Les nouveaux supraconducteurs à base de Fer

Thierry Klein Institut Néel, CNRS & Université J.Fourier, Grenoble







"TetraFer2009"

1

2006 groupe du Pr. Hideo Hosono "Iron-Based Layered Superconductor : LaOFeP" (Y.Kamihara et al.) mais cette découverte reste "confidentielle" ($T_c \sim 6K$) jusqu'en... ...2008 en remplaçant P par As \Rightarrow les pnictides

des dizaines de nouveaux composés virent le jour en quelques mois !

(Gd,Th)(O,F)FeAs : **56K**



Les différentes structures cristallographiques

Compétition supraconductivité - magnétisme

Symétrie du (des) gap(s)

Champs critiques supérieurs

Piégeage & fluage des vortex

Longueur de pénétration : brisure des paires

Phase - IIII (Kamihara et al., Takahashi et al.) La(O,F)FeAs ~ 26K à (Gd,Th)(O,F)FeAs ~ 56K



structure cristallographique

Phase - I 22 (Rotter et al.)
dopage en trous (Ba,K)Fe₂As₂ ~ 36K
ou en électrons Ba(Fe,Ni/Co)₂As₂ ~ 24K
substitution isovalente BaFe₂(As,P)₂ ~ 30K



Phase - III (Tapp et al.) Li1-yFeAs ~ 18K

ou des des réservoirs de charges plus complexes (Shirage, Parasharam et al.) Phases - 32522, 42622 ~ 30K



Phase - II : $Fe_{I+\epsilon}(Se_{x}Te_{I-x})$

pas de As mais un chalcogène pas de bloc réservoir T_c ~15K (x~0.5) à pression ambiante (Sales et al.) et ~ 35K at 7GPa (x=1) (Garbarino et al.)





AyFe_{2-x}Se₂ A=K,Rb,Cs,...

propriétes très **différentes** de celles exposées dans la suite T_c ~ 33K (Guo et al) composé non dopé (y=0.8) **isolant** AF avec forte température de Néel (500K) **pas** de poches de trous (uniquement électrons)



ges induce y in FeTe_{1-x}S_x

saki^{1,2,3}, **T Ozaki**^{1,3}, **10**^{1,2,3}

0.8Fe2Se2

(Burrard-Lucas et al.)

tive in inducing superconductivity in various alcoholic beverages enhances the ater-ethanol mixture as a control. Heating ng volume fraction of 62.4% and the highest onents present in alcoholic beverages, other superconductivity in the FeTe_{0.8}S_{0.2}





Topologie du tétraèdre Fe(Se/As/P) importante

structure cristallographique



Taille de la lanthanide dans les IIII (FeAs) Tc max pour h_{anion} = 1.38A tétraèdre "parfait" pas si clair dans les 122

A noter les dopés P (122) qui ont des propriétés différentes des autres (symétrie du gap différente ?)

Influence de la pression (ici FeSe-11)

7



Olariu et al. 2011

anomalie magnétique (*) pour les faibles dopages = Onde de Densité de Spins

["associée" à une transition structurale orthorhombique-tetragonal]

et transition supraconductrice (*) à basse température pour x > 3%

un diagramme de phase "générique".... (en tout cas pour les 122) Thaler et al.



un diagramme de phase "générique".... (en tout cas pour les 122) Thaler et al.



La supraconductivité également être induite par substitution **isovalente Fe/Ru** (Moment de Ru < Moment de Fe)

Les mesures de RMN (Julien et al., Ma et al.) confirment la **coexistence microscopique** magnétisme/SC (voir aussi µSR + neutrons)

un diagramme de phase "générique".... et d'autres composés exotiques

tels les composés à Ondes de Densité de Charges TiSe₂ dopé Cu ou sous pression (voir aussi NbSe₂)

et bien sur l**es cuprates** ordre magnétique.... et/ou électronique



mais également MoS₂ isolant de bandes rendu métallique par effet de champ (Ye et al.) [pas simplement un effet de DOS] ordre en compétition ?



(voir exposé M.H.Julien)

ordre AFM (~ $|\mu_B/Fe|$) le long de Q=(1/2,1/2)

IIII and I22

 $T_{N} < 200K$

Ø

ø

ordre AFM (~ 2 µ_B/Fe) le long de Q=(1,0)

Fe_{1+ε}Te

T_N ~ 70K

9

Composés «parents» (non dopés)

Cette structure en "stripes" (ou en zig-zag) n'est pas * due à une interaction de type superéchange entre spin localisés (second voisin, et meme 3^{eme} voisin pour la structure zig-zag)



mais **essentiellement** * à une stabilisation énergétique de la structure magnétique des électrons de conduction (type "Stoner") (proche d'un état ferromagnétique)

Johannes et al. (structure "zig-zag" plus stable dans le cas de FeTe)

* une contribution de spins localisées est néanmoins probable...





poches (~ cylindre) **d'electrons** (M) et **de trous** (Γ)

Supraconductivité Multigap ?

