



Институт электрофизики УрО РАН
г. Екатеринбург

Особенности электронной структуры сверхпроводников на основе халькогенидов железа

Н.С. Павлов, И.А. Некрасов, М.В. Садовский

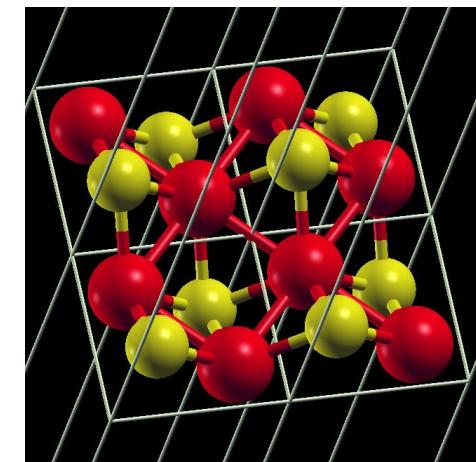
“Проблемы физики твердого тела и высоких давлений”
Буревестник. 2016

Высокотемпературные сверхпроводники на основе железа

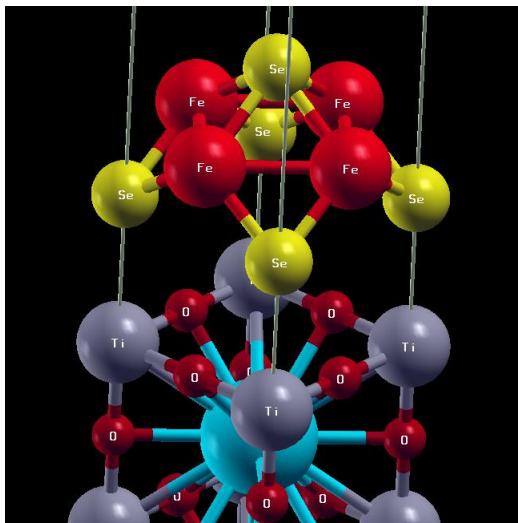
открыты в 2008 г. Сверхпроводимость реализуется вдоль плоскостей FeSe (FeAs). Ионы Fe находятся в тетраэдрическом окружении Se (As) и образуют квадратную решётку. Слои FeSe (FeAs) разделены слоями K, LiOH, LaO, Ba, Na, и т.п.

В данной работе рассмотрены: монослой FeSe, монослой FeSe на SrTiO_3 , KFe_2Se_2 , LiOHFeSe .

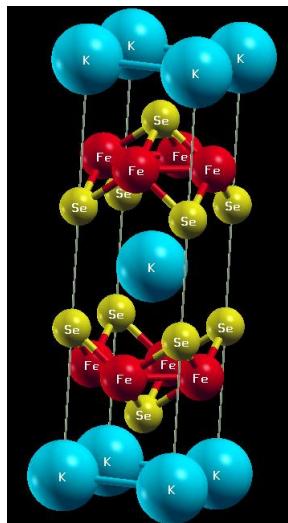
Монослой FeSe



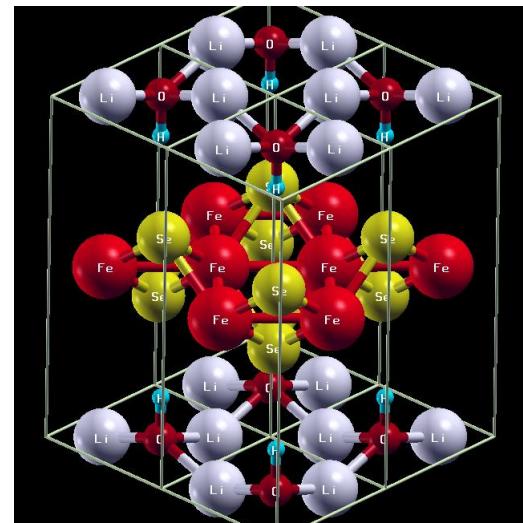
Монослой FeSe на SrTiO_3



KFe_2Se_2

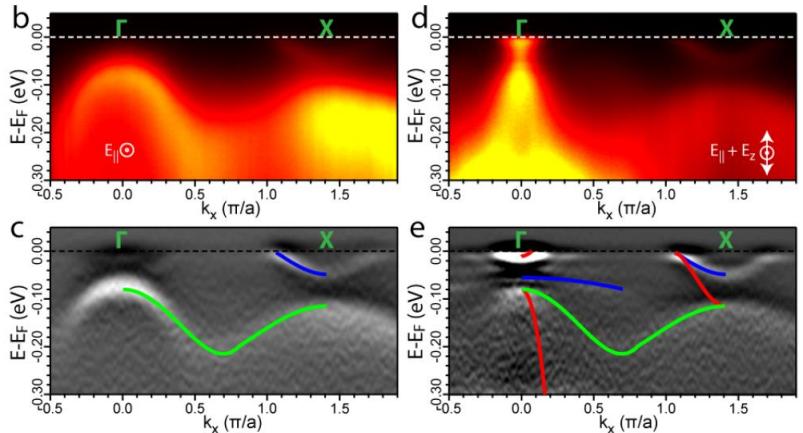


LiOHFeSe

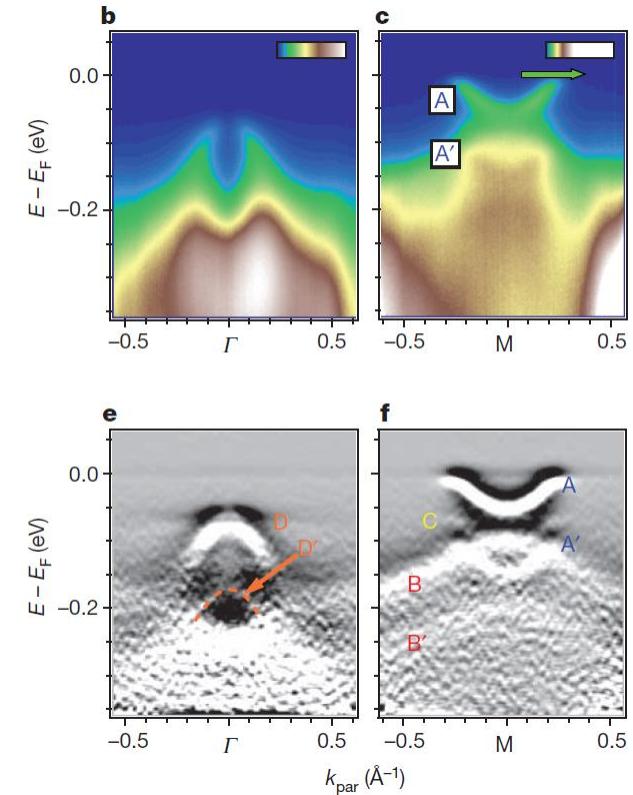


ARPES

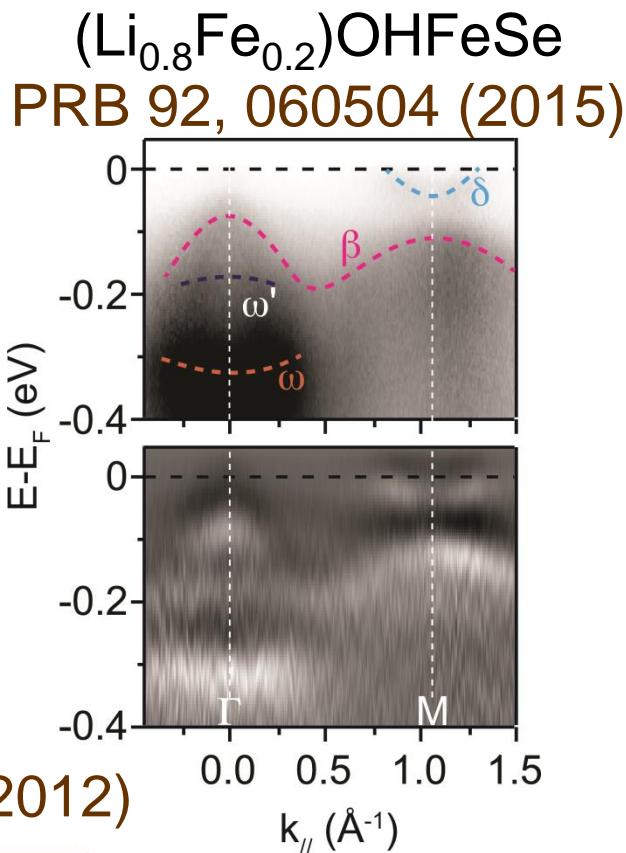
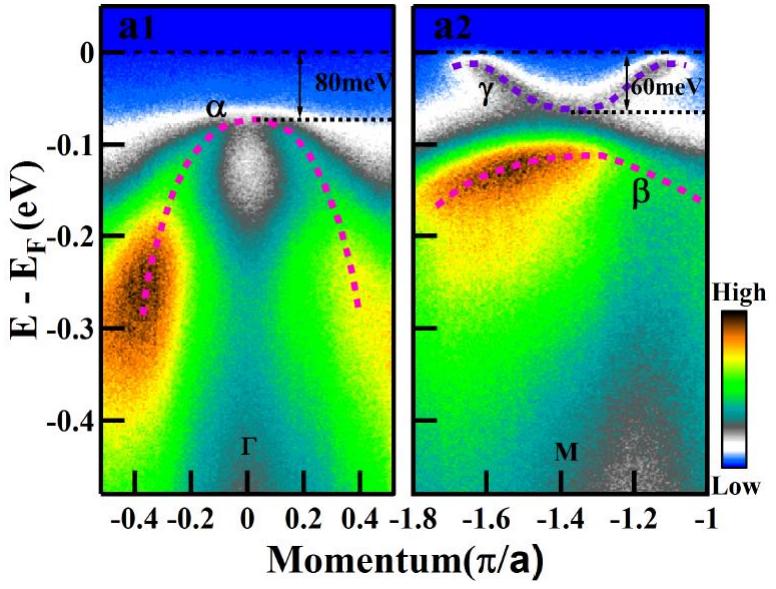
$K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$
PRL 110, 067003 (2013)



