российская академия наук уральское отделение

Институт Электрофизики

Исследование электронной структуры сверхпроводников в нормальном состоянии с учётом деформаций решетки и наличия поверхности

01.04.07 «физика конденсированного состояния»

Слободчиков Анатолий Алексеевич

Научный руководитель: д.ф.-м.н., член-корр. РАН Некрасов Игорь Александрович

Екатеринбург, 2019

Цель работы

Исследовать электронную структуру различных сверхпроводников в нормальном состоянии в рамках теории функицонала плотности (DFT) с учетом деформации решетки и наличия поверхности.

Задачи

- 1. Изучить электронную структуру изолированного монослоя FeSe при изменении кристаллических параметров и монослоя FeSe на поверхности SrTiO₃ с учетом релаксации кристаллической структуры в рамках DFT-LDA подхода в сравнении с результатами для
 - изолированного монослоя FeSe.
- 2. Изучить влияние механических микросмещений в CuO₂ слоях (расстояния Cu-O) на электронную структуру классического представителя медных ВТСП La₂CuO₄ в DFT-LDA подходе.
- 3. Изучить электронную структуру объемного SnAs и (111) поверхности SnAs в рамках DFT-GGA подхода в сравнении с экспериментальными данными ARPES (angle-resolved photoemission spectroscopy).

Актуальность темы исследования

- Объектами исследования в данной работе являются системы, демонстрирующие сверхпроводимость.
- Изучение электронной структуры нормального состояния сверхпроводника является важным элементом для понимания сверхпроводящего состояния.
- Наряду с наиболее популярными параметрами, которые влияют на критическую температуру сверхпроводящего перехода Т_с, — давление, концентрация, магнитное поле, недавно предложено рассматривать влияние деформаций решетки (микроискажения).
- Используемые методы: теория функционала плотности DFT (density functional theory) в приближении локальной плотности LDA* (local density approximation) и GGA** (generalized gradient approximation).

*W. Kohn and L. J. Sham, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Phys. Rev. 140, A1133, 1965.
**Patton D.C., Pederson M.R., Porezag D.V. (1998) The Generalized-Gradient Approximation to Density Functional Theory and Bonding. In: Kumar V., Sengupta S., Raj B. (eds) Frontiers in Materials Modelling and Design. Springer, Berlin, Heidelberg



Mizuguchi et al. Anion height dependence of Tc for the Fe-based superconductor. Supercond Sci Tech 2010; 23: 054013.



Публикации по теме НКР

По теме диссертации опубликовано 10 печатных работ, из них 3 — в рецензируемых научных журналах, 7 — в сборниках трудов конференций.

- 1. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, M. V. Sadovskii and A. A. Slobodchikov, Low Temperature Physics 42, 891 (2016).
- I. A. Makarov, V. A. Gavrichkov, E. I. Shneyder, I. A. Nekrasov, A. A. Slobodchikov, S. G. Ovchinnikov, A. Bianconi, J Supercond Nov Magn (2019) 32: 1927.
- P. I. Bezotosnyi, K. A. Dmitrieva, A. V. Sadakov, K. S. Pervakov, A. V. Muratov, A. S. Usoltsev, A. Yu. Tsvetkov, S. Yu. Gavrilkin, N. S. Pavlov, A. A. Slobodchikov, O. Yu. Vilkov, A. G. Rybkin, I. A. Nekrasov, V. M. Pudalov, Electronic Band Structure and Superconducting Properties of SnAs, Phys. Rev. B., 2019, *в редакции*

Апробация результатов работы

Основные результаты докладывались на следующих научных мероприятиях:

- 1. XV, XVII, XVIII Всероссийские школы-семинары по проблемам физики конденсированного состояния вещества, г. Екатеринбург, Россия, 2014-2018.
- 2. XVIII, XIX, XX, XXI Конференции молодых ученых ИЭФ УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия, 2016-2019.
- 3. AMM-2016, AMM-2019 Ab-initio based modeling of advanced materials, г. Екатеринбург, Россия, 2016, 2019.
- 4. ВНКСФ-23 Всероссийская научная конференция студентовфизиков и молодых ученых, г. Екатеринбург, Россия, 2017.
- 5. BASIS Foundation Summer School 2018 "Many body theory meets quantum information", г. Москва, Россия, 2018.

Сравнение экспериментальных и теоретических поверхностей Ферми монослоя FeSe

Массивный образец: T_c(FeSe) ~ 8 K (Hsu et al., 2008)

Монослой на подложке: T_c(FeSe/STO) ~ 70 K (Qing-Yan et al., 2012)



На эксперименте в Г-точке (центр зоны Бриллюена) не наблюдается дырочных листов поверхности Ферми, в то время как DFT-LDA расчет показывает их наличие.

Изменение ПФ при изменении параметров решетки для объемного образца FeSe



Разумное изменение параметров решетки объемного образца FeSe не приводит к согласию рассчитанной DFT-LDA электронной структуры с ARPES экспериментом.