Structure électronique







Szabo et al.

confirmée par spectroscopie de pointe



2 valeurs de gaps mais (contrairement à MgB₂) une <u>seule échelle d'énergie</u>

 $\Delta_{2D} = \Delta_0 \cos(k_x) \cos(k_y) \quad | \quad \text{symétrie } s_{x^2y^2} = s_{\pm}$

changement de signe de Δ entre les poches d'électrons et de trous (?)

Même si la structure magnétique n'est pas la même dans tous les composés parents [pnictides vs Fe(Se,Te)] **TOUS** présentent une **résonance** dans le spectre des <u>excitations de spin</u> à **Q=(1/2,1/2)** lorsqu'ils sont dopés

 $E_r(0) \sim 4-5 k_B T_c$ (Lumsden et al.)

Néanmoins E_r(T) suit l'évolution du gap dans les pnictide (Isonov et al.) mais est **independant** de T dans Fe(Se,Te) (Harriger et al.)?



ce vecteur "couple" (mais pas toujours) les différentes poches de la SF : nesting

et les fluctuations magnétiques jouent probablement un rôle important dans le mécanisme de couplage : **modèle s+/-**

couplage électron-phonon trop faible pour $T_c > 50K$ (~ 0.2 vs ~ 1.0 dans MgB₂)

Supraconducteur «traditionnel» un paramètre d'ordre (gap) isotrope

MgB₂ deux paramètre d'ordre (gap) <u>couplés</u>, isotropes et de même signe, associés à deux nappes distinctes de la SF



Cuprates

un paramètre d'ordre (gap) changant de signe sur **la** SF

> Pnictides un paramètre d'ordre (gap) changant de signe entre les différentes nappes de la SF

grande sensibilité aux défauts (violation du "théorème d'Anderson") forte diminution de la T_c liée aux diffusions par des impuretés **non magnétiques** (+ effet de "brisure de paires") [nous reviendrons sur ce point]

REMARQUE

Les pnictides ont été Initiallement considérés comme des systèmes à faibles correlations [contrairement aux cuprates] (U : Hubbard << W : largeur de bande)

mais ces correlations électroniques ne sont peutêtre pas si négligeables : U/W ~ 0.5 (→ 1)



voir Dai et al. Nature Physics 2012 pour une revue

Très fortes valeurs du champ critique supérieur







 dH_{c2}/dT : $IT/K \ge 10 T/K$ (H//c)

Jaroszynski et al.

Général à tous les composés 1111 & 122 $MgB_2 : \sim 0.2 T/K$

anisotropie plutôt faible ~ 4-7 pour les | | | | to ~ 2 pour les | 22

H_{c2}(0) : 50T (//c) à 300T (//ab)

et même plus....

le cas particulier de Fe(Se,Te) (phase 11)



Fe(Se,Te) - Khim et al.



Khim et al. see also Lei et al., Braithwaite et al.

croisement possible des lignes "H_{c2}"?

"..." = mesures de transport NON thermodynamiques

20



Chaleur spécifique C. Marcenat - A. Demuer forte courbure "vers le bas"

dH_{c2}/dT ~ 40T/K for H//ab pas visible en transport

> Fit Ginzburg-Landau incluant les effets orbitaux (H_o) et paramagnétiques (Pauli, H_P)

$(H/H_p)^2 + (H/H_o) = I - T/T_c$

4	H//c	H//ab
$H_{o}(T)$	170	650
$H_{p}(T)$	75	65

champ critique supérieur

 $\xi_c = \xi_{ab} \times H_o^c / H_o^{ab} \sim 4 \pm 1 \mathring{A}$ $\xi_{ab} = \Phi_0 / (2\pi [0.7 \times \mu_0 H_o]) = 15 \pm 1 \mathring{A}$ **très faible vitesse de Fermi** $v_{F,ab} = \pi \Delta \xi_{ab} / \hbar \sim 1.8 \pm 0.4 \times 10^4 m / s$

en accord avec mesures thermoélectriques (coeffcient Seebeck, Pourret et al.)

et mesures d'ARPES



Forte renormalisation des bandes m*/m_b ~15-20 [par rapport aux calculs DMFT]

> confirme l'idée que les CORRELATIONS ne sont pas négligeables

Tamai et al., Nakayama et al.- voir aussi Aichhorn et al.