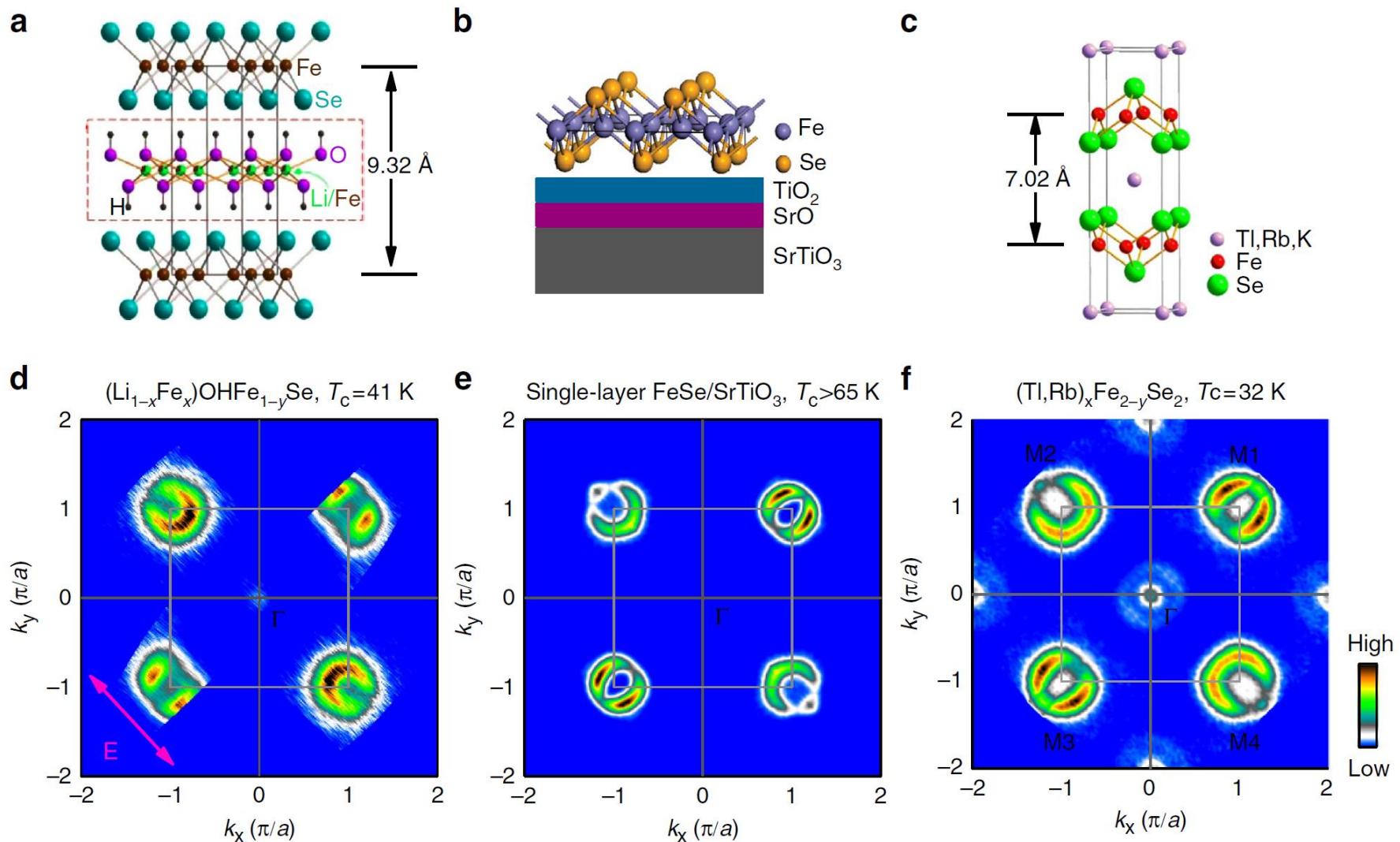
FeSe на $SrTiO_3$
Nature 515, 245 (2014)



FeSe на $SrTiO_3$
Nature Com. 3, 931 (2012)



Поверхности Ферми ARPES

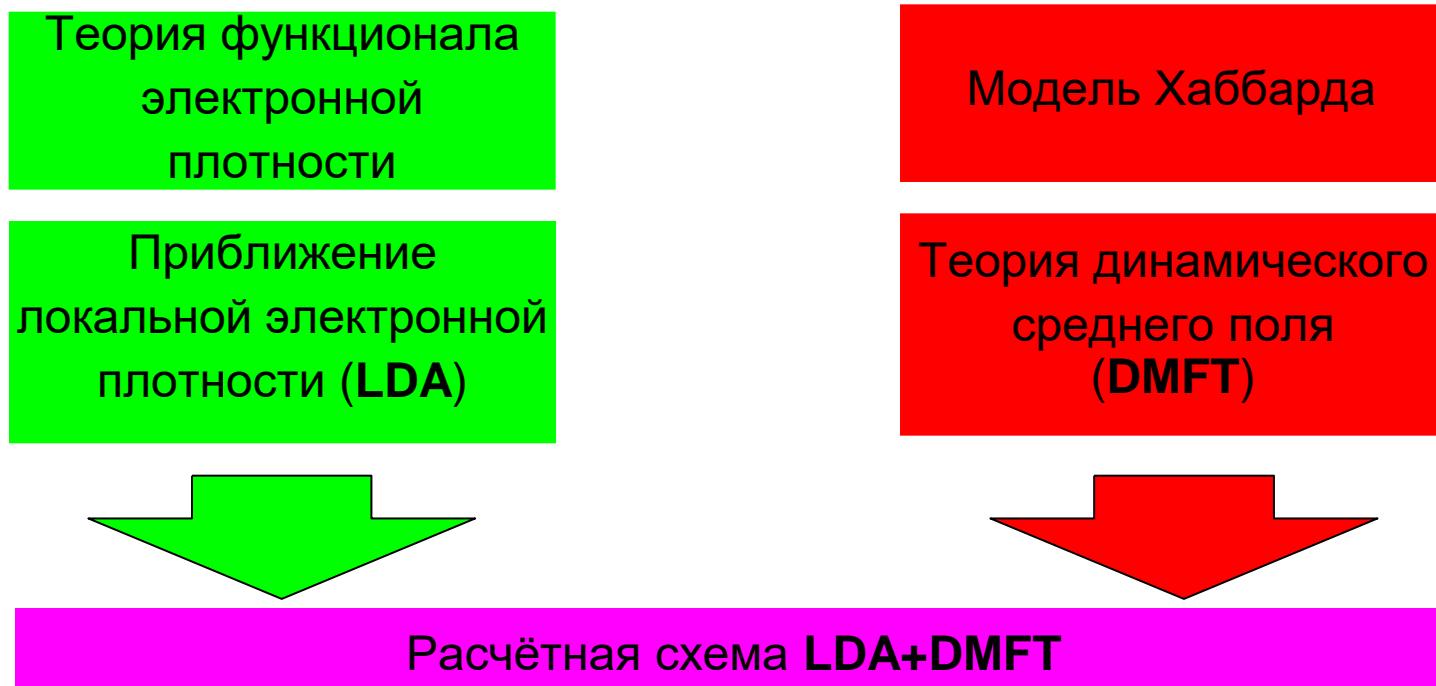


Nature Communications 7, 10608 (2016)

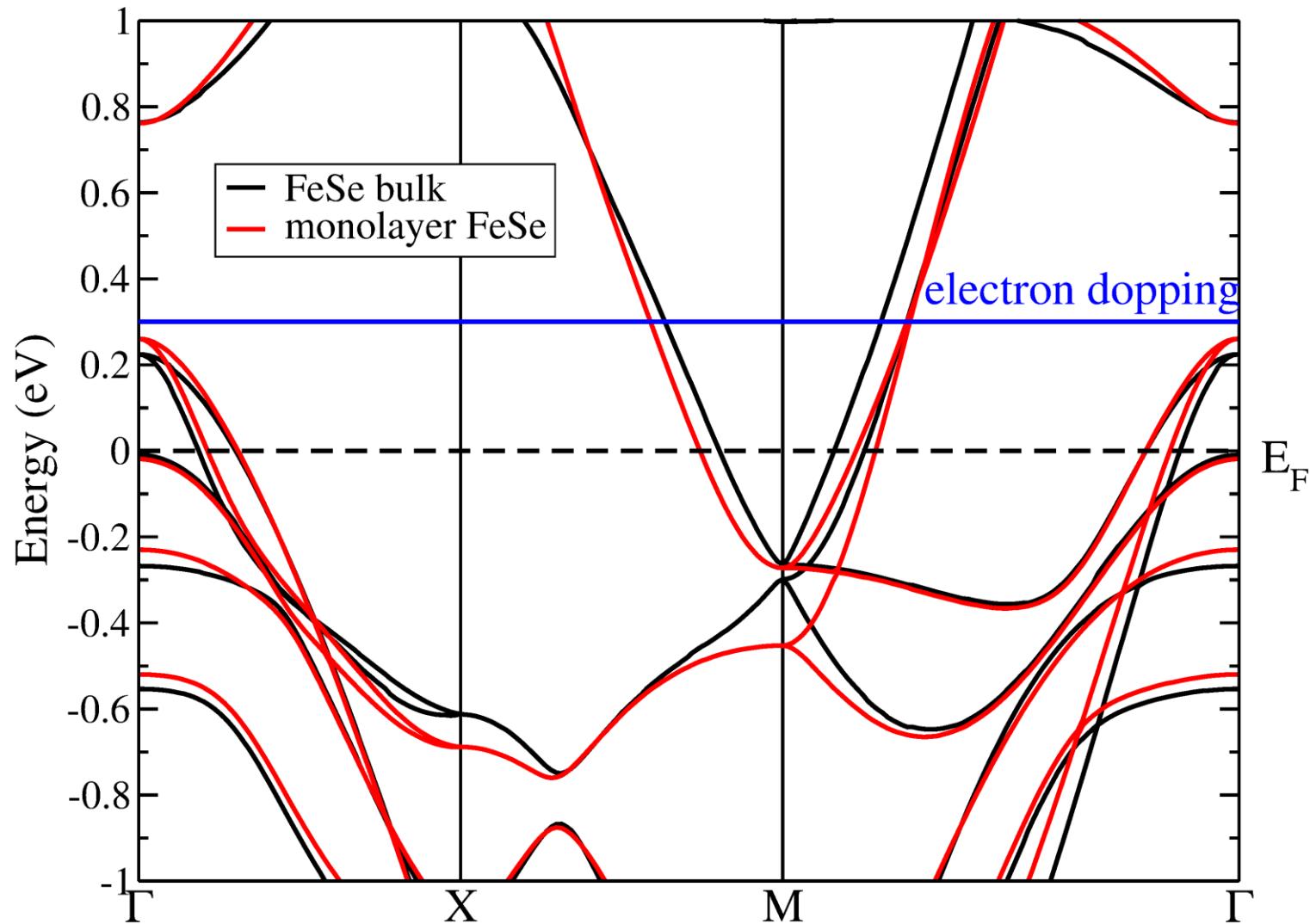
Расчётная схема LDA+DMFT

Зонные расчёты позволяют моделировать электронную структуру твёрдых тел, основываясь на знании химсостава и кристаллической структуры. Наиболее популярное среди них теория функционала электронной плотности DFT/LDA.

