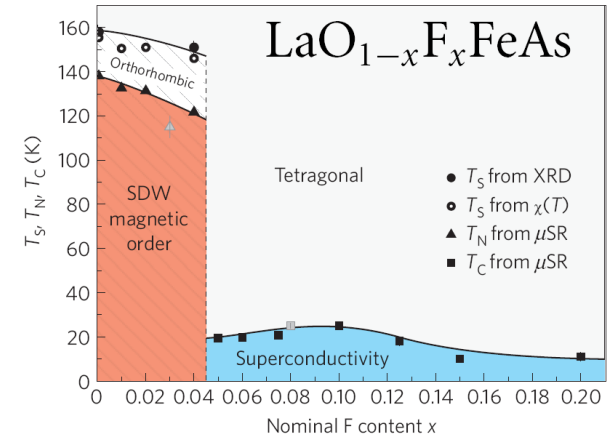
# Phase diagrams



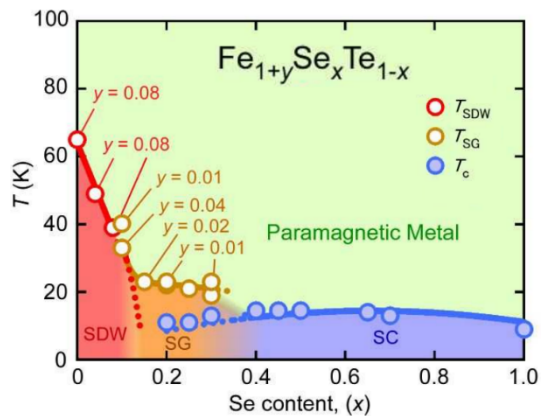
H.-H.Wen & S.Li [Annu. Rev. Cond. Mat. Phys. 2011](#)



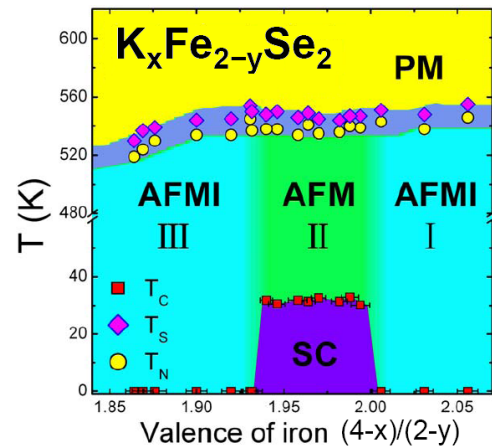
S.Nandi *et al.* [PRL 2010](#)



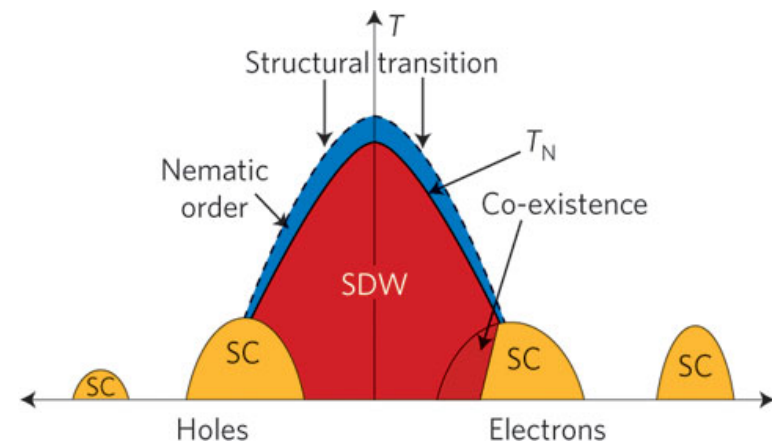
H.Luetkens *et al.* [Nature Mat. 2009](#)



N.Katayama *et al.* [arXiv:1003.4525](#)



Y.J.Yan *et al.* [arXiv:1104.4941](#)



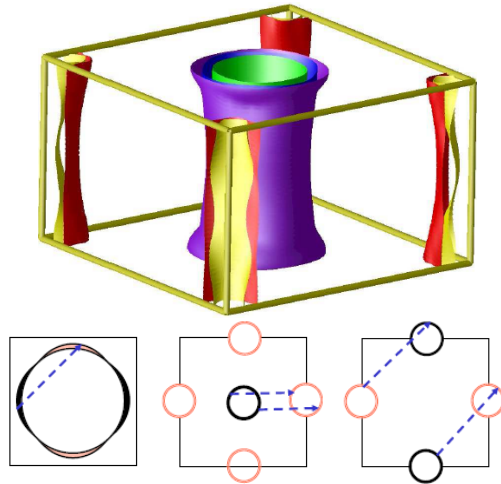
Basov & Chubukov [Nature Phys. 2011](#)

## Non-scientific conclusion

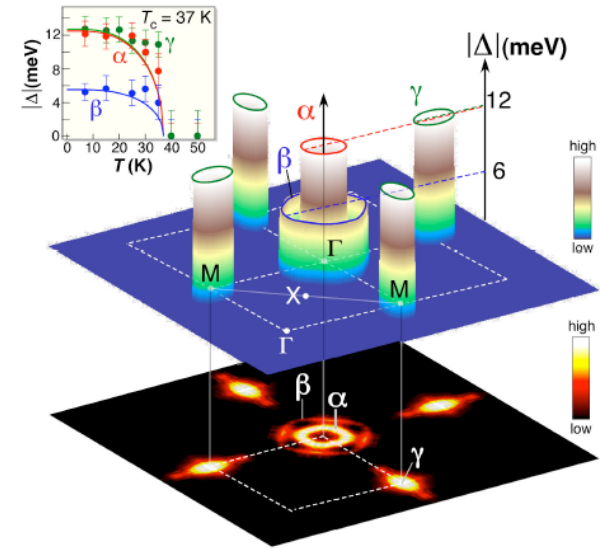
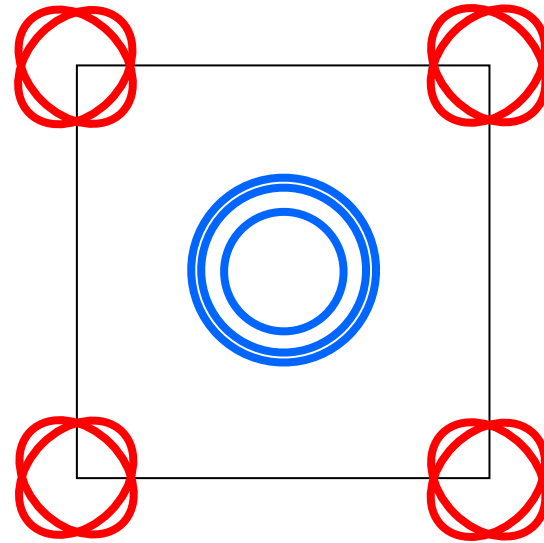
Among many theories of HTSC there is no one to predict new superconductors with higher  $T_c$ 's.

Empirical approaches should be used.

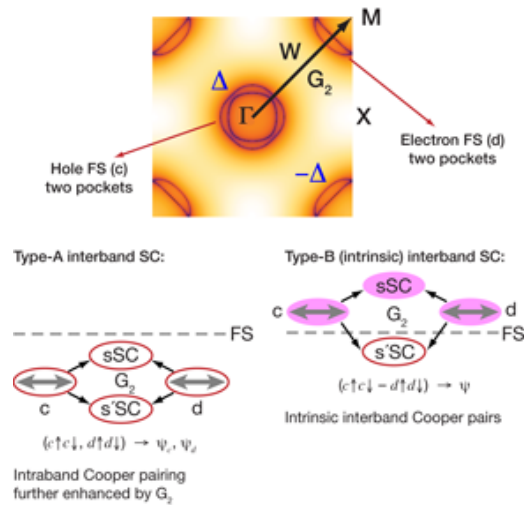
# Поверхня Фермі ВКФА



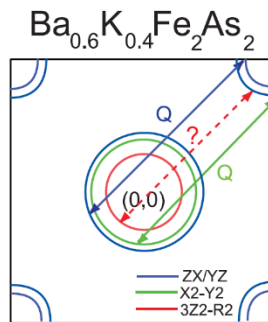
Mazin & Schmalian 2009



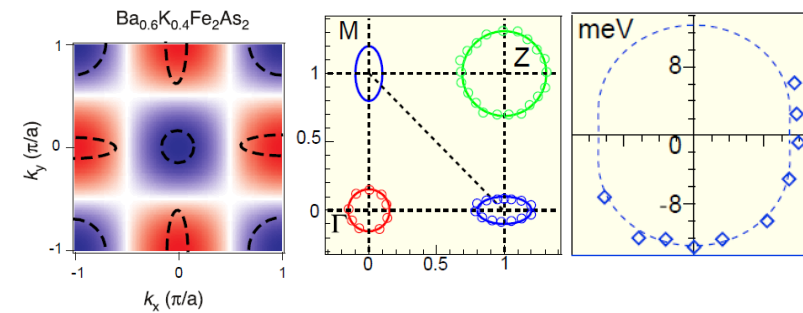
Ding *EPL* 2008



Tesanovic *Physics* 2009



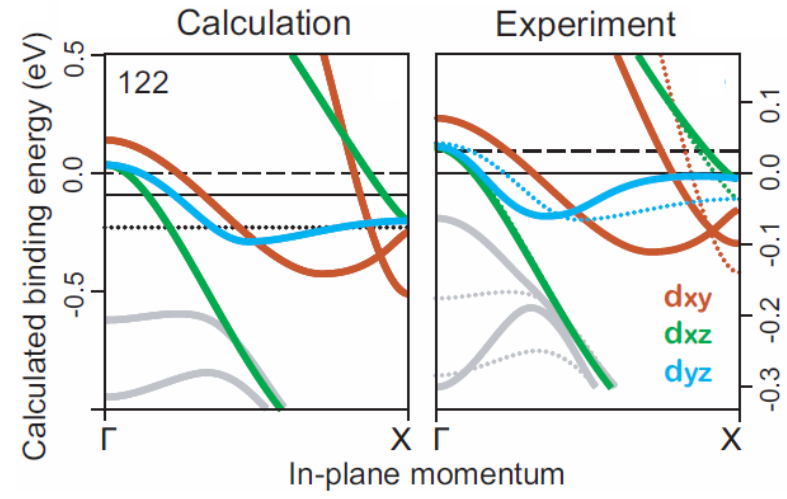
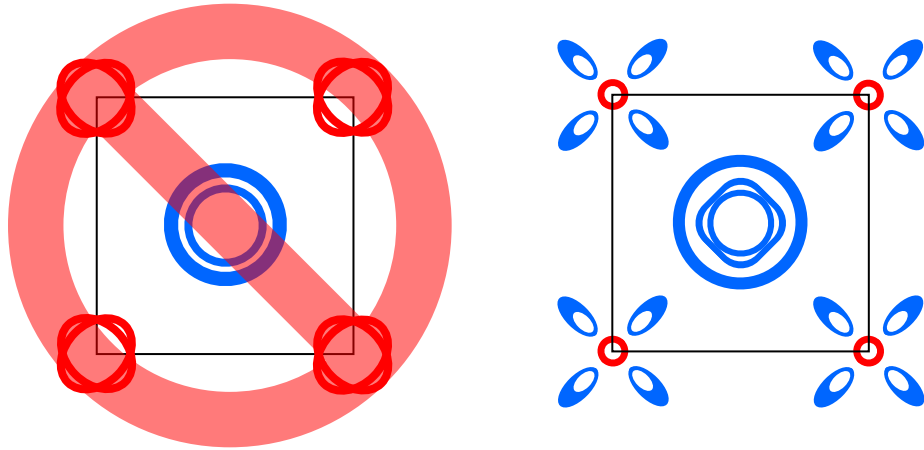
Shimojima *Science* 2011



