



**XV Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa
"Stulecie Nadprzewodnictwa"**
Kazimierz Dolny, 9-13 października 2011 r.

**Wpływ ciśnienia na zmiany struktury elektronowej
nadprzewodników żelazowych typu $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$**

ANNA CIECHAN¹, MACIEJ WINIARSKI², MAŁGORZATA SAMSEL-CZEKAŁA²

¹Instytut Fizyki, Polska Akademia Nauk, Al. Lotników 32/46, 02-668
Warszawa

²Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych, Polska Akademia
Nauk, ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław

Chalkogenidki żelaza typu $\text{Fe}_{1+y}\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x$ są interesującą grupą materiałów, która wykazuje nadprzewodnictwo z temperaturą krytyczną 8K dla czystego FeSe [1] rosnącą do 15 K przy podstawieniu $x = 0.5$ [2]. Dodatkowo, T_c wzrasta pod ciśnieniem osiągając dla FeSe wartość 37 K [3]. Z drugiej strony, końcowy związek FeTe ($x = 1$) nie jest nadprzewodzący, wykazuje natomiast porządek antyferromagnetyczny [4]. Istotny wpływ na właściwości chalkogenidków ma również nieporządek wywołany nadmiarem żelaza (niedoborem selenu) w warstwach Fe_{1+x}Se (FeSe_{1-x}) [5], czy też domieszkowaniem np. Ni, Co, Cu [6]. Od niedawna badane są również trójskładnikowe związki AFe_2Se_2 ($A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Tl}, \text{Cs}$), z atomami metali A umieszczonymi pomiędzy warstwami FeSe i charakteryzujące się wysoką temperaturą przejścia w stan nadprzewodzący $T_c > 30\text{K}$ [7].

Zaprezentowane zostaną wyniki obliczeń struktury elektronowej metodami DFT dla tej obiecującej klasy związków w stanie normalnym. Przewiduje się, że istotny wpływ na stan nadprzewodzący chalkogenidków żelaza ma nesting powierzchni Fermiego [8], ulegający pewnej modyfikacji wraz ze zmianą parametrów sieci czy też struktury krystalograficznej pod wpływem ciśnienia. Wyznaczono m.in. pasma energetyczne i powierzchnię Fermiego dla różnej koncentracji telluru w Fe(Se,Te). Pozwala to na zaobserwowanie zmian elektronowych gęstości stanów i topologii powierzchni Fermiego pod ciśnieniem. Zbadano również widma fononowe.

Podziękowania: Praca finansowana z funduszy projektu FunDMS (Advanced Grant of the European Research Council, FP7 "Ideas"), kierowanego przez prof. Tomasza Dietla. (A.C.) oraz grantu NCN w Krakowie - nr N N202 239540 (M.W.,M.S.-C.).

- [1] F.-C. Hsu et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 105 (2008) 14262.
- [2] M.H. Fang et al., Phys. Rev. B 78 (2008) 224503; K.W. Yeh et al., EPL 84 (2008) 37002.
- [3] Y. Mizuguchi et al., Appl. Phys. Lett. 93 (2008) 152505; S. Margadonna et al., Phys. Rev. B 80 (2009) 064506; R.S. Kumar et al., J. Phys. Chem. B 114 (2010) 12597; N.C. Gresty et al., J. Am. Chem. Soc. 131 (2009) 16944; K. Horigane et al., J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 063705.
- [4] W. Bao et al., Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 247001; S. Li et al., Phys. Rev. B 79 (2009) 054503.
- [5] T.M. McQueen et al., Phys. Rev. B 79 (2009) 014522.
- [6] Y. Mizuguchi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 074712; A.J. Williams et al., J. Phys.: Condens. Matter 21(2009) 305701; D.J. Gawryluk et al, Supercond. Sci. Technol. 24 (2011) 065011.
- [7] M. Fang et al., EPL, 94 (2011) 27009; J. Guo et al., Phys. Rev. B 82 (2010) 180520R; X.G. Luo et al., New J. Phys. 13 (2011) 053011; J.J. Ying et al., Phys. Rev. B 83 (2011) 212502.
- [8] A. Subedi et al., Phys. Rev. B 78 (2008) 134514; P.P. Singh, J. Phys.: Condens. Matter 22 (2010) 135501.