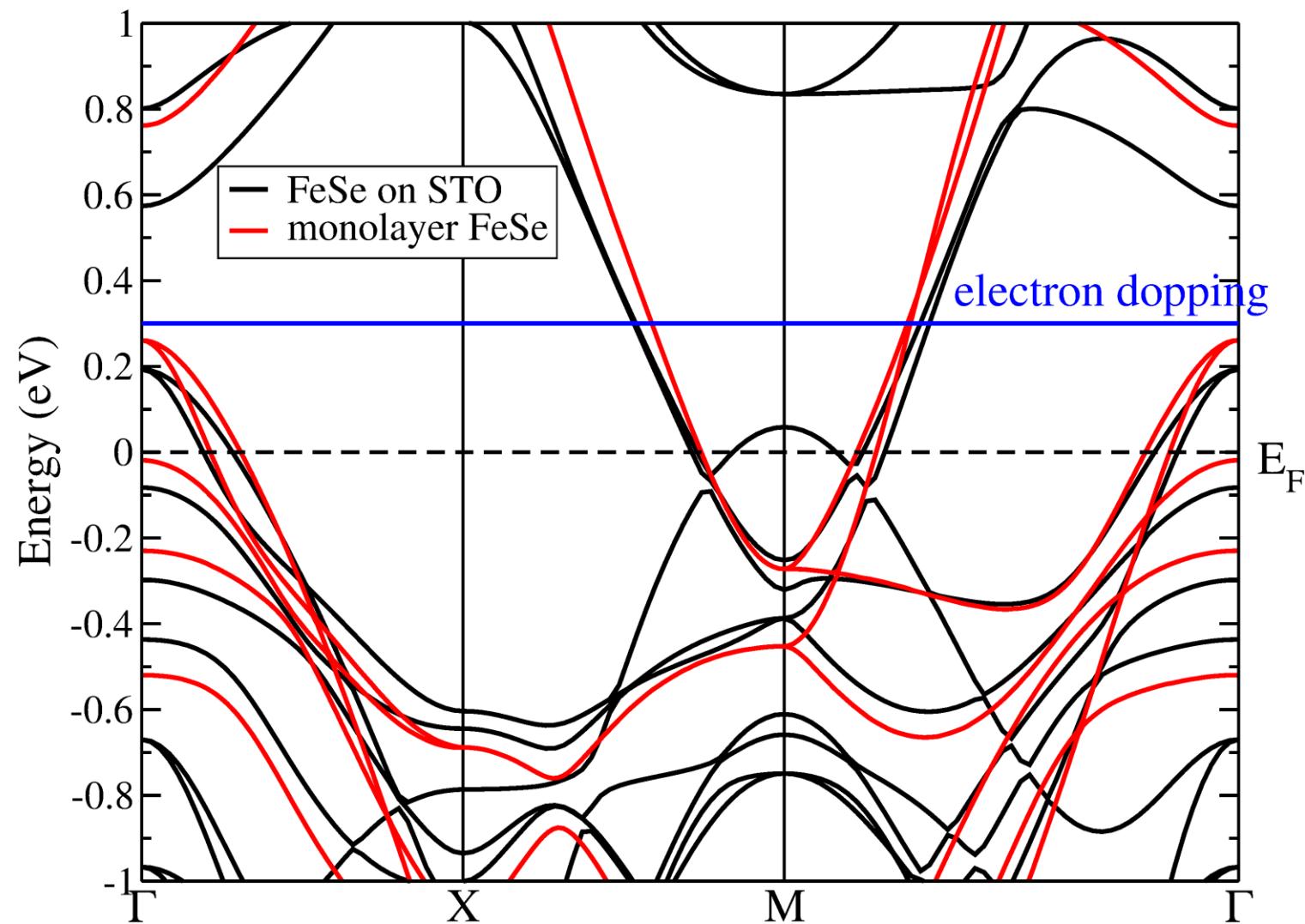
В LDA+DMFT дополнительно к LDA учитывается локальное кулоновское взаимодействие на частично заполненных d или f электронных состояниях с помощью DMFT решения модели Хаббарда.



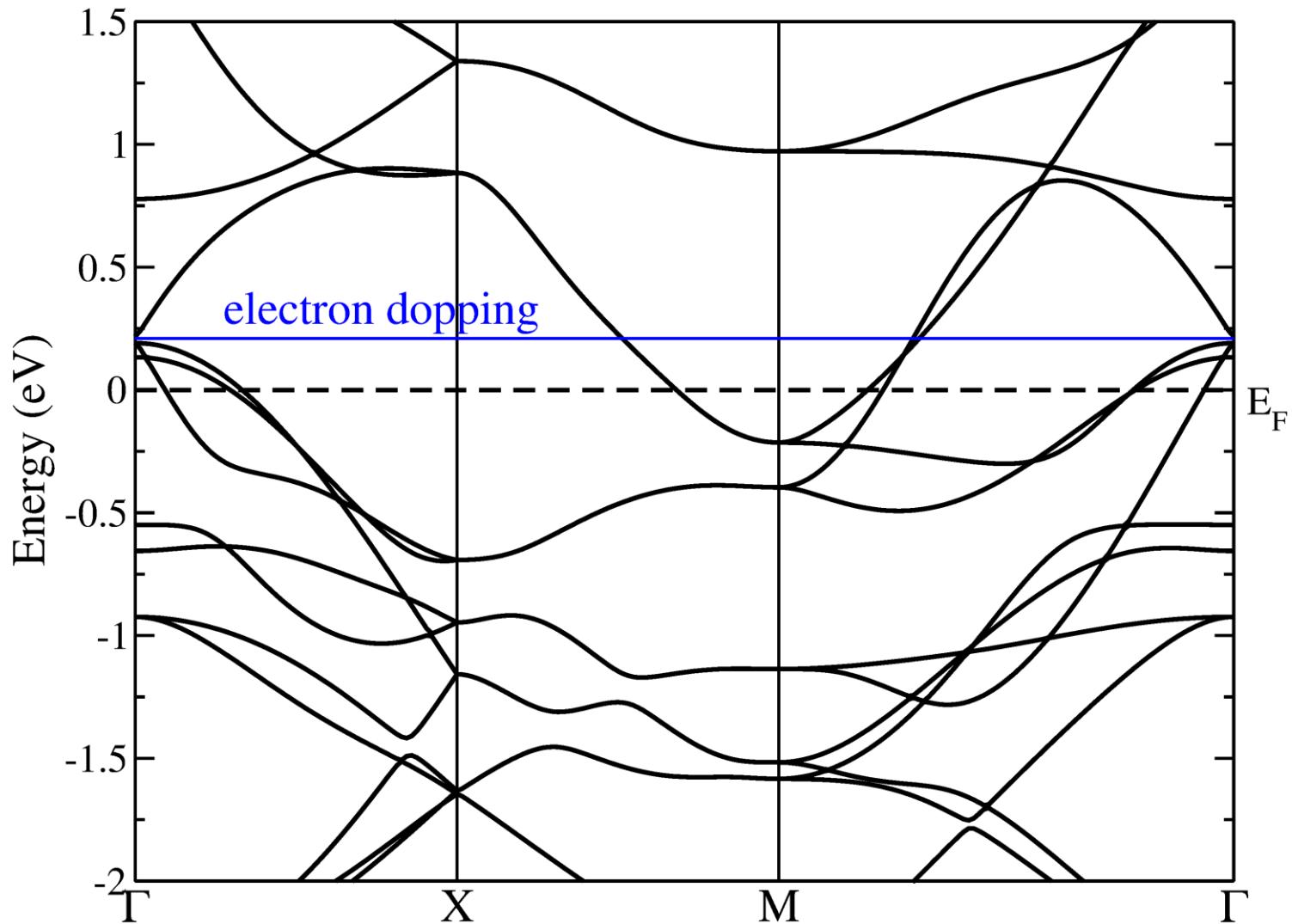
LDA зонная структура объёмного FeSe и монослоя FeSe



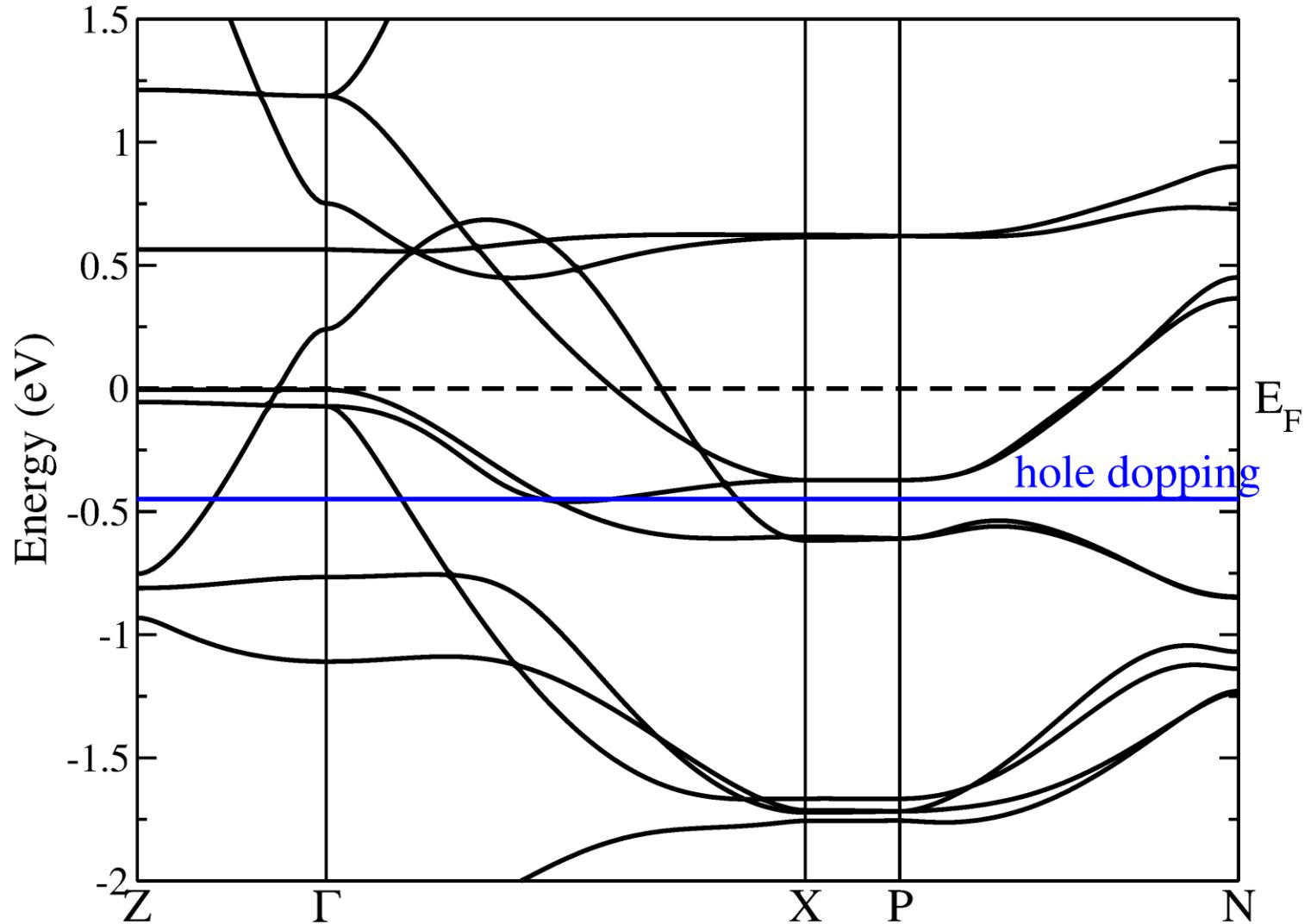
LDA зонная структура монослоя FeSe и монослоя FeSe на SrTiO₃