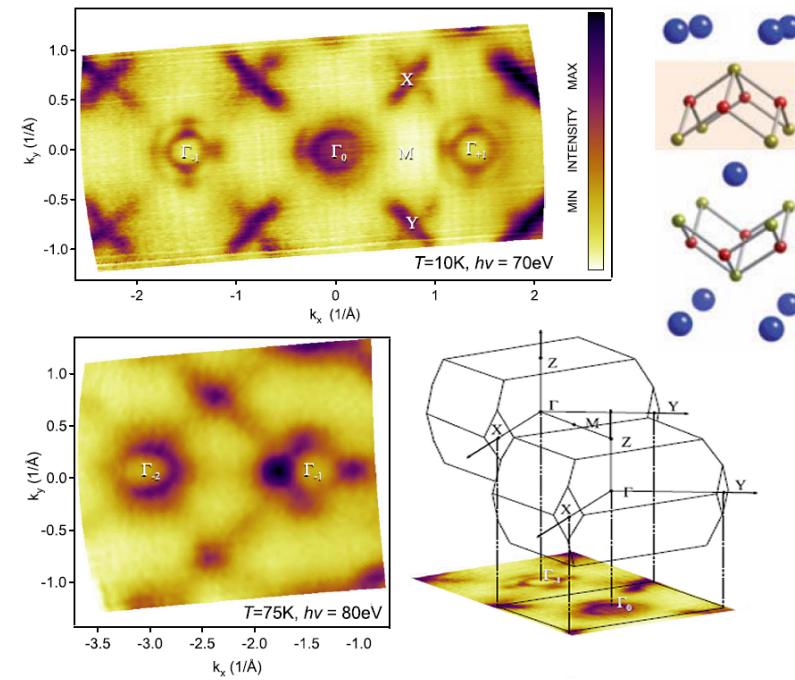
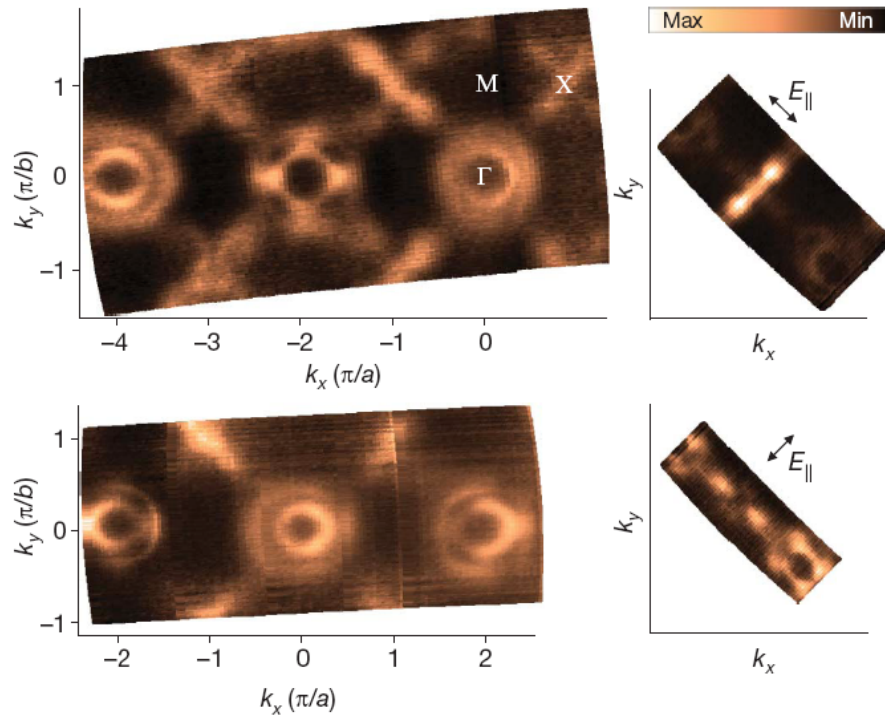
Hu & Ding arXiv:1107.1334



# Поверхня Фермі ВКФА

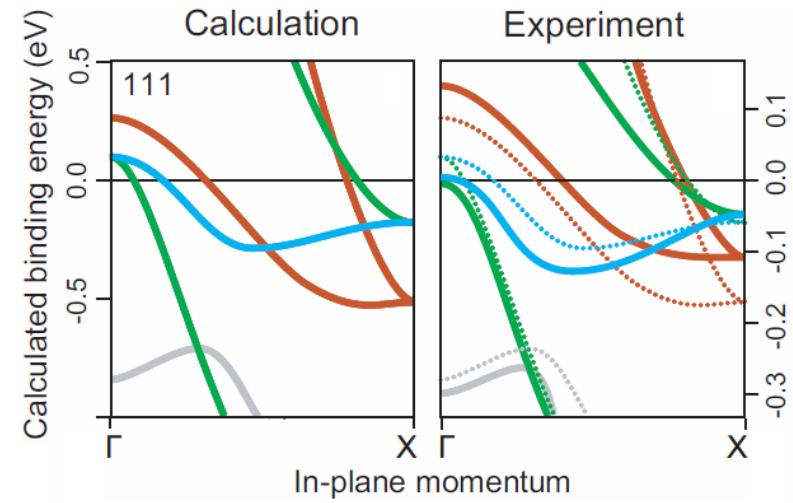
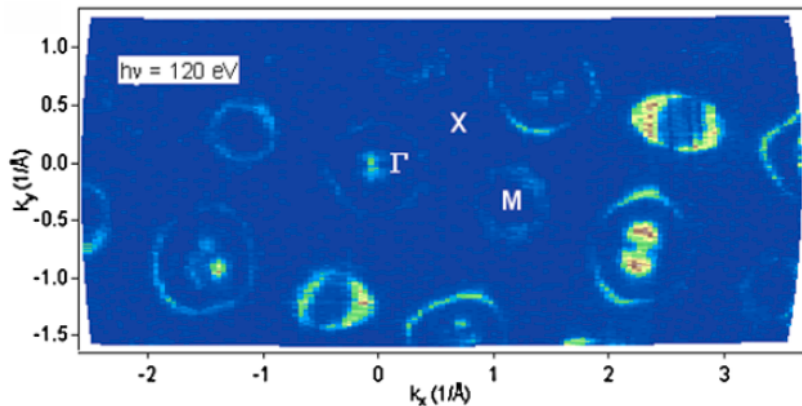
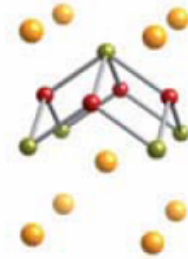
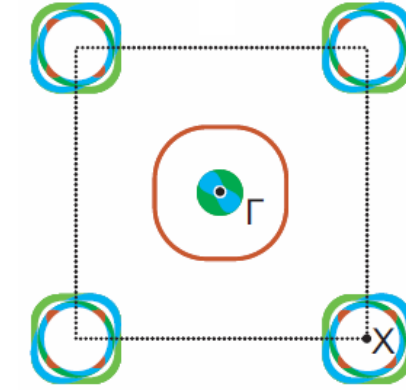
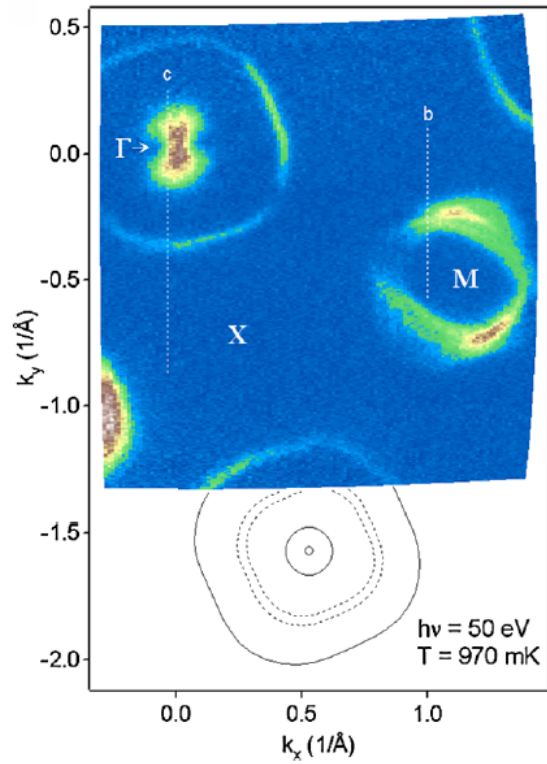


