



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

---

**Struktura elektronowa nadprzewodników  
 $\text{La}_3\text{Ni}_4\text{Si}_4$ ,  $\text{La}_3\text{Pd}_4\text{Si}_4$  i  $\text{La}_3\text{Pd}_4\text{Ge}_4$**

M.J. WINIARSKI, M. SAMSEL-CZEKAŁA

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

Potrójne związki  $\text{La}_3\text{Ni}_4\text{Si}_4$ ,  $\text{La}_3\text{Pd}_4\text{Si}_4$ ,  $\text{La}_3\text{Pd}_4\text{Ge}_4$  przechodzą w stan nadprzewodzący w temperaturach  $T_{sc}$  3 K [1,2]. Mają silnie anizotropową budowę (warstwy niklowo-krzemowe przeplatane warstwami lantanu wzdłuż wydłużonej osi  $c$ ) w ramach struktury tetragonalnej  $\text{Immm}$ . Wykazują wiele podobieństw do tetragonalnych wysokotemperaturowych nadprzewodników na bazie żelaza (czy niklu) - pniktydków czy oksypniktydków, chociaż dotychczasowe dane eksperymentalne wskazują raczej na ich konwencjonalny mechanizm parowania typu BCS [2].

W prezentacji przedstawiona zostanie struktura elektronowa wszystkich trzech połączeń, wyznaczona z zasad pierwszych w ramach teorii DFT. Z użyciem metody FPLO [3], obliczone zostały gęstości stanów elektronowych i powierzchnie Fermiego (PF). Otrzymane gęstości stanów na poziomie Fermiego, zdominowane przez elektrony  $d$ , mają najwyższe wartości dla  $\text{La}_3\text{Ni}_4\text{Si}_4$  a najniższe dla  $\text{La}_3\text{Pd}_4\text{Ge}_4$ , w zgodności z danymi eksperymentalnymi [2]. Natomiast relacja pomiędzy osiąganymi przez nie  $T_{sc}$  jest odwrotna, co wg autorów pracy [2] może sugerować najsilniejsze korelacje elektron-fonon w  $\text{La}_3\text{Pd}_4\text{Ge}_4$ . Wszystkie trzy związki posiadają bardzo podobne płaty PF pochodzące z kilku pasm. Płaty te są albo kwazidwuwymiarowe, takie jak karbowane cylindry, obserwowane w przypadku słynnych nadprzewodników żelazowych czy niklowych - typu 1111 czy 122, albo trójwymiarowe, charakterystyczne dla nadprzewodzących borokarbidek niklowych typu 1221. Pozwala to na rozpatrywanie potencjalnie różnych mechanizmów nadprzewodnictwa tych związków z rodziny 344.

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

- [1] H. Fujii et. al., PRB 72, 214520 (2005); H. Fujii, J. Phys.: CM 18, 8037 (2006);  
H. Fujii, S. Kasahara, J. Phys.: CM 20, 075202 (2008).
- [2] S. Kasahara et. al., J. Phys. CM 20, 385204 (2008).
- [3] FPLO5.00-18; K. Koepernik and H. Eschrig, PRB 59, 1743 (1999); <http://www.FPLO.de>