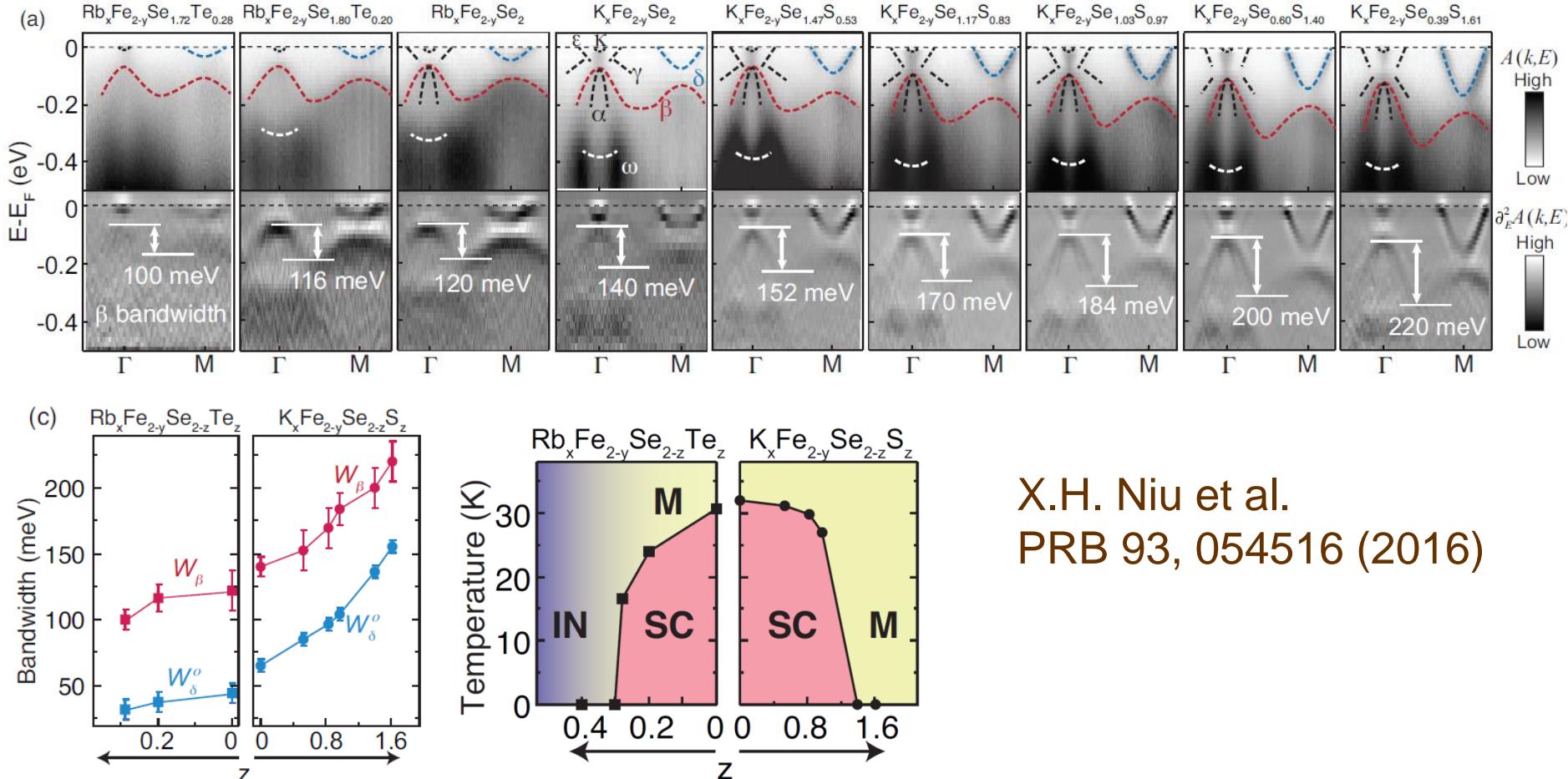
LDA зонная структура LiOHFeSe



LDA зонная структура KFe_2Se_2



$K_{1-x}Fe_{2-y}Se_{2-z}S_z$: ARPES

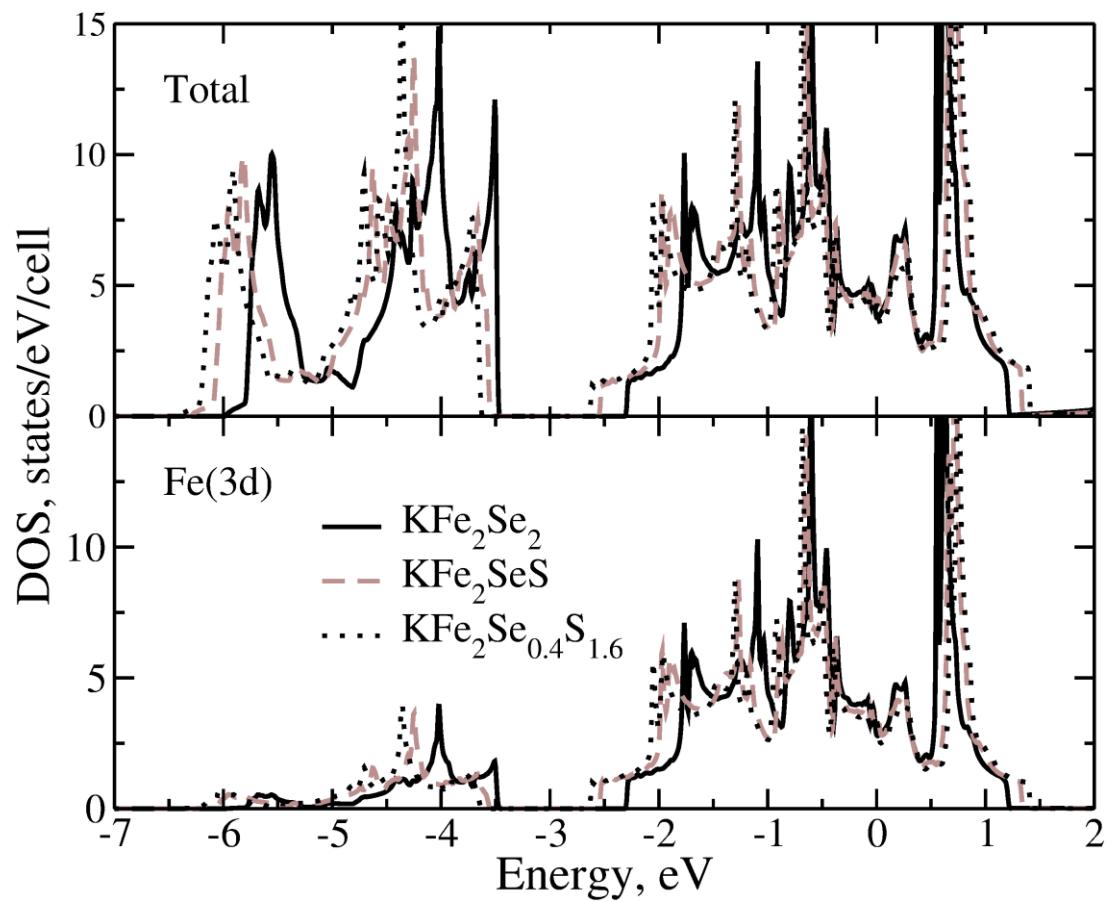
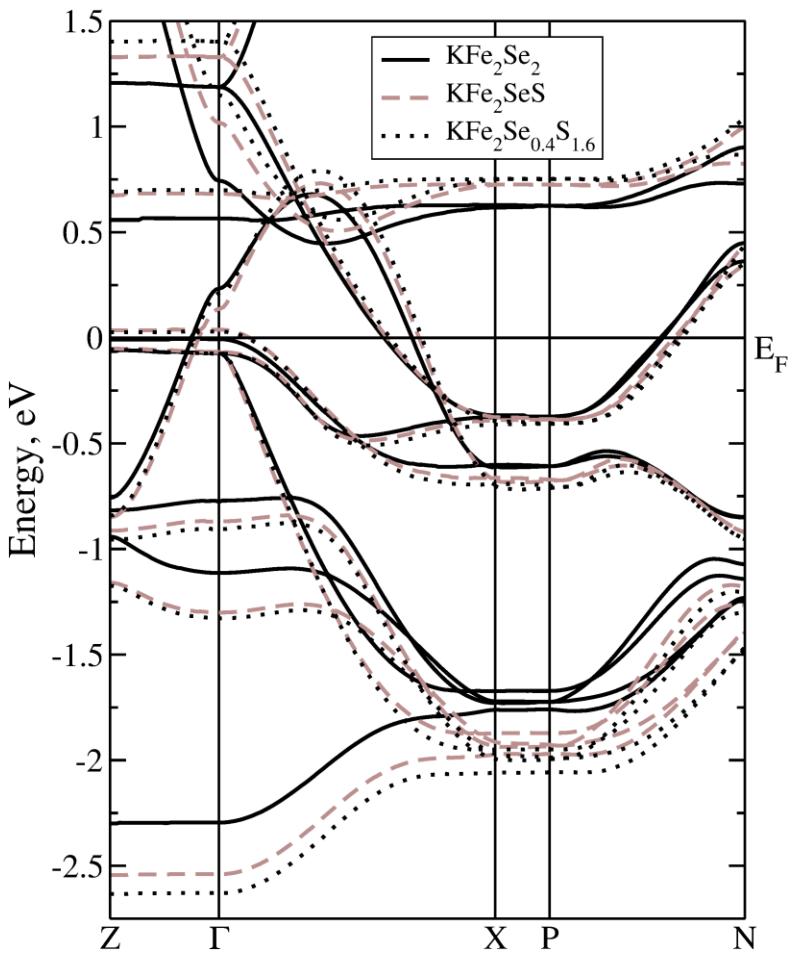


X.H. Niu et al.
PRB 93, 054516 (2016)

Замещение Se изовалентной S.

У KFe_2S_2 постоянные решётки меньше, чем у KFe_2Se_2 .
Поэтому постепенное замещение селена серой, приводит к постепенному уменьшению параметров решётки.

$K_{1-x}Fe_{2-y}Se_{2-z}S_z$: LDA зоны

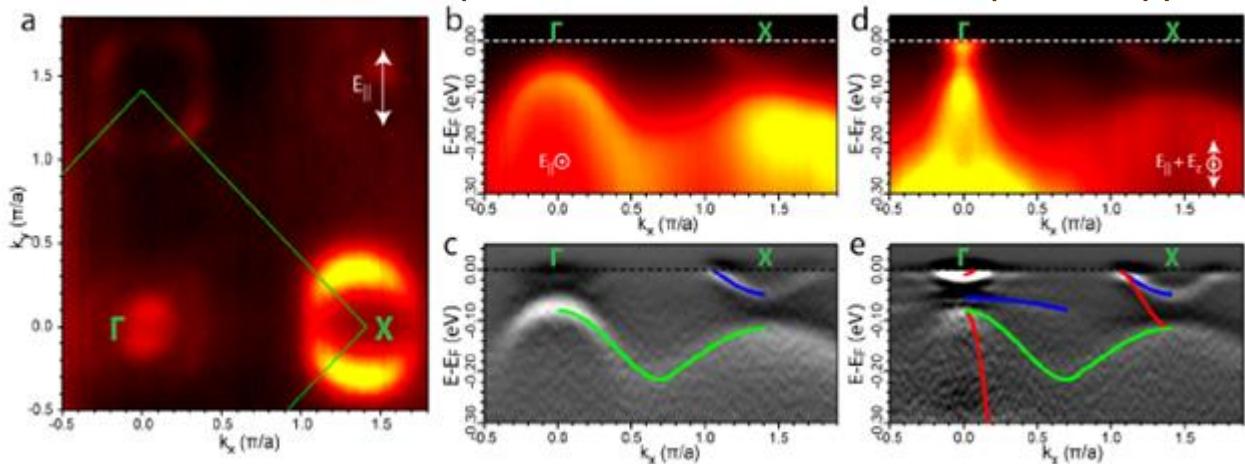


$K_xFe_{2-y}Se_{2-z}S_z$	a , Å	c , Å	Bandwidth of Fe-3d states, eV
K Fe_2Se_2	3.9136	14.0367	3.5
K $0.70Fe_{1.55}Se_{1.01}S_{0.99}$	3.805	13.903	3.9
K $0.80Fe_{1.64}Se_{0.42}S_{1.58}$	3.781	13.707	4.0