A. A. Kordyuk, *J. Supercond. Nov. Magn.* 2012



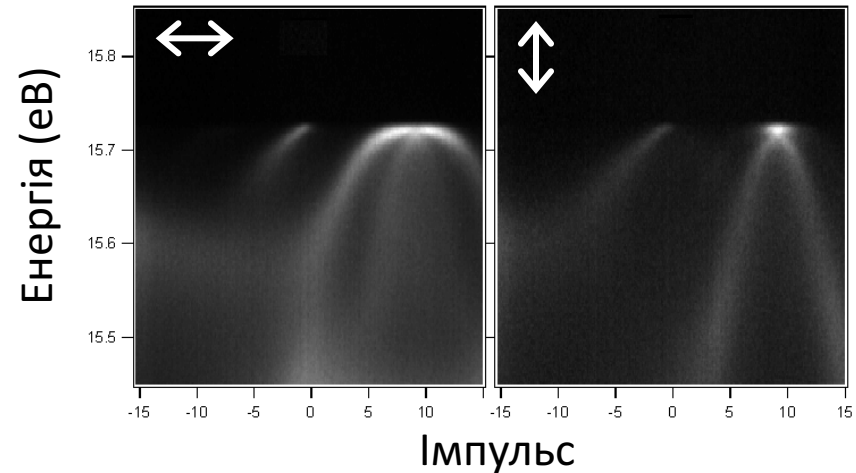
V. Zabolotnyy *Nature* 2009

# Поверхня Фермі LiFeAs



Kordyuk, *J. Supercond. Nov. Magn.* 2012

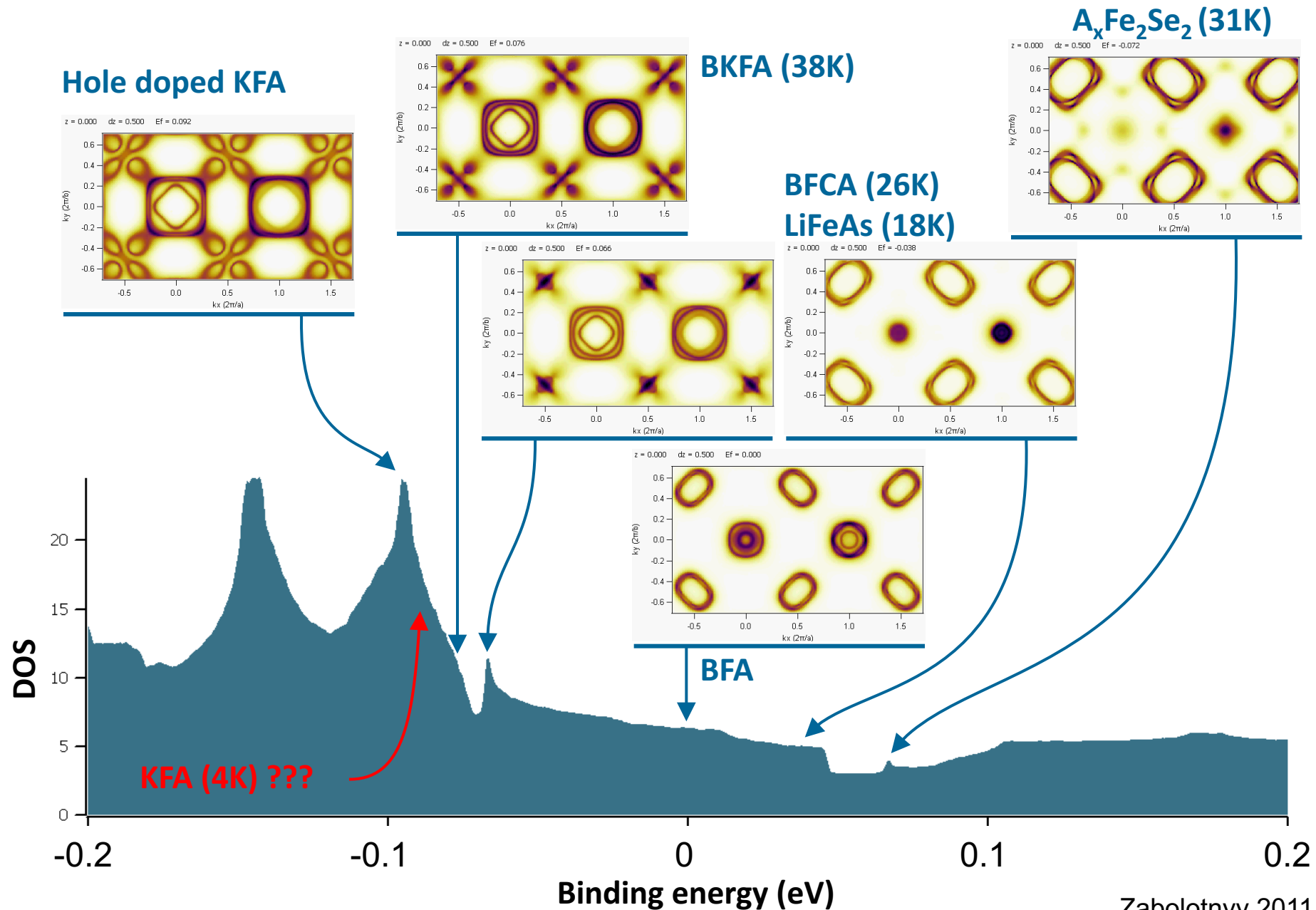
поляризація



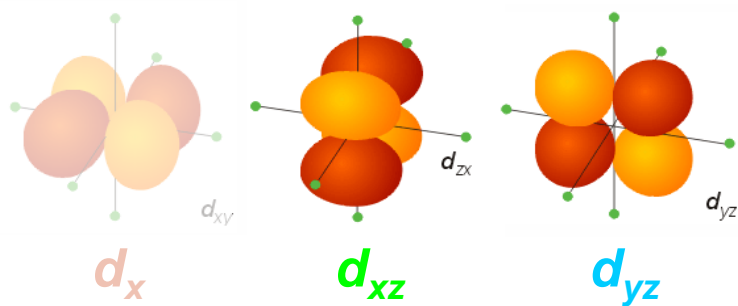
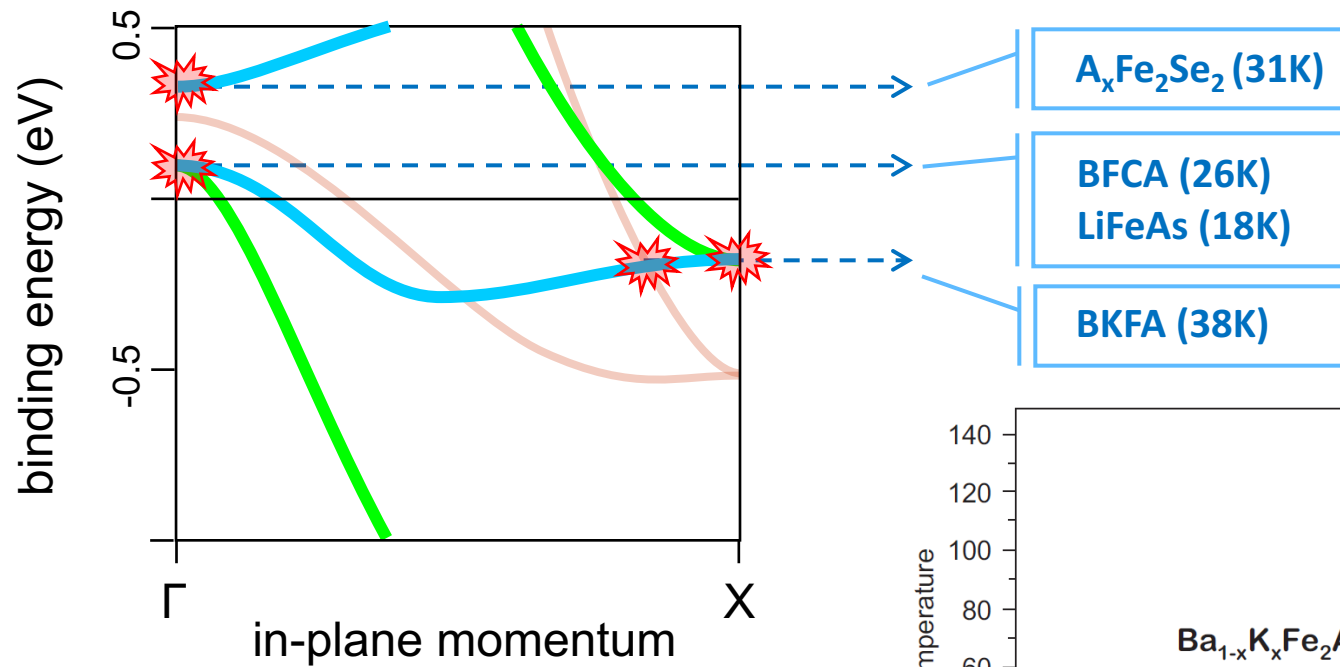
Borisenko *PRL* 2010

Kordyuk *PRB* 2010

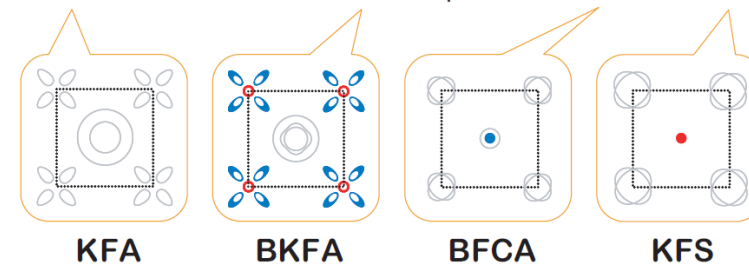
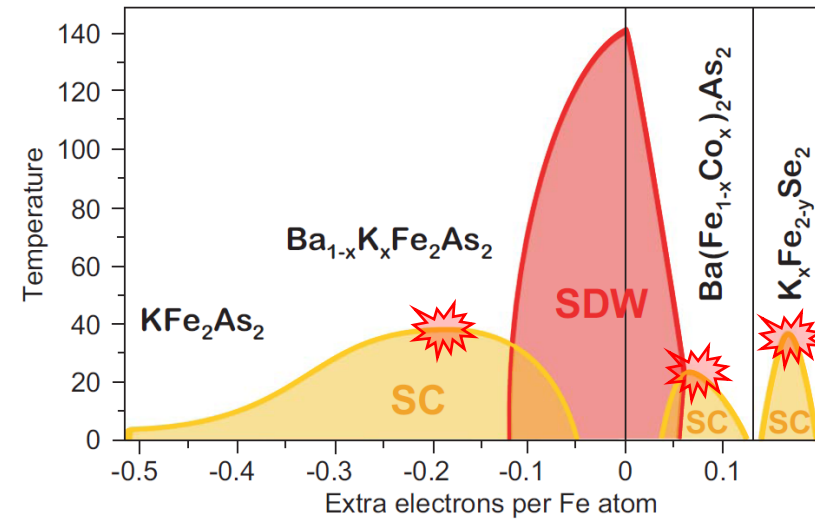
# BFA: density of states



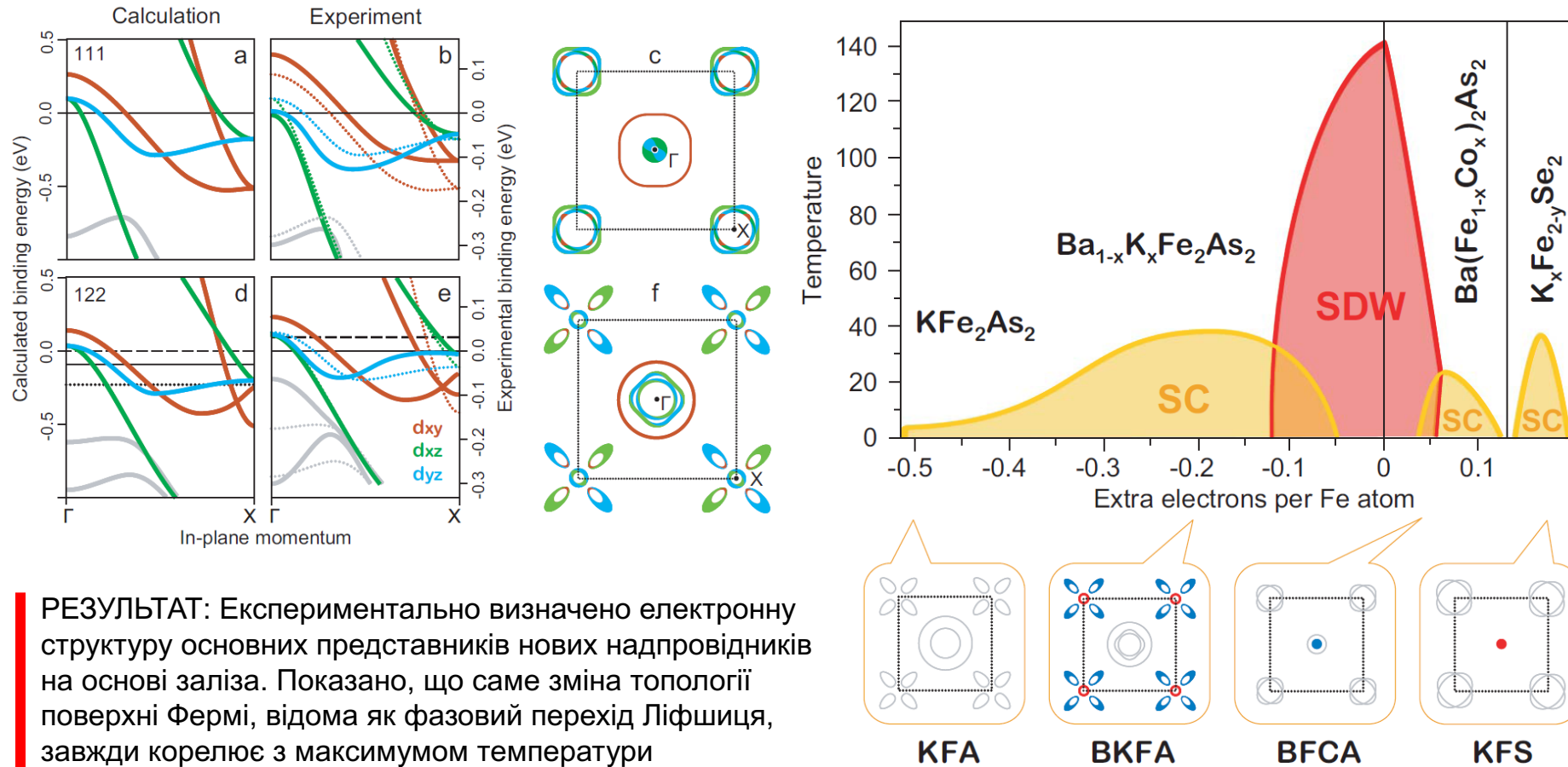
# FeSC: electronic structure and superconductivity



**correlates with SC gap!!! - Daniil**



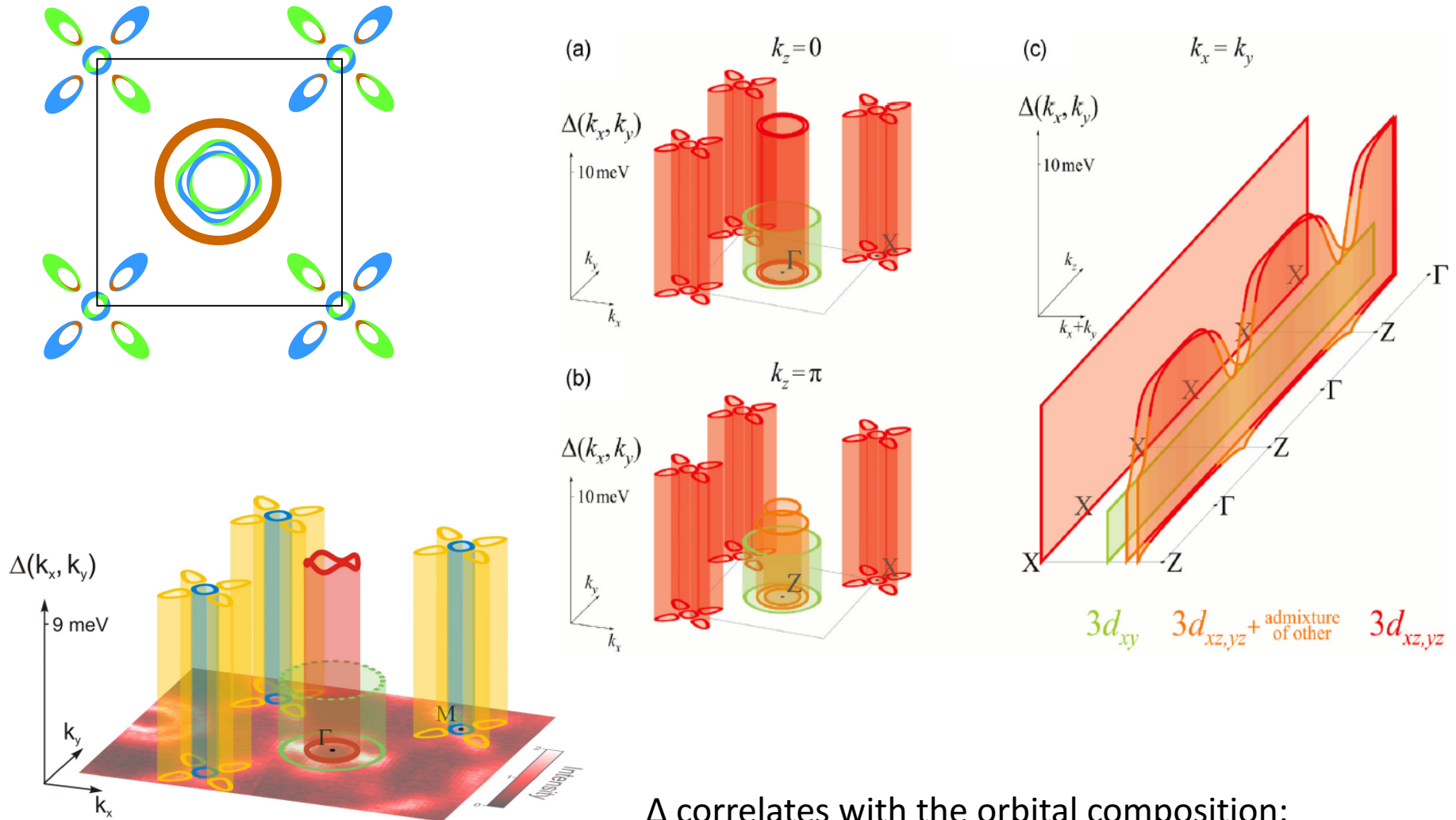
# Електронна структура феро-пніктидів та надпровідність



**РЕЗУЛЬТАТ:** Експериментально визначено електронну структуру основних представників нових надпровідників на основі заліза. Показано, що саме зміна топології поверхні Фермі, відома як фазовий перехід Ліфшиця, завжди корелює з максимумом температури надпровідного переходу.

