



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

**Struktura elektronowa nadprzewodników na bazie żelaza
(Lu;Y;Sc)₂Fe₃Si₅ i niklu Lu₂Ni₃Si₅ z zasad pierwszych**

M. SAMSEL-CZEKAŁA, M.J. WINIARSKI

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

Struktura elektronowa tetragonalnych (P4/mnc) nadprzewodzących krzemków na bazie żelaza, R₂Fe₃Si₅ (R = Lu, Y, Sc) [1], oraz rombowego (Ibam) na bazie niklu, Lu₂Ni₃Si₅ [2], została policzona z użyciem metody FPLO [3] w ramach teorii DFT. Mają one relatywnie niskie temperatury przejść do stanu nadprzewodzącego $T_{sc} < 7$ K i nie wykazują uporządkowania magnetycznego do najniższych temperatur [4-9,10]. Zaprezentowane zostaną m.in. wyznaczone gęstości stanów elektronowych i powierzchnie Fermiego (PF) jak również przedyskutowane możliwe mechanizmy parowania. Nasze wyniki pokazują, że we wszystkich trzech związkach z żelazem gęstości stanów na poziomie Fermiego są zdominowane przez elektrony Fe 3d, podobnie jak w przypadku ostatnio odkrytych wysokotemperaturowych nadprzewodników na bazie żelaza. Z kolei w Lu₂Ni₃Si₅ dominują elektrony Lu 5d, Ni 3d oraz Si 3p. Natomiast PF badanych przez nas połączeń (Lu,Y,Sc)₂Fe₃Si₅ są identyczne, różniąc się od tej w związku z niklem. Płaty PF wszystkich rozważanych nadprzewodników pochodzą z czterech pasm, zawierając zarówno elementy elektronowe jak i dziurowe z możliwym nestingiem. Ten fakt wspiera ideę dwu- a nawet wielopasmowego nadprzewodnictwa, zaproponowaną wcześniej w oparciu o wyniki eksperymentalne [7,9]. W przeciwieństwie do typowych cylindrycznych płatów PF, obserwowanych dla wysokotemperaturowych nadprzewodników zawierających żelazo z rodzin 1111 i 122, płaty PF występujące w rozpatrywanej przez nas rodzinie 235 są bardziej trójwymiarowe, ponieważ warstwy atomowe wzdłuż osi c leżą stosunkowo blisko siebie.

Praca finansowana w ramach grantu NCN w Krakowie - nr N N202 239540.

- [1] M. Samsel-Czekała, M.J. Winiarski, PRB, w przygotowaniu.
- [2] M. Samsel-Czekała, M.J. Winiarski, Intermetallics 2011, zaakceptowana.
- [3] FPLO5.00-18; K. Koepf, H. Eschrig, PRB 59, 1743 ('99); <http://www.FPLO.de>
- [4] H.F. Braun, Phys. Lett. 75A, 386 (1980).
- [5] J.D. Cashion et al., J. Appl. Phys. 52, 2180 (1981).
- [6] H.F. Braun et al., J. Magn. Magn. Mater. 25, 117 (1981).
- [7] C.B. Vining et al., PRB 27, 2800 (1983).
- [8] H.H. Hamdeh et. al, Physica B 291, 128 (2000).
- [9] Y. Nakajima et al., PRL 100, 157001 (2008); R.T. Gordon et al., PRB 78, 024514 (2008).
- [10] C. Mazumdar et al., PRB 18, 13879 (1994).