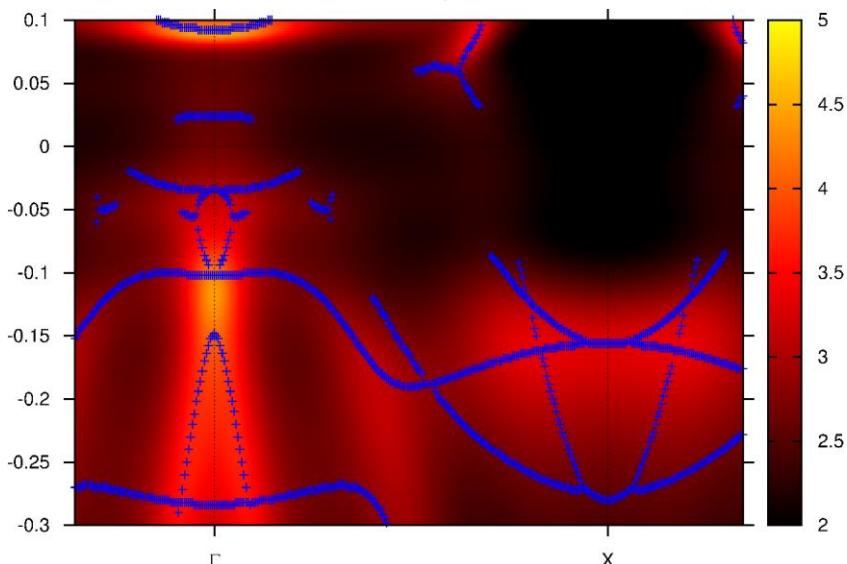
$K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$: сравнение LDA+DMFT и ARPES

ARPES (PRL 110, 067003 (2013))

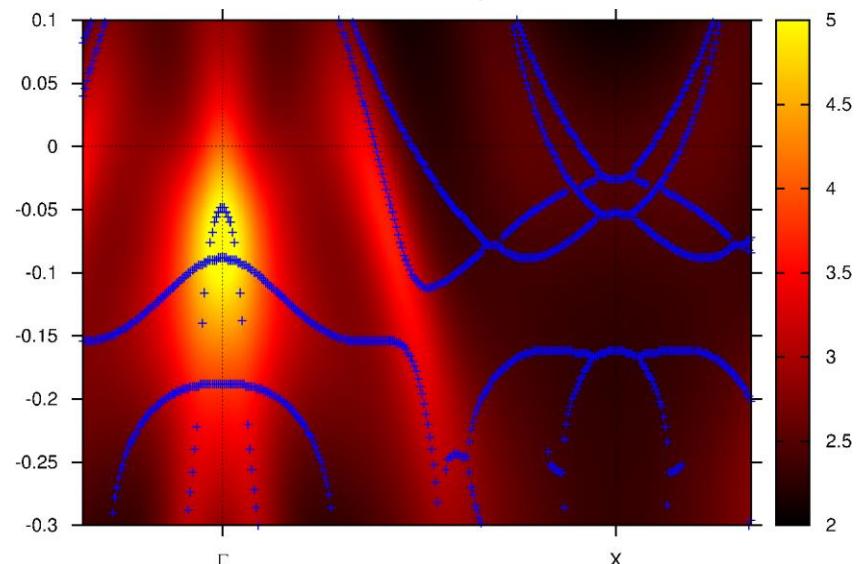
Параметры
взаимодействия:
 $U=3.75, J=0.56$



LDA'+DMFT(HF-QMC) *



LDA'+DMFT(CT-QMC)



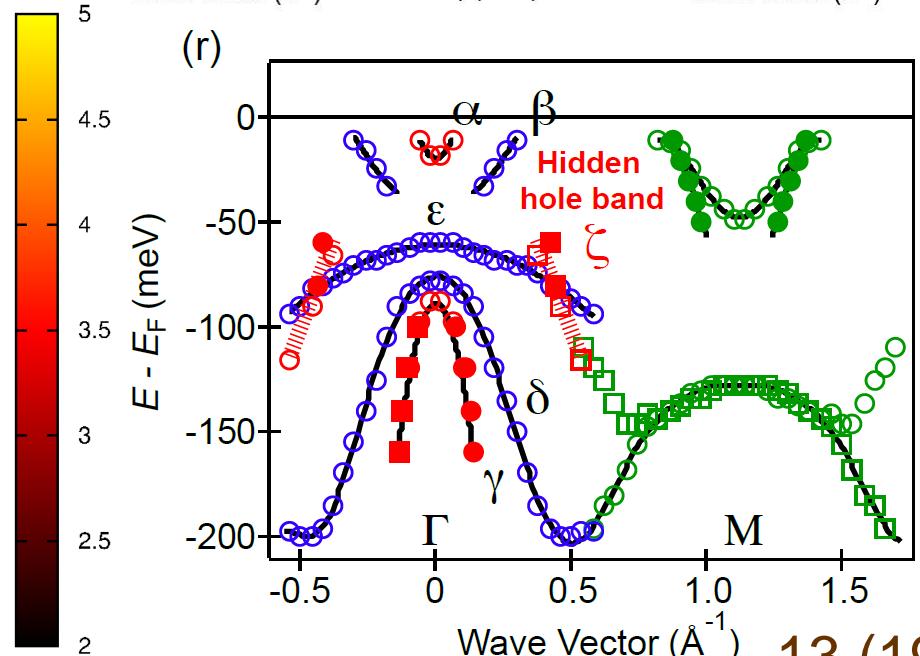
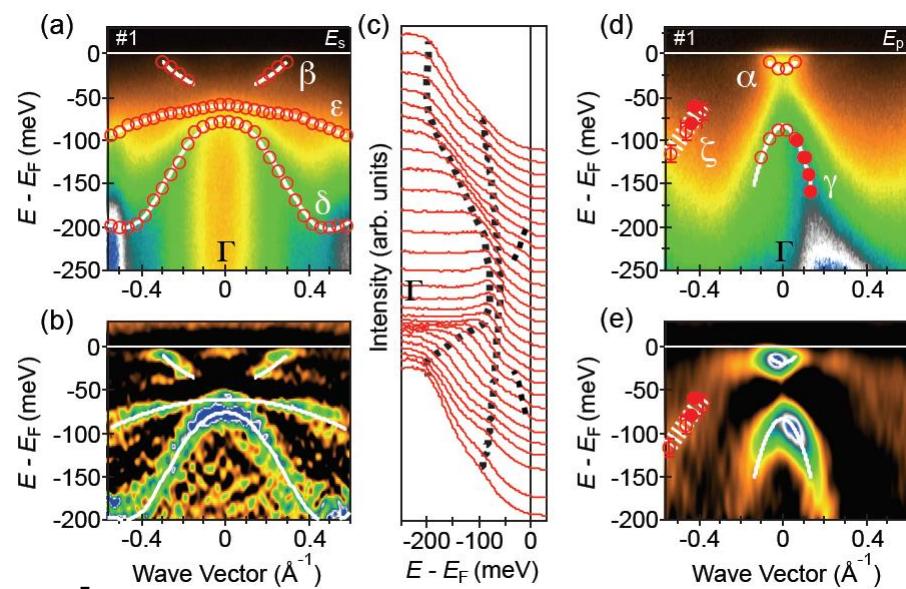
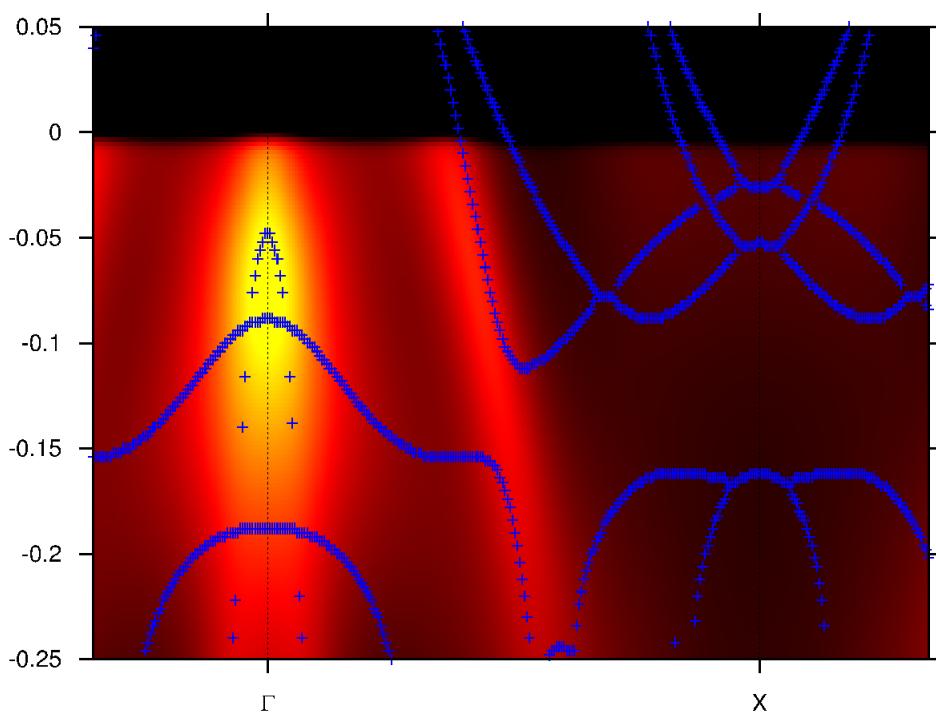
* Письма в ЖЭТФ 97, 18 (2013)