**ЗАСТОСУВАННЯ:** Виявлення ясного зв'язку між електронною структурою та надпровідністю у феро-пніктидах вказує на новий механізм високотемпературної надпровідності (де ключовими є багатозонність і орбитальні резонанси) та дає емпіричний метод для збільшення температури надпровідного переходу.

# BKFA: Fermi surface and gaps



$\Delta$  correlates with the orbital composition:

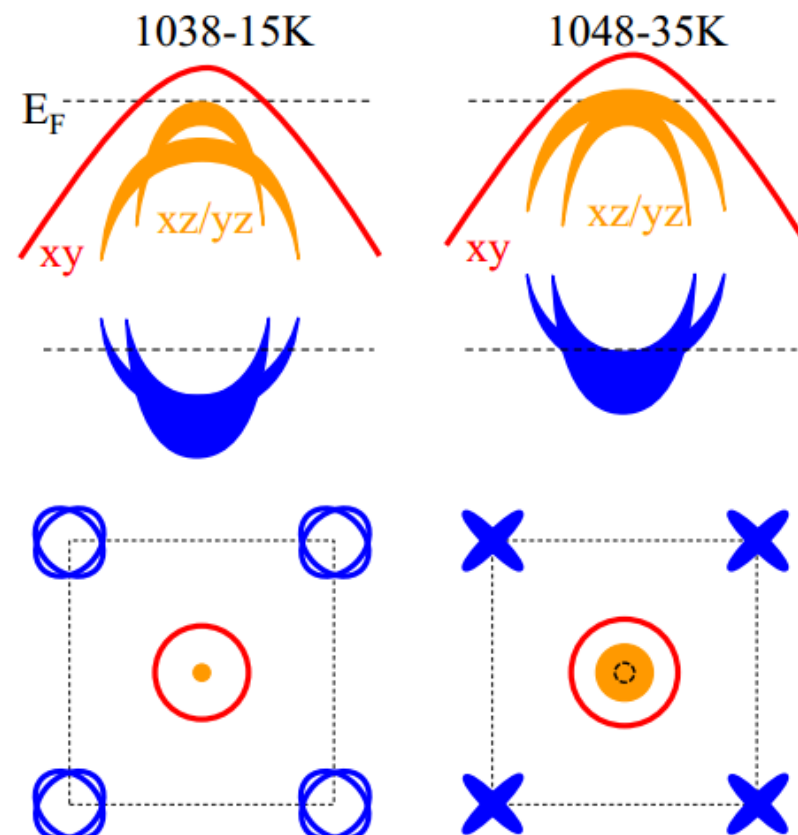
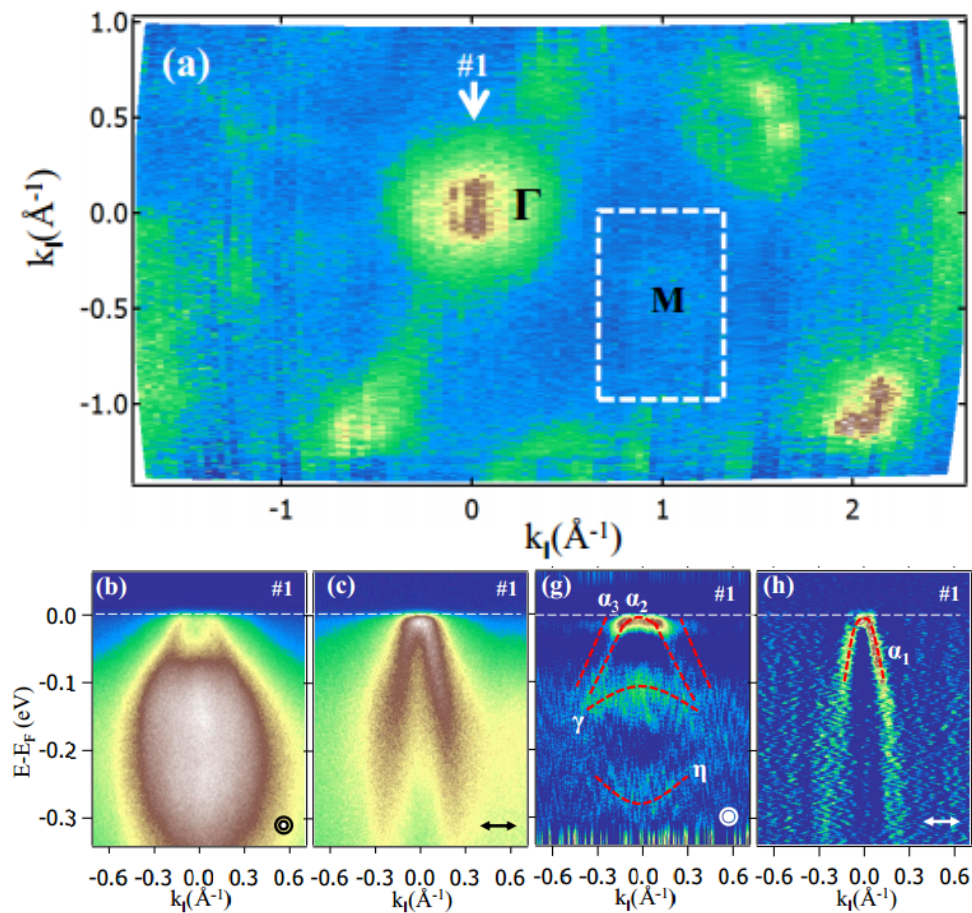
$\Delta = 3\text{--}4\text{ meV}$  for  $3d_{xy}$  and  $3d_{z^2}$

$\Delta = 10.5\text{ meV}$  for  $3d_{xz/yz}$ .

$(\text{CaFe}_{0.95}\text{Pt}_{0.05}\text{As})_{10}\text{Pt}_3\text{As}_8$   
 $(\text{CaFeAs})_{10}\text{Pt}_{3.58}\text{As}_8$