Piégeage et fluage des vortex





Après une excursion en champ (H_a >> H_{c1}) une grande partie des vortex restent **piégés** même pour H=0

H.Cercellier, H.Grasland : microscopie à sonde de Hall Ba(Ni,Fe)₂As₂ - 4.2K

Courant critique important ~ 10⁵ - 10⁶ A/cm² (bas champ et basse température)

C.J.van der Beek et al. $J_c = J_c^{strong} + J_c^{collective}$

Fluctuations du libre parcours moyen uniquement présent en cas de dopage électronique (pas visible si substitution isovalente As/P)

Piégeage et fluage des vortex



MAIS ce "tas de sable" n'est **pas** un état d'équilibre (on devrait avoir B=0) les vortex cherchent à sortir

ightarrow B(t)

taux de relaxation

 $S = -\partial ln(B)/\partial ln(t)$

pour sortir les vortex doivent franchir les barrières de piegeage soit par <u>activation thermique</u> $S_{thermique} \sim k_B T/U \rightarrow 0$ $T \rightarrow 0$

soit (éventuellement) par <u>effet tunnel</u> (d'un objet mesoscopique !) $S_{quantique} = \hbar/A_Q \propto [\rho_n/\xi] \times [J_c/J_0]^{1/2}$



Fe(Se,Te): fort ρ_n (mΩcm), <u>faible ξ</u> (~ 10A) J_c/J_0 élevé (~ 1/1000)

> S reste fini pour $T \rightarrow 0$

Relaxation **quantique** importante



et fluage des vortex JIÉgeage

T.Klein et al.

Un solide de vortex très **désordonné**?





Demirdis et al. Décoration Bitter Co-122



Contrairement aux cuprates pour lesquels des solides très ordonnés (verre de Bragg) sont généralement observés

Fasano et al. BSCCO

Très faible densité superfluide (~1/ λ^2) :



comme observé précédemment dans les cuprates

~ 100x plus faible que dans MgB₂ de T_c equivalente

> Forte dépendance de λ avec T_c effet de Brisure de paires

Supraconducteur conventionnel : $\lambda(T) = \lambda(0) + \Delta\lambda(T)$

mais les composés de symétrie s+/- sont très sensitibles à **toutes** les diffusions (et pas seulement les diffusions par des impuretés magnétiques) \longrightarrow très forte diminution de T_c (voir S.Demirdis et al.: irradiation) \longrightarrow une partie du condensat détruite même pour T=0

а

 $\leftrightarrow n$



Kogan et al.

et si $<\Omega>=0$ (ou éventuellement $<\Omega> << \Omega_{max}$)

XF

$$1/\lambda^2 = 1/\lambda(0)^2(1 - T^2/T_c^2)$$

wec:
$$\lambda(0) = \lambda_0 \times [1/T_c]$$

 $k_B T$)





P. Rodière et al.

and the second sec	λ_0 (nm)
H _{c1}	2900 (500)
μSQUID	4400 (800)
Cp	4000 (600)
TDO	5600 (1000)



mesures «directes» : H_{c1} ou μ SQUID

ou indirectes : chaleur spécifique :

 $\frac{\Delta C_p}{T_c} \propto \left(\frac{\partial H_c}{\partial T}\right)^2 \propto \frac{1}{\lambda^2 \xi^2}$

et Tunnel Diode Oscillator : $\Delta\lambda(T) = [\lambda(0)/2] \times (T/T_c)^2$

$\frac{\Delta C_p}{T}$ ne tend pas vers zéro : composante résiduelle importante



Hardy et al.

et $\frac{\Delta C_p}{\gamma_N T_c}$ non constant (BCS=1.43)

Pnictides :

(mauvais) METAL U/W ~ 0.5, supraconductivité multi-bande

Fe en coordination tétraédrique

Onde de Densité de Spin (+ moments localisés ?)

Résonance excitations de spin

Densité superfluide réduite effets de brisure de paires importants

Fort H_{c2} (anisotropie <u>modérée</u>)

Mécanisme non unconventionel médié par les fluctuations de spin (?)

s-wave avec changement de signe entre les différents feuillets de la SF (noeuds dans le gap pour les dopés P ?)

Cuprates:

ISOLANT de Mott Répulsion de Coulomb importante

Cu en coordination planaire

Antiferromagnétique (spins localisés)

Résonance excitation de spin

Densité superfluide réduite effets de brisure de paires importants

Fort H_{c2} (forte anisotropie BSCCO)

Mécanisme non unconventionel médié par ???

Gap de symétrie d

Bernt Mathias 1976 6 règles élémentaires pour une recherche fructueuse de nouveaux supraconducteurs

- Aighted and a set of the set o
- bighedeityityf steetdonist statessishgerod
- stansivian from loxygegood
- stagaetáynírom bragaetistial
- staylavays frombio good starting materials
- stay away from theorists
 but electronic structure calculations are important