Х – дисперсии квазичастиц в LDA+DMFT

$K_{0.62}Fe_{1.7}Se_2$: сравнение LDA+DMFT и ARPES

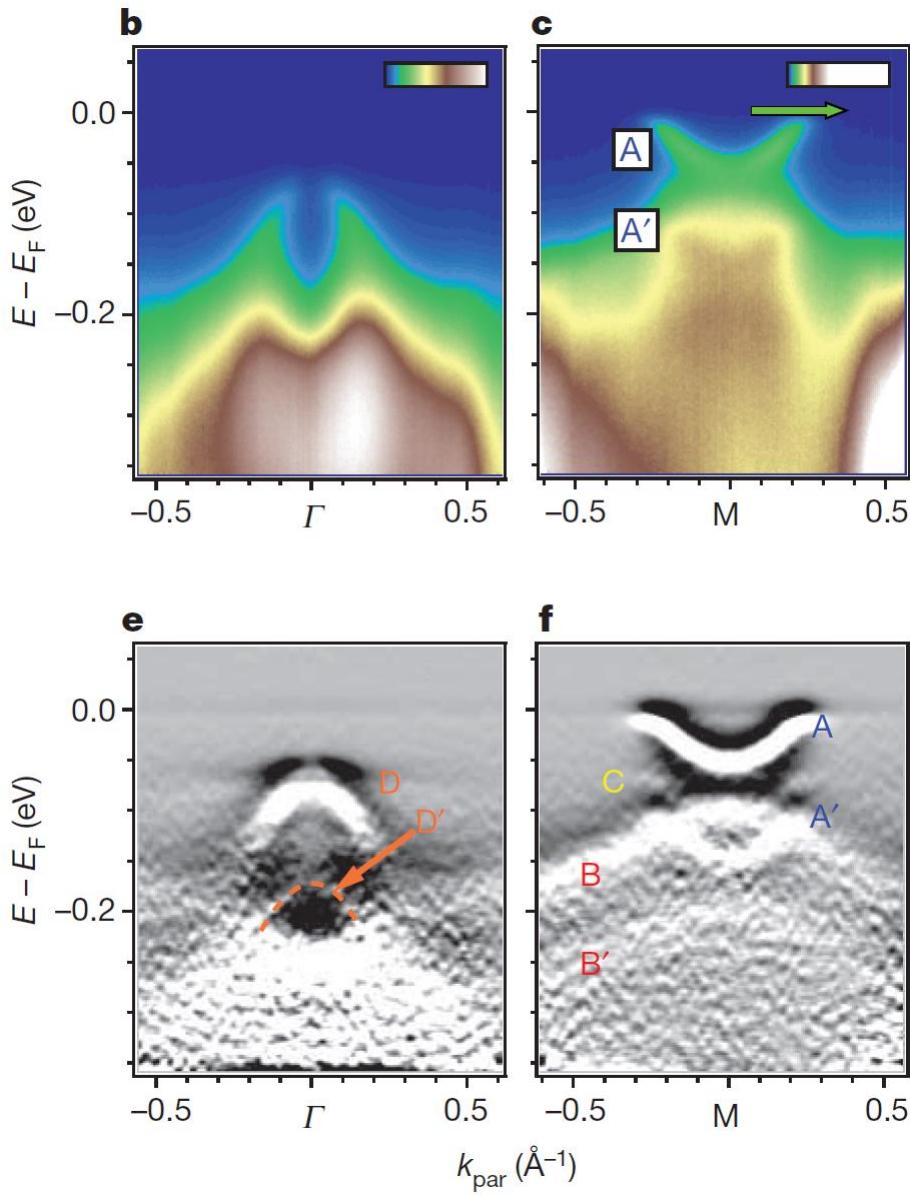
ARPES
M. Sunagawa et al.
J. Phys. Soc. Jpn.
85, 073704 (2016)

LDA'+DMFT(CT-QMC)

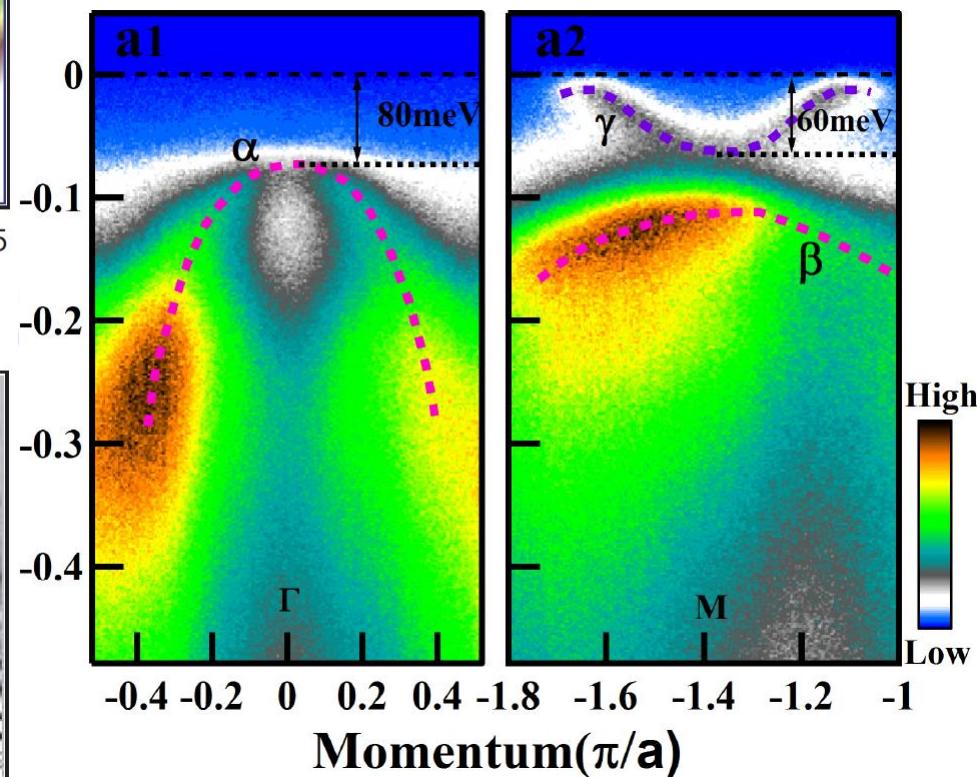


Монослой FeSe на SrTiO₃: ARPES

J.J. Lee et al. Nature 515, 245 (2014)

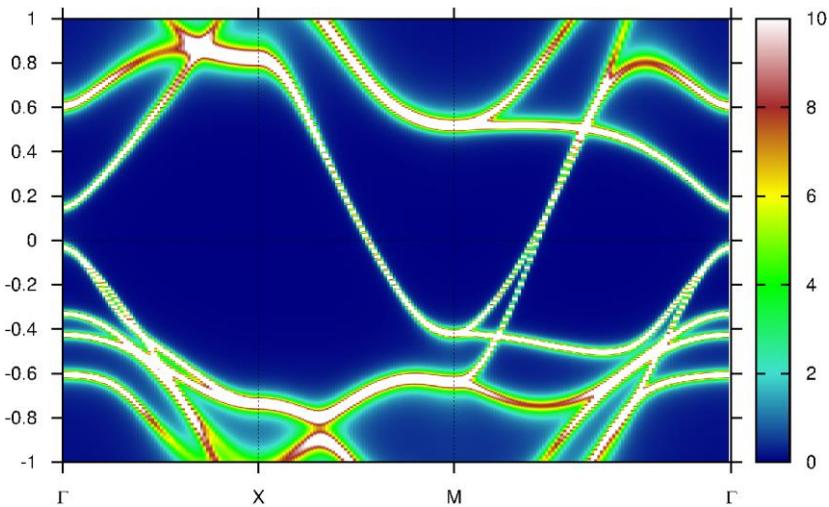


D. Liu et al. Nature Communications
3, 931 (2012)

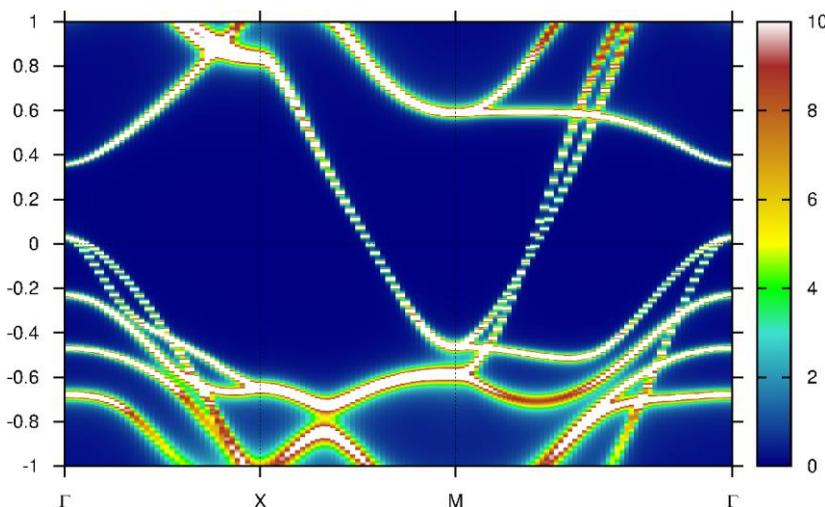


Монослой FeSe: LDA+DMFT

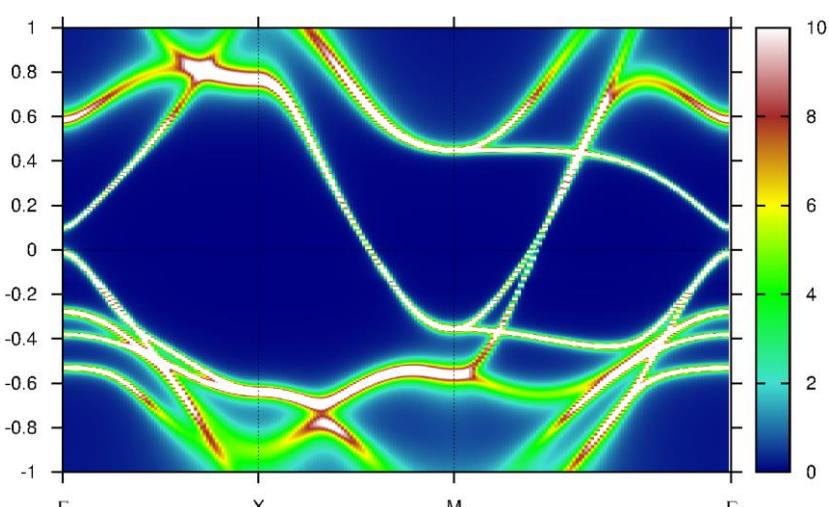
LDA+DMFT, $U=3.5$, $J=0.85$



LDA'+DMFT, $U=3.5$, $J=0.85$



LDA+DMFT, $U=5.0$, $J=0.9$

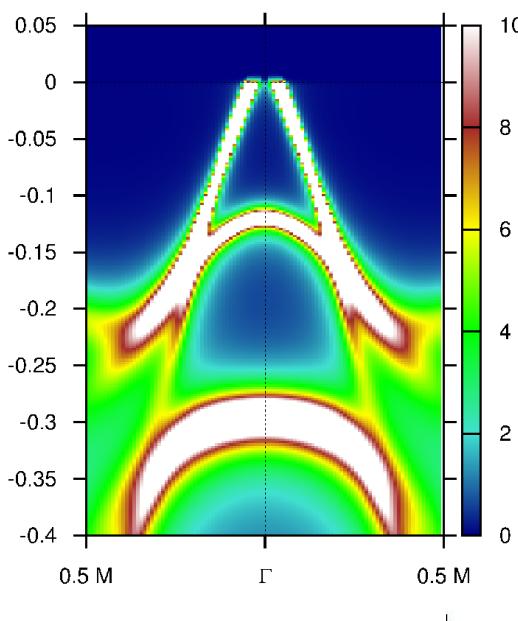


Эффективное сжатие LDA зон
за счёт хаббардовского
взаимодействия $1/Z \sim 1.3$ и 1.5
при $U=3.5$ и $U=5.0$ соотв.