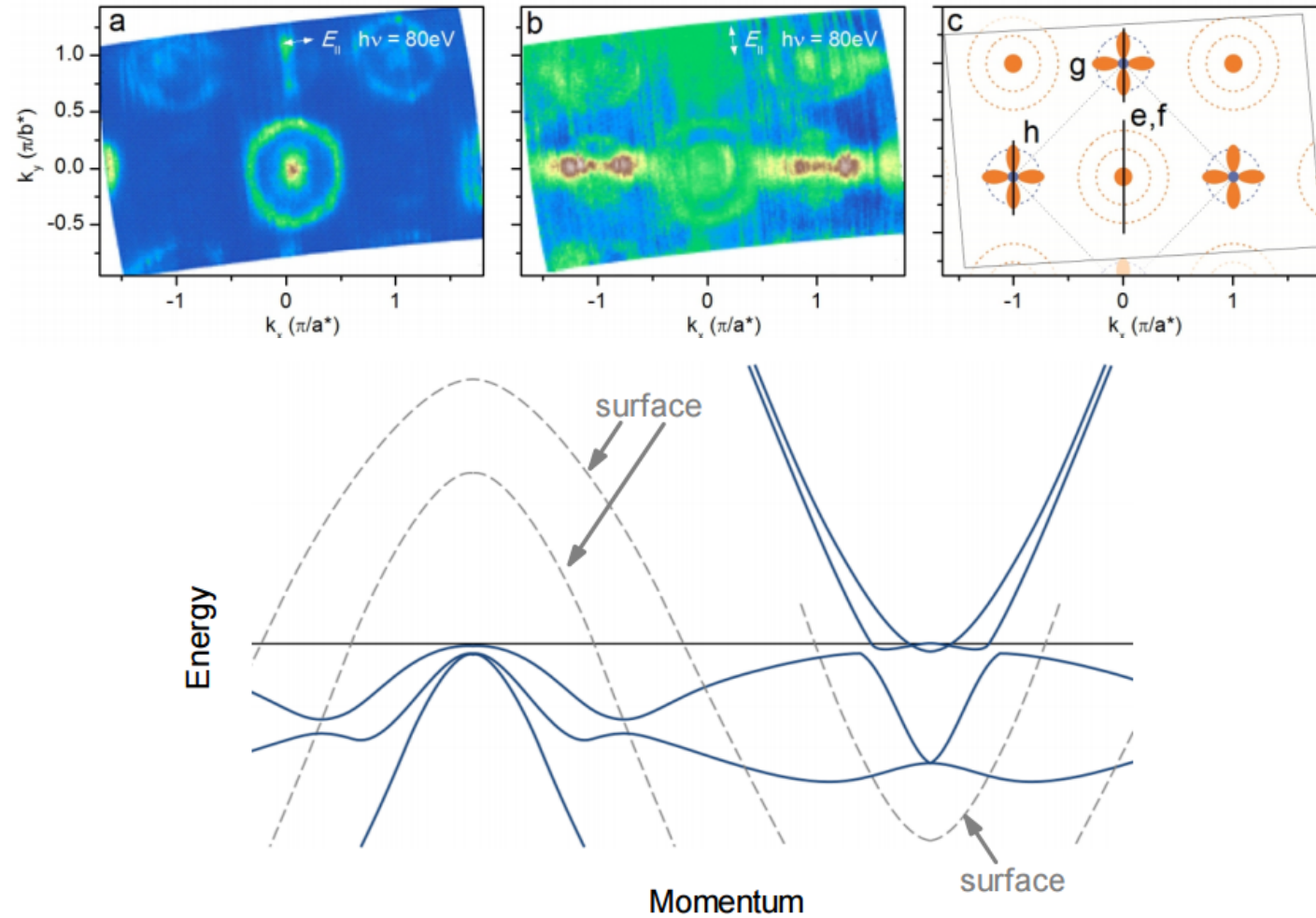
“10 3 8” – 15K

“10 4 8” – 35K



# 1111

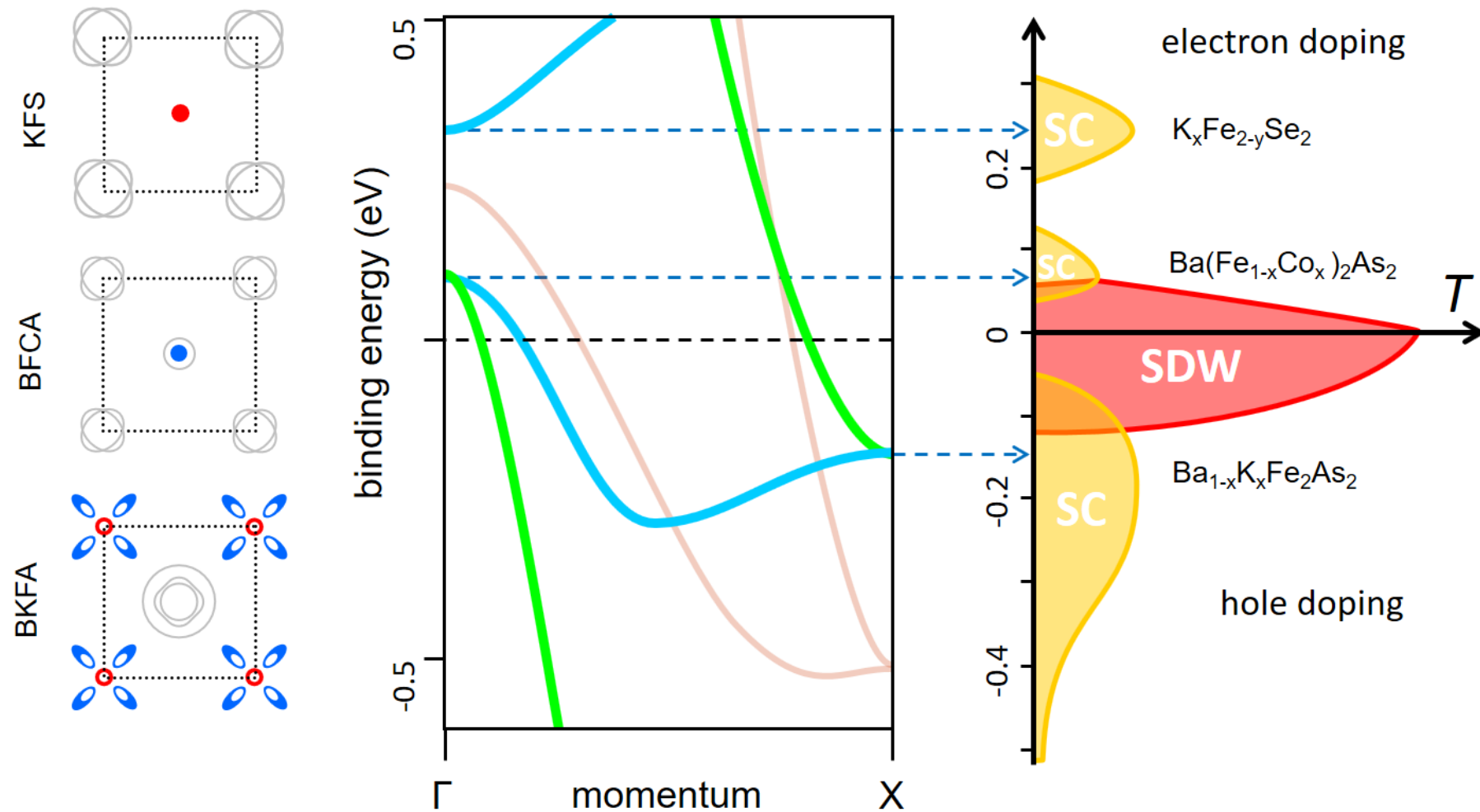
LaFeAsO-type materials  $\text{SmFe}_{0.92}\text{Co}_{0.08}\text{AsO}$





- The band structure of Fe-SC is well captured by LDA but do not take it too literally. The calculated Fermi surface is usually bad starting point for theory.
- $T_c$ 's for different compounds *almost 100%* correlate with the position of the Van Hove singularities (Lifshitz transitions) for the xz- and yz-bands.

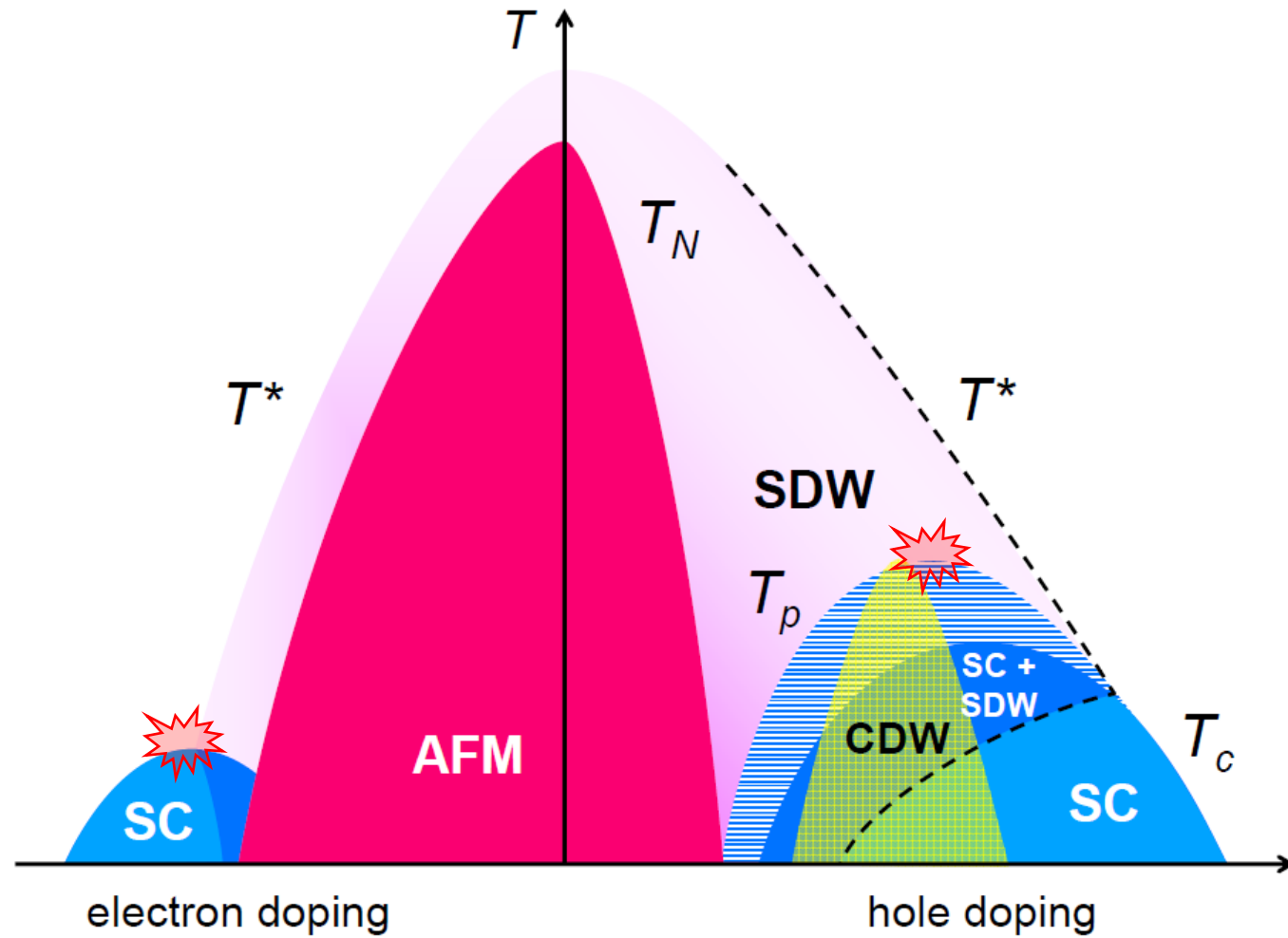
# "Topological" superconductivity in Fe-SC



LTP 38, 888 (2012); JSNM 26, 2837-2841 (2013); PRB 88, 134501 (2013);  
PRB 89, 064514 (2014), [LTP \(2018\)](#)...

**back to  
HTSC cuprates**

# "Topological" superconductivity in Cu-SC



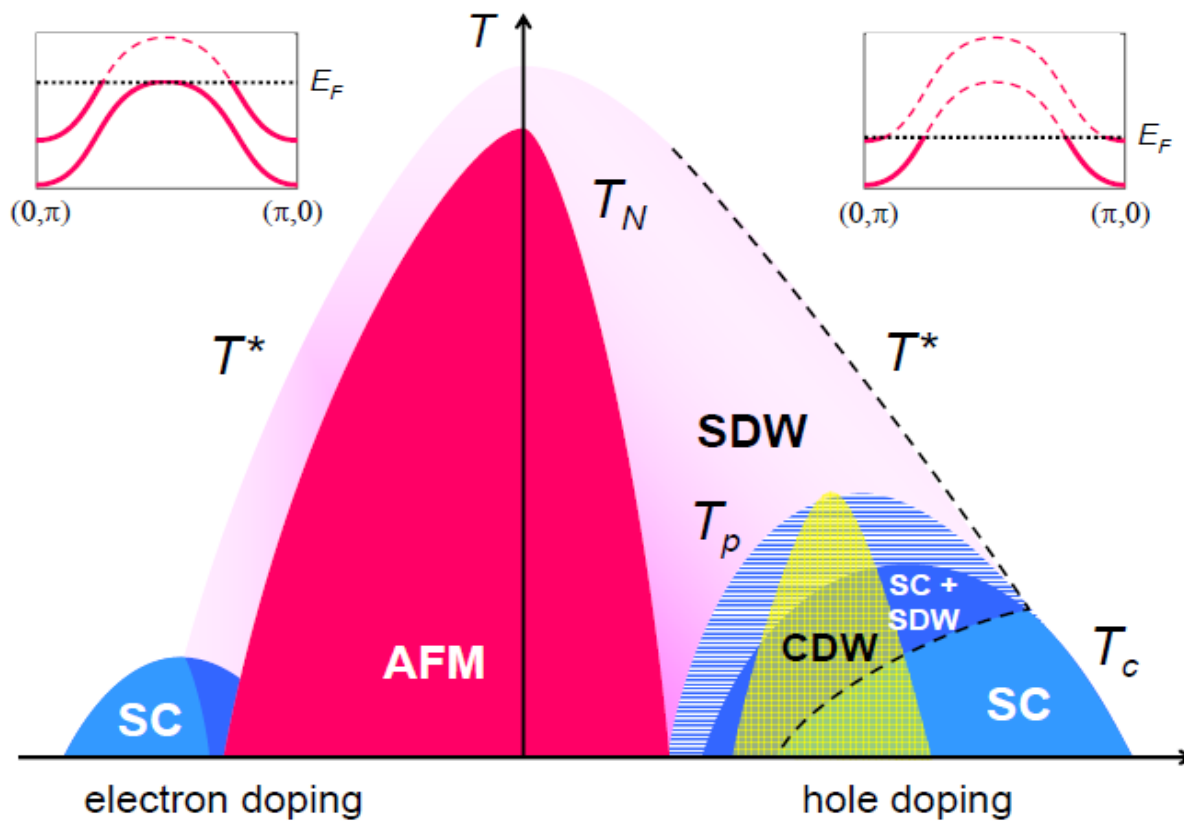
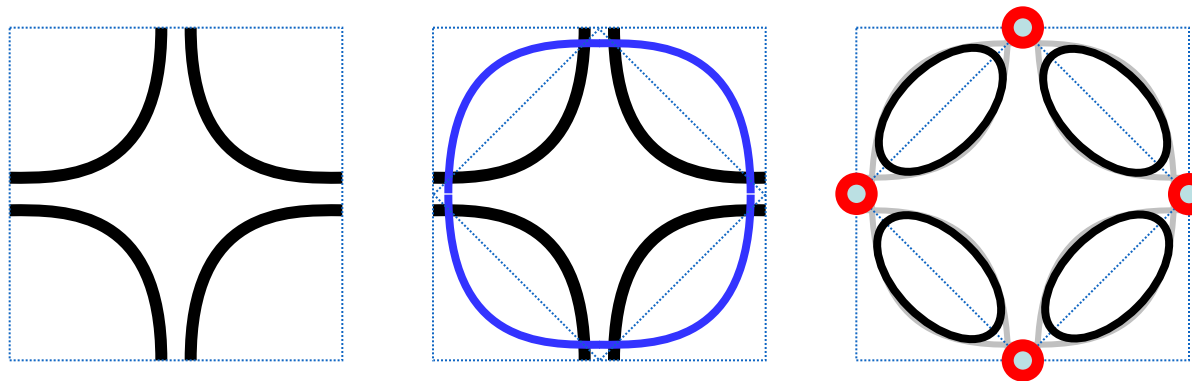
# Pseudogap in cuprates

There are at least **three** mechanisms that form the pseudogap in the hole doped cuprates:

