



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

Struktura pasmowa związków nadprzewodzących
 $\text{Fe}_{1+x}\text{Te}_{1-y}\text{S}_y$ badana metodą ARPES

P. STAROWICZ¹, H. SCHWAB², J. GORAUS³, P. ZAJDEL^{3,4}, F. FORSTER²,
J.R. RAK¹, A. SZYTUŁA¹, M.A.GREEN^{4,5}, I. VOBORNIK⁶, F. REINERT²

¹ Instytut Fizyki im. M Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński,
ul. Reymonta 4, 30-059 Kraków

² Universität Würzburg, Experimentelle Physik VII,
Am Hubland, D-97074 Würzburg, Germany

³ Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski, ul. Uniwersytecka 4, 40-007 Katowice

⁴ NIST Center for Neutron Research, National Institute of Standards and Technology,
Gaithersburg, Maryland 20899, USA

⁵ Materials Science & Engineering, University of Maryland, College Park MD-20742-6033,
USA

⁶ CNR-INFN, TASC Laboratory, AREA Science Park, Basovizza, 34012 Trieste, Italy

Wśród nadprzewodzących pniktydków i chalcogenidków żelaza można wyróżnić te, o najprostszej strukturze krystalicznej, czyli układy Fe_{1+x}Se oraz Fe_{1+x}Te domieszkowane selenem lub siarką. Jak w całej klasie nadprzewodników materiały te posiadają płaszczyzny zbudowane z atomów żelaza. Charakteryzują się one nieporządkiem wynikającym z faktu, że dodatkowe atomy Fe obsadzają w sposób przypadkowy pozycję krystalograficzną znajdującą się na wysokości warstwy Te/Se oraz z losowego rozłożenia domieszkowanych atomów. Najwyższa temperatura krytyczna w tych materiałach wynosi 13 K, 14 K oraz 10 K odpowiednio dla Fe_{1+x}Se , $\text{Fe}_{1+x}\text{Te}_{1-y}\text{Se}_y$ oraz $\text{Fe}_{1+x}\text{Te}_{1-y}\text{S}_y$. Stosunkowo mniej poznanym układem jest Fe_{1+x}Te domieszkowany siarką. Podobnie jak w wielu innych rodzinach pniktydków i chalcogenidków w układzie $\text{Fe}_{1+x}\text{Te}_{1-y}\text{S}_y$ domieszkowanie niszczy uporządkowanie magnetyczne w Fe_{1+x}Te i indukuje nadprzewodnictwo.

Monokryształy o składzie $\text{Fe}_{1.09}\text{Te}$, $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.95}\text{S}_{0.05}$ oraz $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.94}\text{S}_{0.6}$ poddane zostały badaniom kątorozdzielczej spektroskopii fotoelektronów (ang. *angle resolved photoelectron spectroscopy* - ARPES) przy synchrotronie Elettra. Istotnym faktem zaobserwowanym dla próbek nadprzewodzących $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.95}\text{S}_{0.05}$ oraz $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.94}\text{S}_{0.6}$ jest pojawienie się płaskiego pasma przy potencjale chemicznym w punkcie Γ , które nie było dotychczas widoczne w niedomieszkowanym Fe_{1+x}Te . Obserwowana dyspersja jest prawdopodobnie wierzchołkiem pasma dziurowego spłaszczonego na skutek znacznej renormalizacji masy, co może wystąpić przy silnych korelacjach elektronowych. Możliwe jest też istnienie pasma o charakterze elektronowym nieco powyżej energii Fermiego. Konsekwencją pojawienia się tego typu pasma zajmującego około 3% objętości strefy Brillouina jest maksimum gęstości stanów przy potencjale chemicznym, które z kolei powinno mieć istotny wpływ na powstanie nadprzewodnictwa.

Badania ARPES wykonane w funkcji energii fotonów wykazały raczej dwuwymiarowy charakter struktury pasmowej. Zaobserwowano silną zależność przekroju czynnego na fotojonizację od energii promieniowania. Z kolei pomiary przeprowadzone w funkcji polaryzacji padającego promieniowania pozwoliły określić dominujące charaktery orbitalne w rejonie punktu Γ jako d_z^2 dla płaskiego pasma, a także d_{xy} oraz $d_{x^2-y^2}$ odpowiednio w kierunkach $\Gamma - M$ oraz $\Gamma - X$ dla kieszeni dziurowej. W celach porównawczych, dla stechiometrycznego FeTe przeprowadzono obliczenia struktury pasmowej wraz z charakterami orbitalnymi pasm metodą LAPW-LO

zaimplementowaną w pakiecie WIEN2k. Tylko dla pasma o dominującym charakterze $d_{x^2-y^2}$ otrzymano zgodność pomiędzy tymi obliczeniami a eksperymentem dla $\text{Fe}_{1.03}\text{Te}_{0.94}\text{S}_{0.6}$. Struktura pasmowa dla $\text{Fe}_{1.1}\text{Te}_{0.9}\text{S}_{0.1}$ została również otrzymana metodą KKR-CPA odpowiednią dla materiałów z nieporządkiem. Wyniki wykazują względną zgodność z danymi doświadczalnymi po przesunięciu energii Fermiego o 0.1 eV. W wynikach obliczeń uwidocznione jest rozmycie relacji dyspersji, co jest związane z silnym nieporządkiem w układach $\text{Fe}_{1+x}\text{Te}_{1-y}\text{S}_y$.