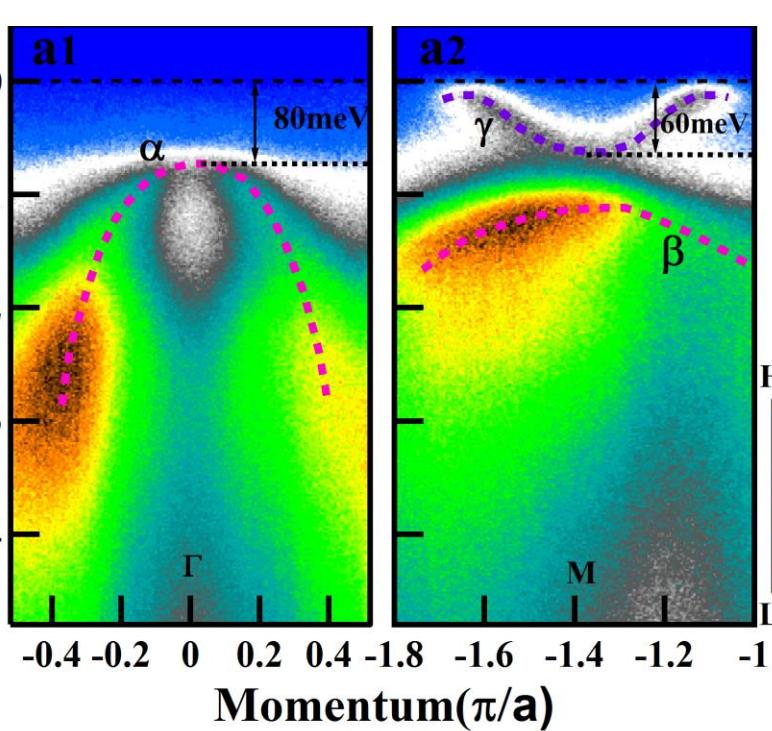
LDA'+DMFT подход:
Некрасов И.А., П.Н.С., Садовский М.В.
Письма в ЖЭТФ 95, 659 (2012),
ЖЭТФ 143, 713 (2013)

FeSe на SrTiO₃: cp. LDA+DMFT и ARPES

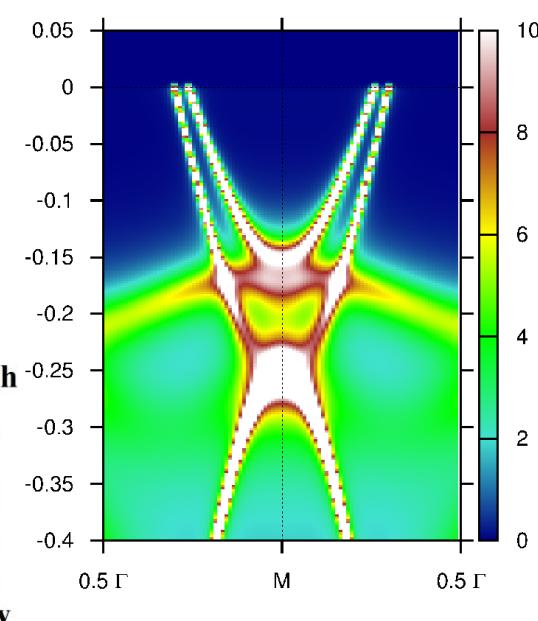
LDA+DMFT,
U=5.0, J=0.9



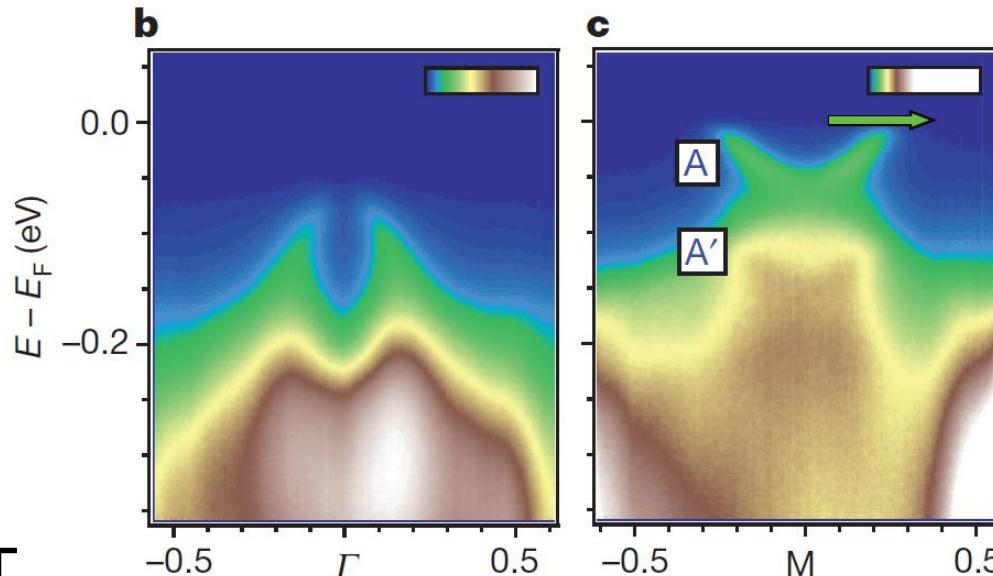
D. Liu et al. Nature
Communications 3, 931 (2012)



LDA+DMFT,
U=5.0, J=0.9



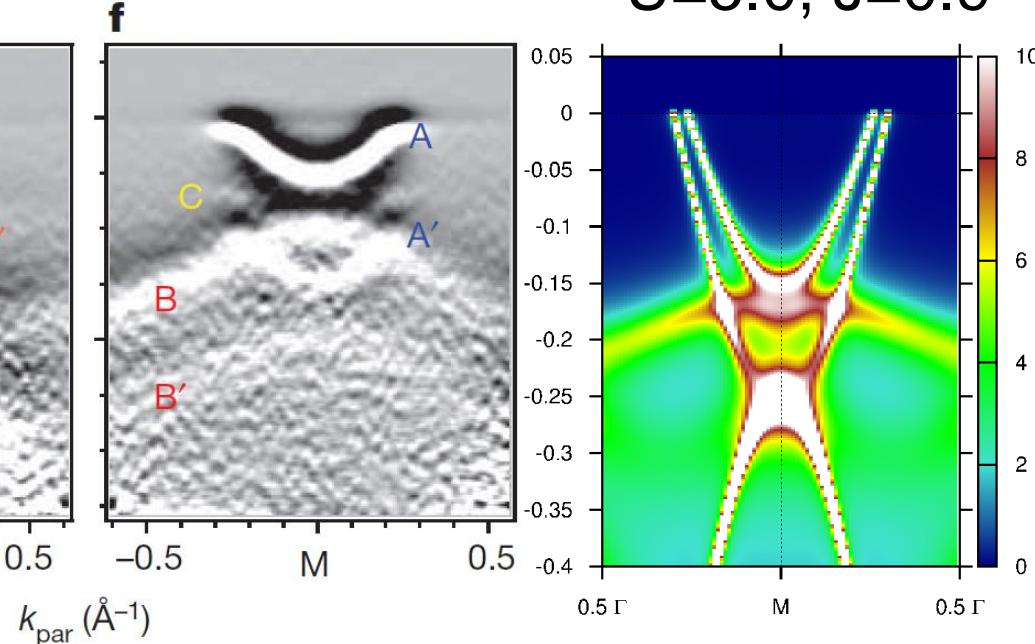
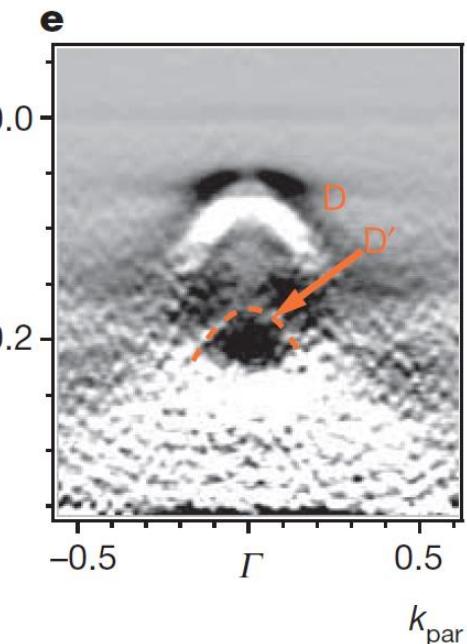
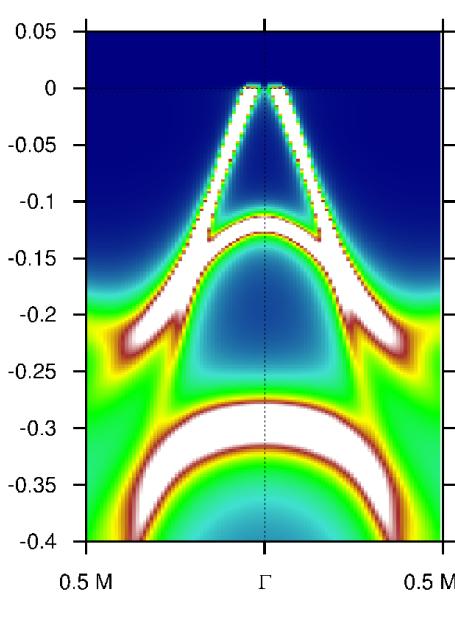
FeSe на SrTiO₃: cp. LDA+DMFT и ARPES



LDA+DMFT,
U=5.0, J=0.9

J.J. Lee et al. Nature 515, 245 (2014)

LDA+DMFT,
U=5.0, J=0.9



LDA плотности состояний для Fe-3d

Параметры решёток:

KFe_2Se_2 – $a=3.914 \text{ \AA}$
 LiOHFeSe – $a=3.80 \text{ \AA}$

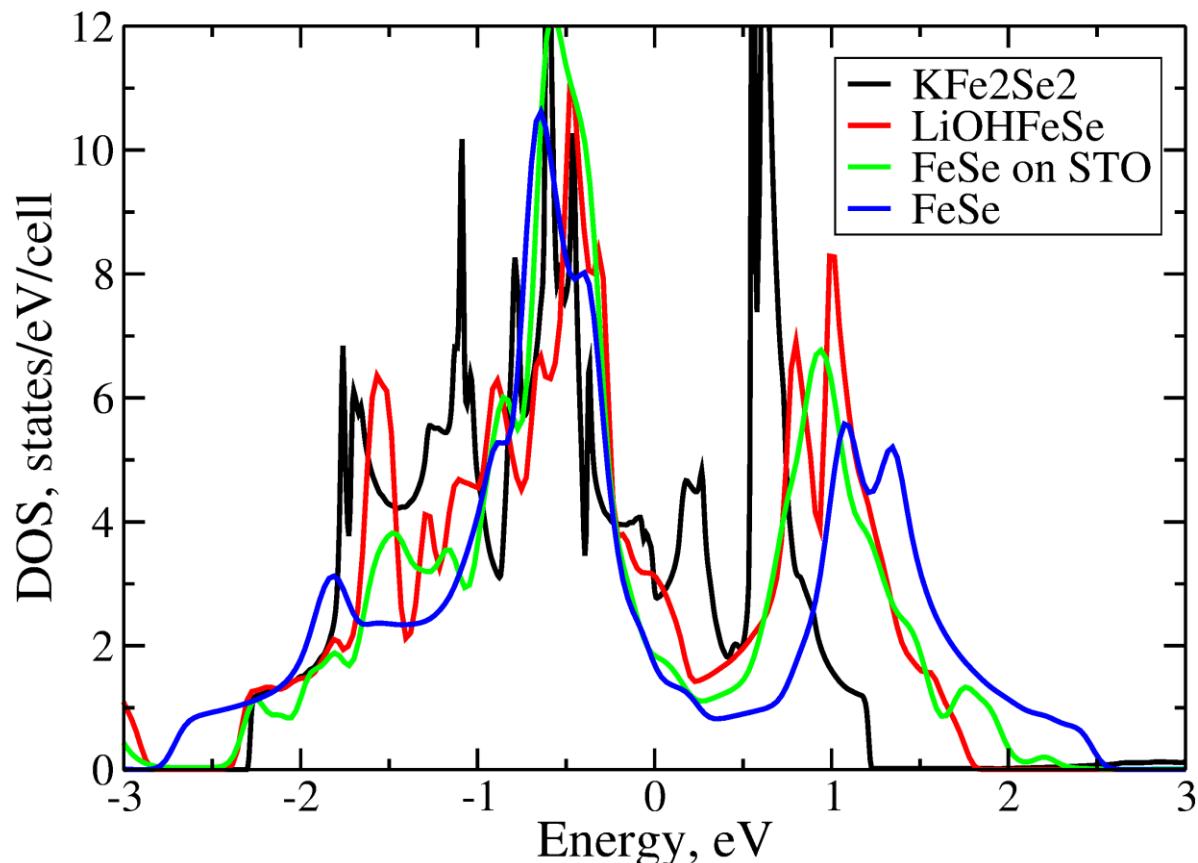
FeSe on SrTiO_3 – $a=3.90 \text{ \AA}$
 FeSe – $a=3.765 \text{ \AA}$

Ширина Fe-3d зоны:

KFe_2Se_2 – 3.44 эВ
 LiOHFeSe – 4.1 эВ
 FeSe -STO – 4.3 эВ
 FeSe – 5.2 эВ

Для сравнения в
 NaFeAs – 4.2 эВ.