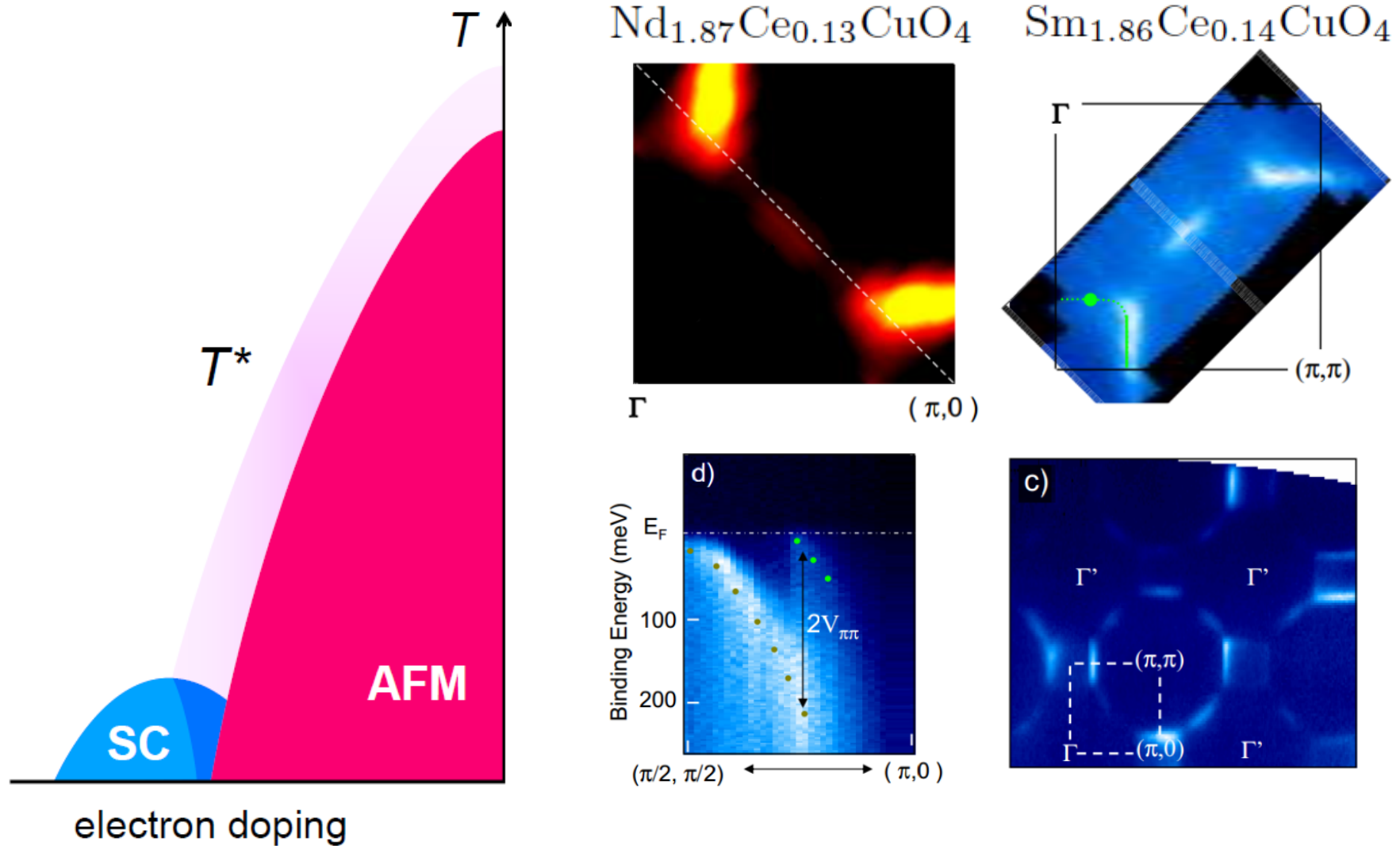
- 1 the preformed pairing;
- 2 the incommensurate CDW due to nesting of the straight parallel Fermi surface sections around  $(\pi,0)$  and  $(0,\pi)$ ;
- 3 **SDW** which is **dominant** constituent of the pseudogap associated with  $T^*$  and is either causing or caused by the Mott localization.

These phases occupy different parts of the phase diagram and gap different parts of the Fermi surface competing for it.

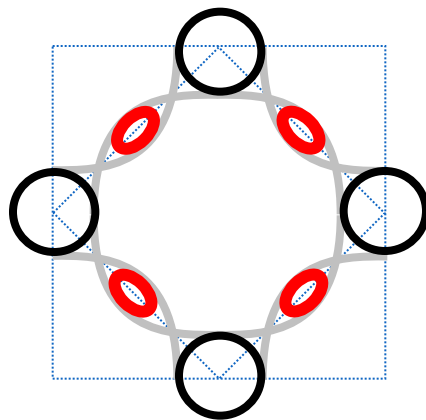
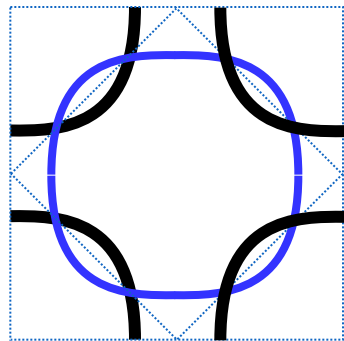
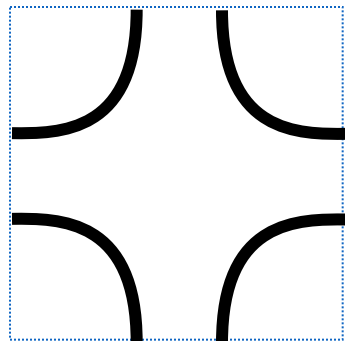
# VHS nesting



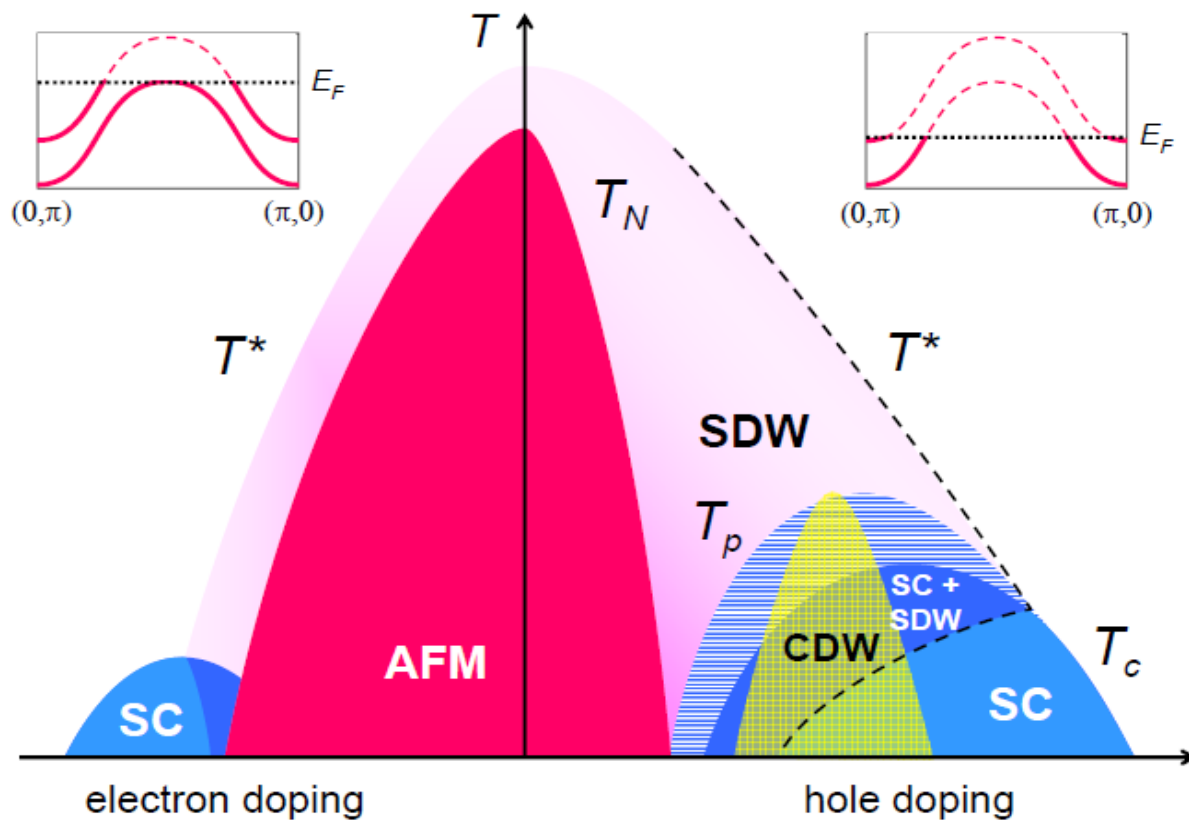
# SDW in electron-doped cuprates



H. Matsui et al., *PRL* **94**, 047005 (2005)  
S. R. Park et al., *PRB* **75**, 060501 (2007)



Nodal nesting

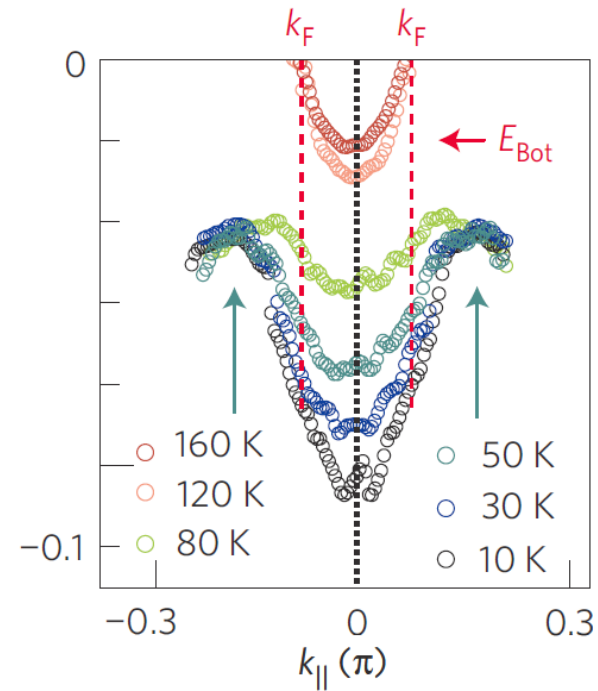
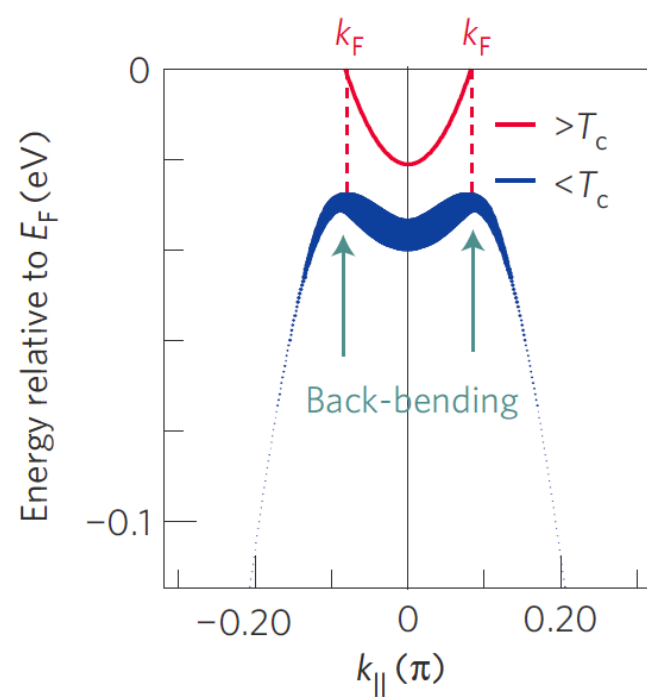
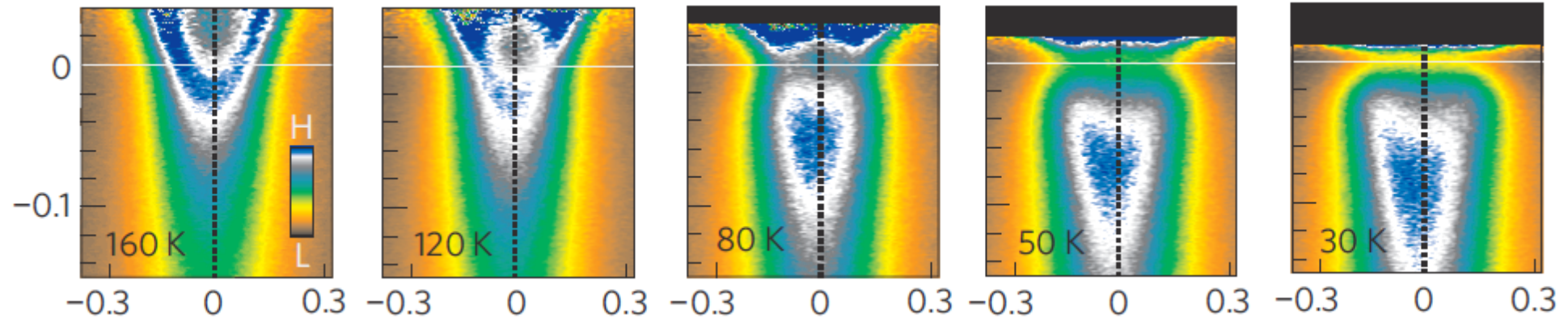




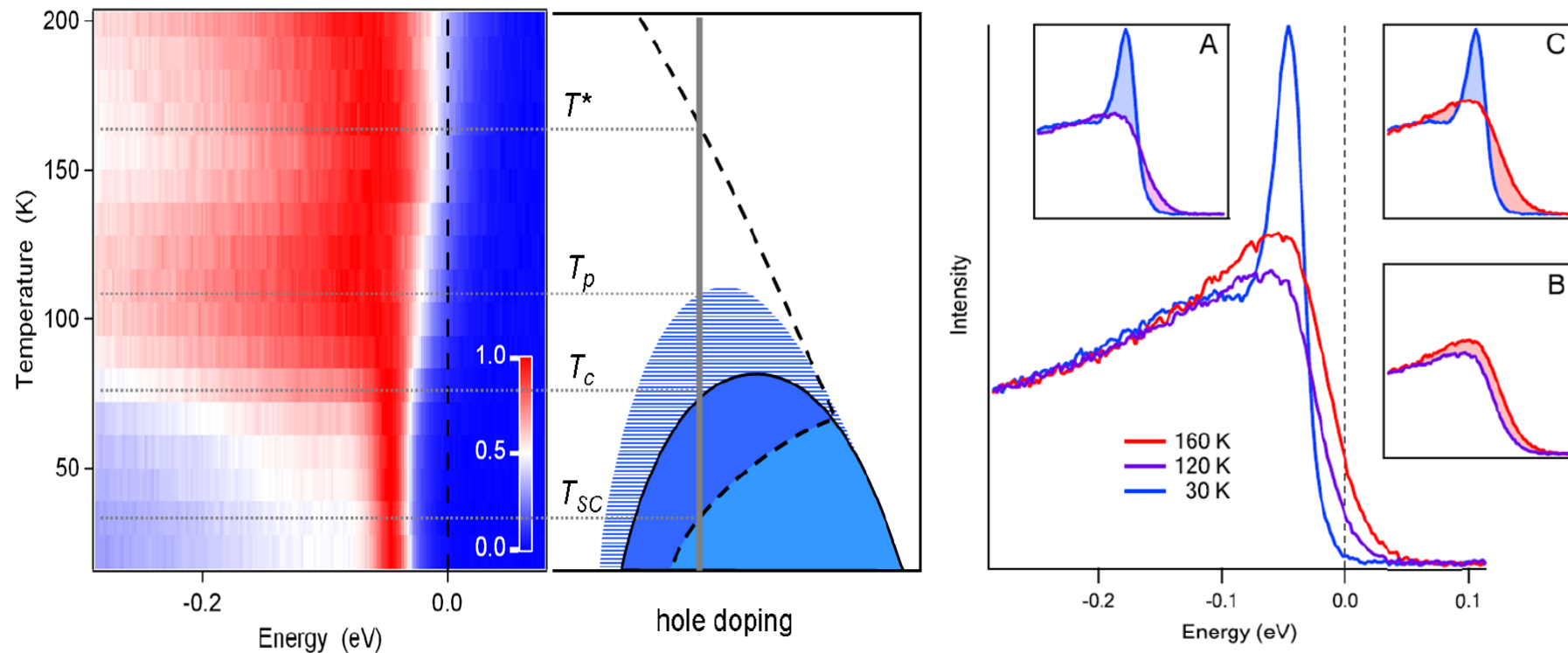


# $(0,\pi)$ SDW

Pb-Bi2201  $T_c = 34$  K,  $T^* = 125$  K



# Pseudogap in cuprates



Temperature evolution of the hot spot EDC for underdoped BSCCO ( $T_c = 77$  K).

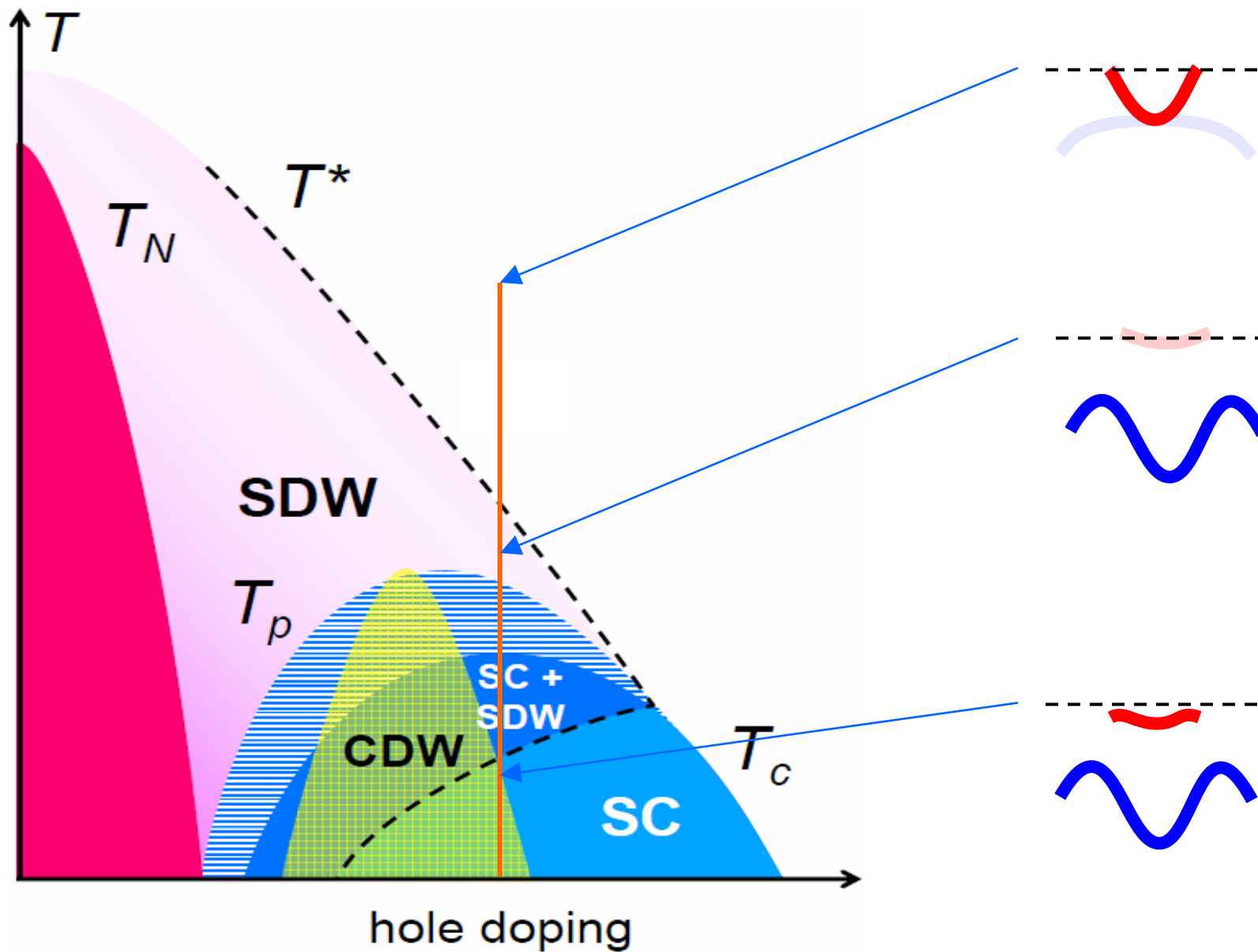
$T^*$  - the pseudogap starts to increase rapidly, the spectral weight starts to decrease;

$T_p$  - the spectral weight starts to increase;

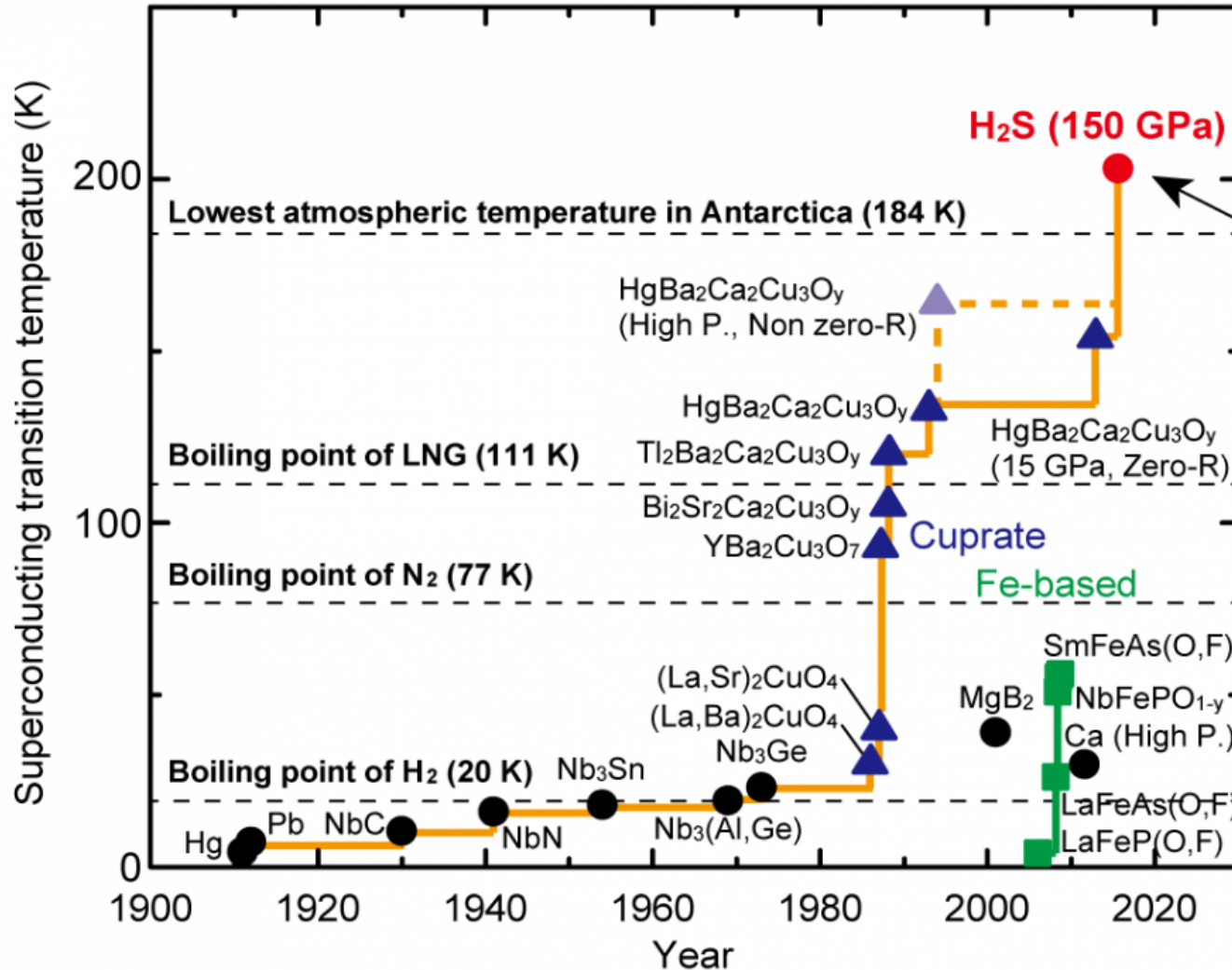
$T_c$  - the superconducting gap opens, the spectral weight continues to increase up to  $T_{SC}$ .

The examples of non-normalized EDC's at 160 K, 120 K, and 30 K (right) illustrate the spectral weight evolution.