Как известно
корреляции
существенны
при $U/W > \sim 1$



Выводы:

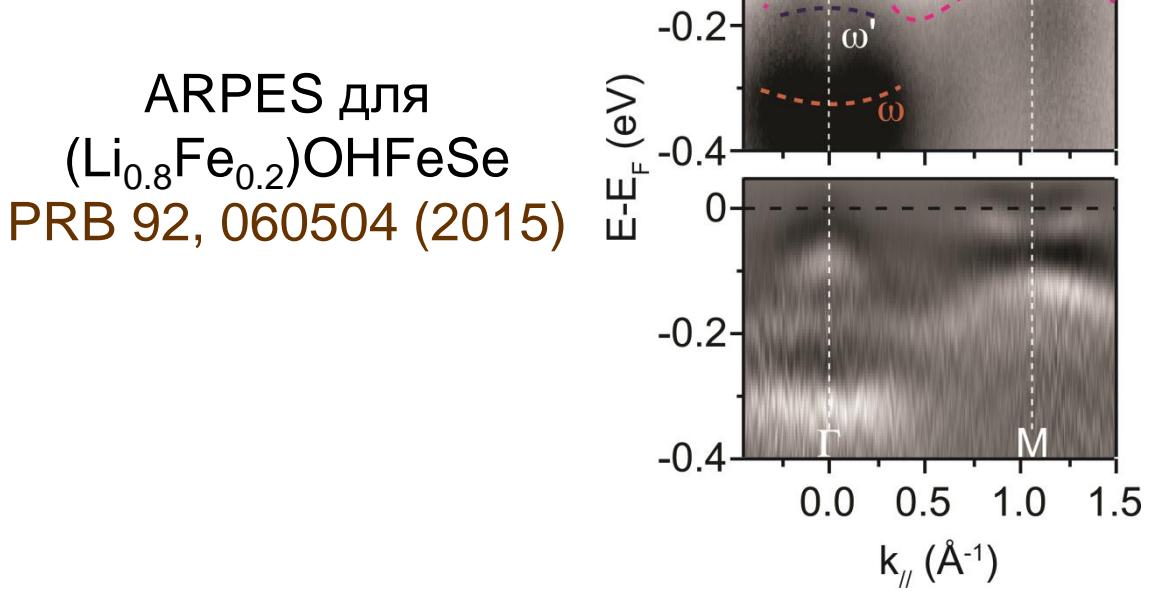
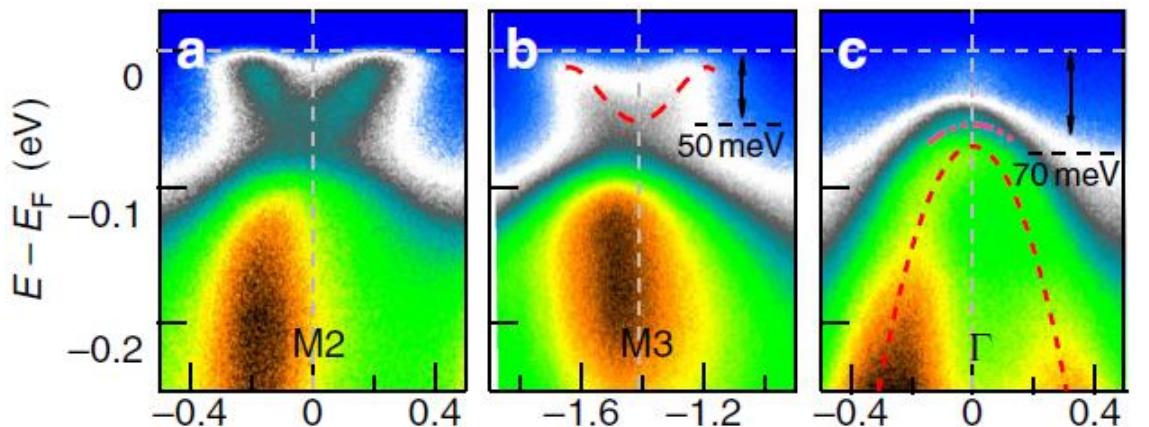
- Учёт локального кулоновского взаимодействия для системы $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ приводит к наличию зоны ~ 50 мэВ около точки X и даёт качественное и количественное согласие с ARPES данными.
- В системе монослой FeSe без подложки корреляционные эффекты малы ввиду большой ширины зоны ~ 5 эВ.
- Учёт подложки для системы монослой FeSe приводит к увеличении корреляционных эффектов.
Однако, положение зоны около точки M ~ 150 мэВ.
Возможно необходимо другое допирирование.

Работа поддержана: грантом Президента РФ МК-5957.2016.2,
грантом РФФИ № 14-02-00065.

Спасибо за внимание!

LiOHFeSe: сравнение LDA+DMFT и ARPES

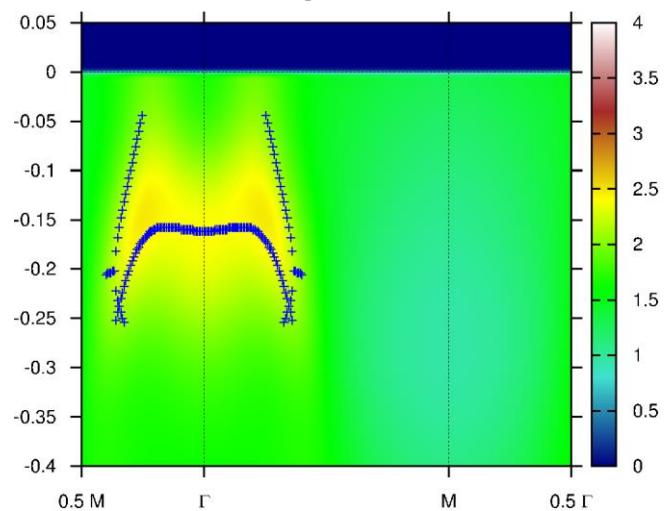
ARPES для $(\text{Li}_{0.84}\text{Fe}_{0.16})\text{OHFe}_{0.98}\text{Se}$
Nature Communications 7, 10608 (2016)



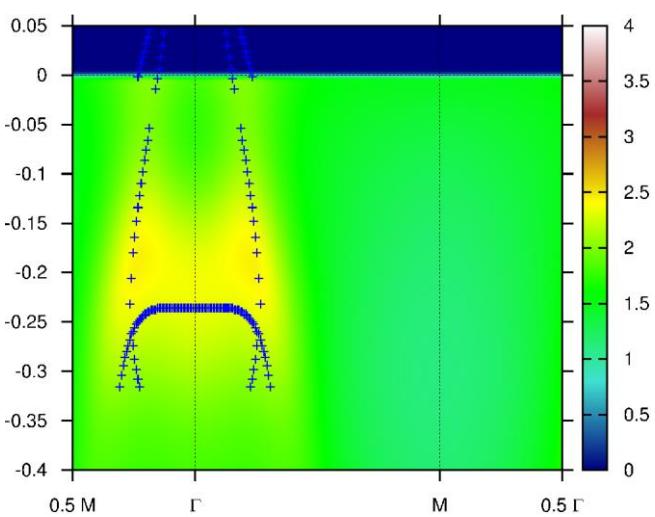
ARPES для
 $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$

PRB 92, 060504 (2015)

$U=3.5$, $J=0.9$
dopping 0 e/FeSe

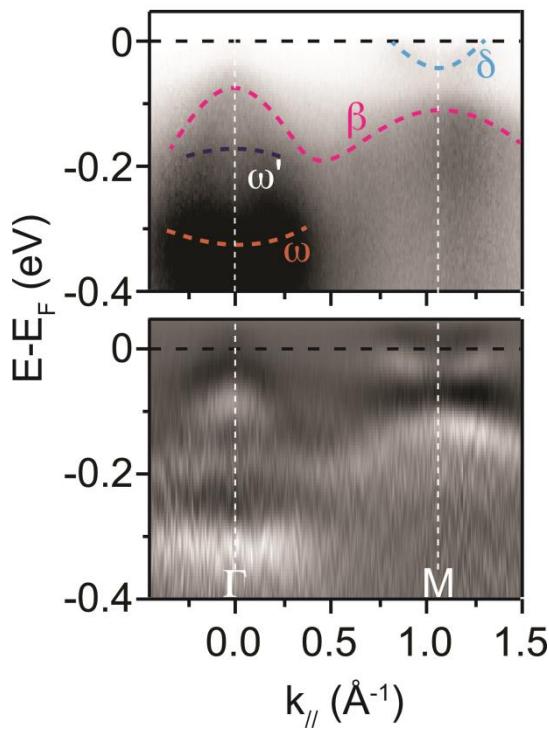


dopping +0.1 e/FeSe

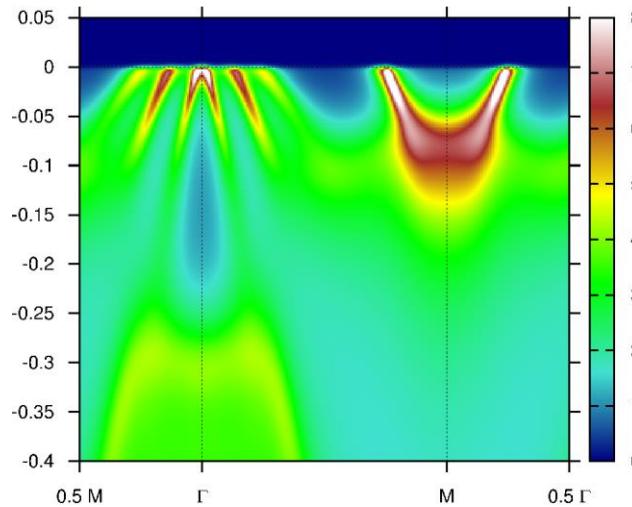


LiOHFeSe: сравнение LDA+DMFT и ARPES

ARPES ($\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$)OHFeSe
PRB 92, 060504 (2015)



$U=3.5, J=0.9$
dopping +0.2 e/FeSe



dopping +0.3 e/FeSe

$U=4.0, J=0.9$
+0.3 e/FeSe