# Pseudogap in hole-doped cuprates



# Фундаментальна проблема: механізм ВТНП



H<sub>2</sub>S: T<sub>c</sub> >200 K @  
>150 GPa

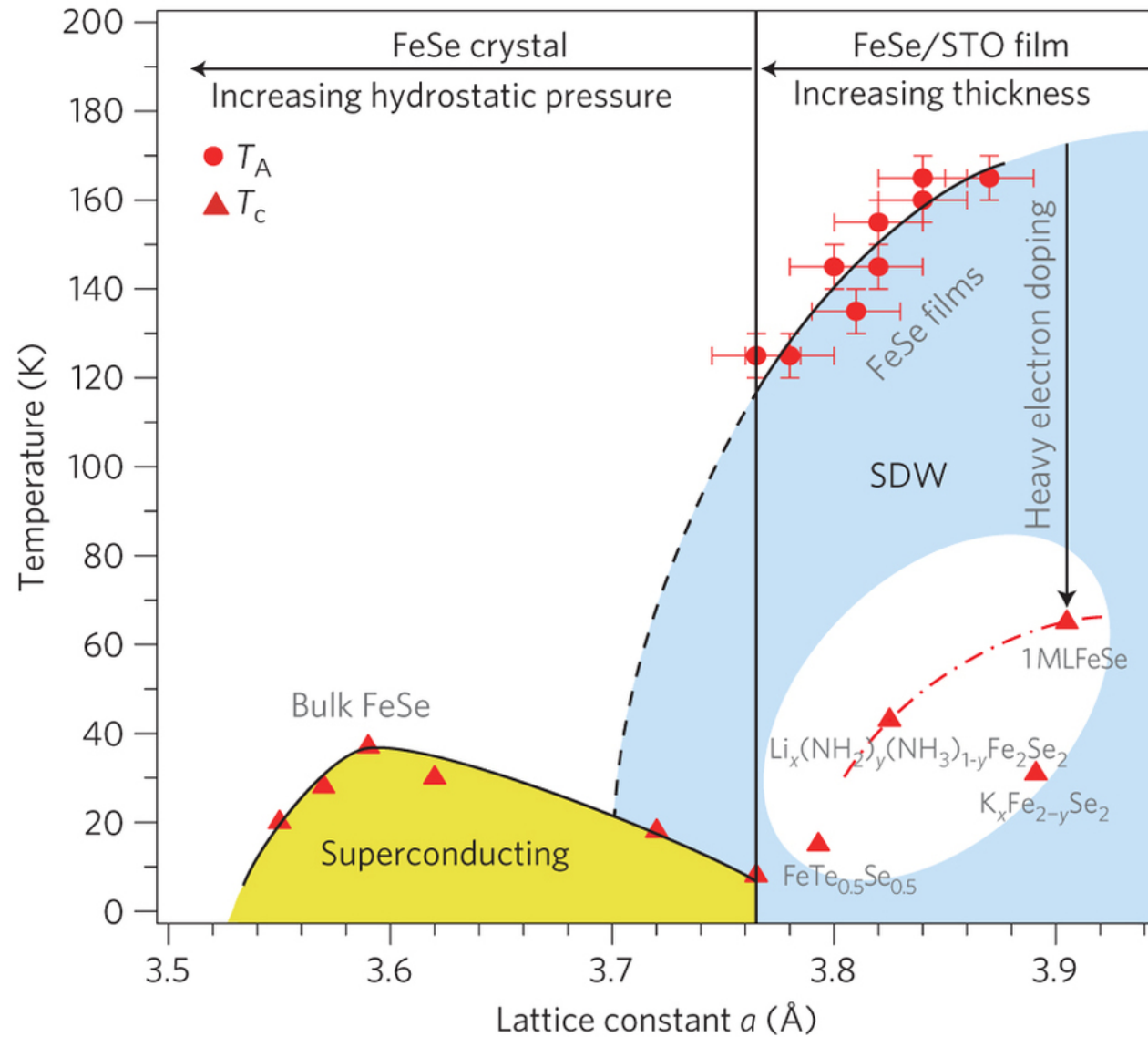
Інтерфейсна  
надпровідність

UC FeSe on SrTiO<sub>3</sub>  
65-100 K

FeSe @ 7 GPa 37 K

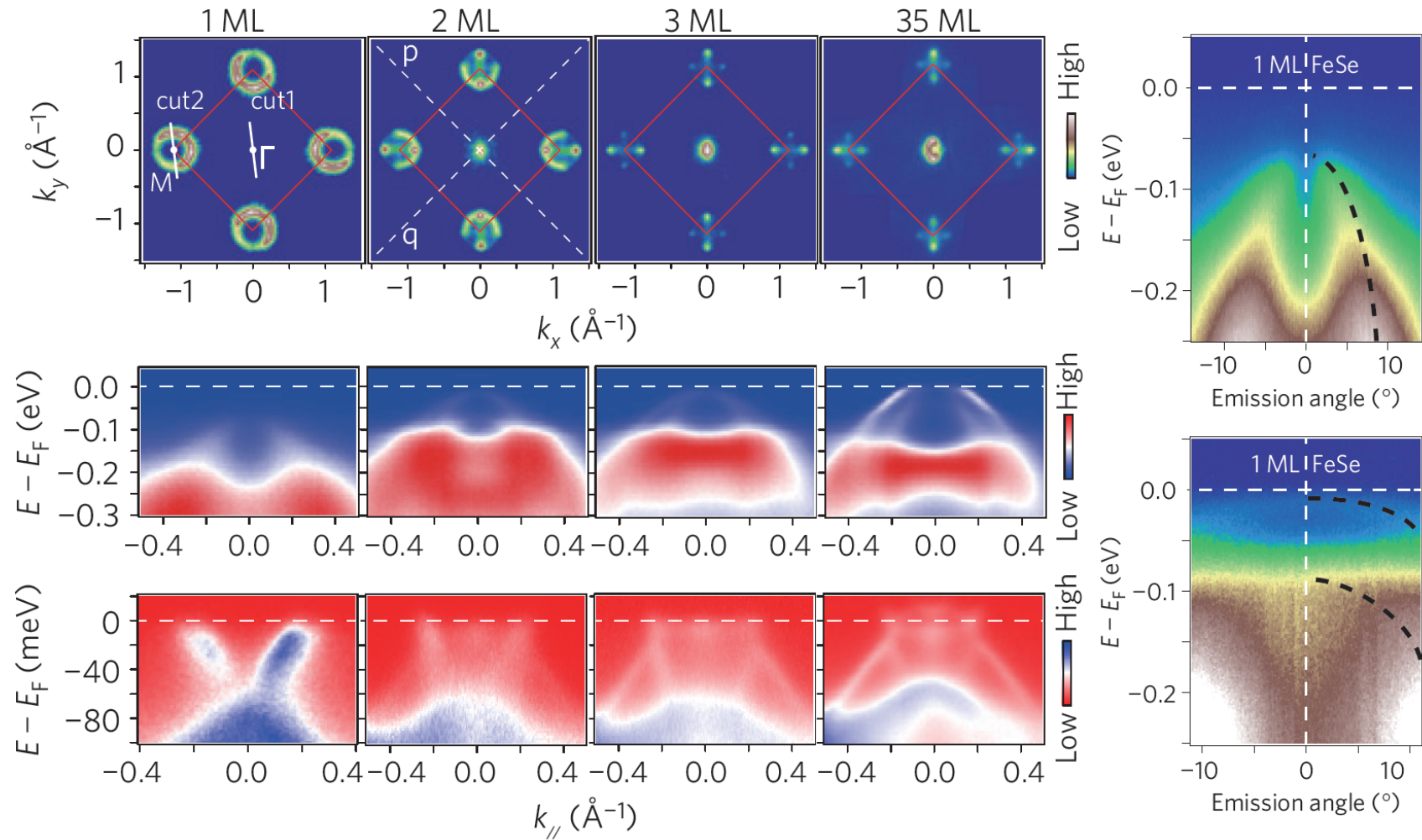
FeSe 9 K

# Інтерфейсна надпровідність

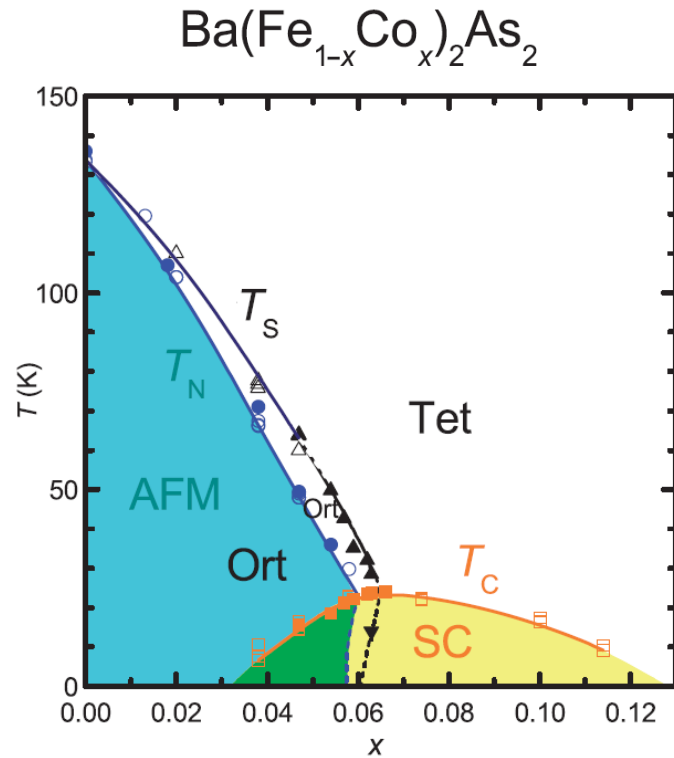


FeSe

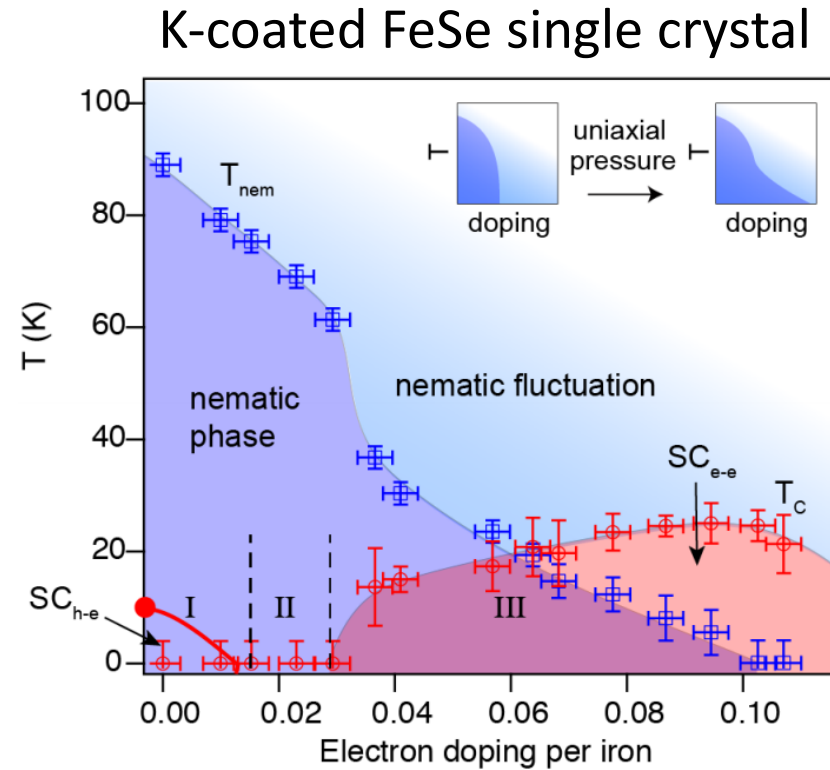
# FeSe



# Temperature developed circuits



Nandi [PRL 2010](#)



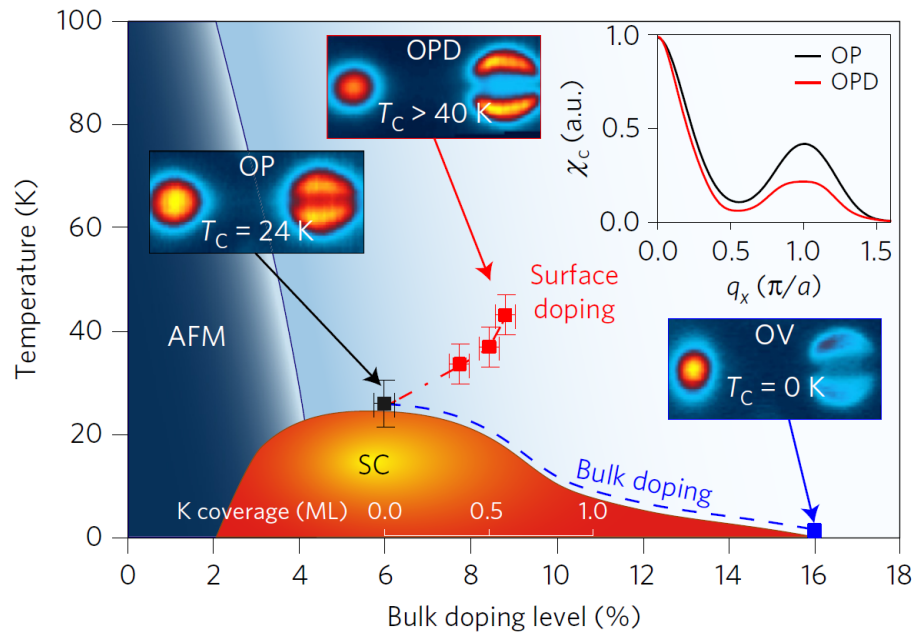
Ye [arXiv:1512.02526](#)



# Temperature developed circuits

## Enhanced superconductivity in surface-electron-doped $\text{Ba}(\text{Fe}_{1.94}\text{Co}_{0.06})_2\text{As}_2$

Kyung, *Nature Materials* (2016)



## High-temperature superconductivity in K-coated multilayer FeSe thin films

Miyata *Nature Materials* (2015)