DFT-LDA зоны изолированного монослоя FeSe вблизи уровня Ферми (E_f = 0)



Допирование монослоя FeSe может обеспечить качественное согласие DFT-LDA электронной структуры с ARPES экспериментом, однако допирование должно быть слишком большим, а возле точки М электронные листы получаются намного больше, чем в эксперименте.

Сравнение DFT-LDA зон изолированного монослоя FeSe и монослоя FeSe/STO вблизи уровня Ферми





I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, M. V. Sadovskii and A. A. Slobodchikov, Low Temperature Physics 42, 891 (2016).

Защищаемое положение Nº1

Сравнение электронной структуры объемного FeSe, изолированного монослоя FeSe и монослоя FeSe на подложке SrTiO₃.

- Показано, что изменение геометрии объемного FeSe материала не позволяет объяснить экспериментально наблюдаемую поверхность Ферми.
- Показано, что при достаточно большом электронном допировании в изолированном монослое FeSe удается достичь качественного согласия с экспериментом, однако электронный лист вокруг точки М зоны Бриллюэна получается слишком большим.
- Показано, что наличие подложки также не решает проблему дырочных листов поверхности Ферми в Г-точке, однако приводит к появлению на уровне Ферми дырочного кармана в точке М зоны Бриллюэна, сформированного 2р состояниями кислорода, и к снятию вырождения состояний Fe-3d в точке М из-за введения в расчет поверхности.

Общий вид фазовой диаграммы ВТСП на основе оксидов меди в координатах температура – дырочное легирование (Т-р)



Общий вид фазовой диаграммы ВТСП на основе оксидов меди в координатах температура сверхпроводящего перехода – микросмещения Т₋-є



- R_{си-0} расстояние Си-О
- d₀ = 1.97 Å, расстояние Cu-O в La₂CuO₄
- ٤=(d-d₀)/d₀— микросмещение

0.1 0.08 0.06 0.04 0.02 0 0 0.05 0.1 0.15 0.2 0.25 Doping δ S Agrestini et al 2003 J. Phys. A: Math. Gen. 36 9133

Для различных представителей ВТСП купратов R_{Cu-O} меняется в определенном диапазоне. Это можно представить в виде микросмещений в структуре классического представителя ВТСП купратов La₂CuO₄.

Работа проведена совместно с Институтом физики им. Киренского СО РАН, Красноярск.

Кристаллическая структура La₂CuO₄ (высокотемпературная тетрагональная фаза)



CuO6 unit strain



Исследуемый диапазон параметра решетки а: 3.74~3.94 Å (3.78 Å соответствует La₂CuO₄)

Соответствующий диапазон микросмещений:

 $\delta a/a_0 = (a-a_0)/a_0: -1\% \sim 4.15\%$

Расчет параметров шестизонной модели



- Орбитали Cu-3d_{x2-y2}, Cu-3d_{z2}
- Плоскостные кислородные орбитали О-2р_x, О-2р_y
- Орбиталь О-2р_z двух апексных кислородов

Интегралы перескока и одноэлектронные энергии при разных значениях микросмещения ба/а₀

$\delta a/a_0$	-1%	-0.5%	0%	0.5%	1.5%	2.5%	3.5%	4.15%
E_{x^2}	-1.790	-1.824	-1.861	-1.900	-1.657	-2.047	-2.124	-2.180
\mathbf{E}_{z^2}	-2.056	-2.075	-2.097	-2.119	-1.821	-2.186	-2.227	-2.260
E_{p_x}	-2.724	-2.775	-2.825	-2.863	-2.541	-2.980	-3.026	-3.053
E_{p_y}	-2.724	-2.775	-2.825	-2.863	-2.541	-2.980	-3.026	-3.056
E_{p_z}	-1.741	-1.727	-1.721	-1.720	-1.541	-1.690	-1.713	-1.729
$t(x^2, p_x(p_y))$	1.450	1.427	1.403	1.379	1.313	1.280	1.232	1.201
$\mathbf{t}(z^2,\!p_x(p_y))$	0.517	0.520	0.523	0.526	0.534	0.549	0.562	0.570
$\mathrm{t}(z^2,\!p_z)$	0.779	0.798	0.820	0.838	0.860	0.880	0.905	0.918
$t(p_x,p_y)$	0.893	0.876	0.859	0.842	0.809	0.768	0.732	0.710
$t(p_x(p_y),p_z)$	0.379	0.391	0.403	0.415	0.428	0.443	0.456	0.462

Интегралы перескока получены методом DFT-LDA в пакете TB-LMTO-ASA¹ при проектировании на функции Ванье² для шестизонной модели.

¹Andersen O., Pawlowska Z., and Japsen O., Phys. Rev. B. 34, 8, 5253 (1986) ²http://amulet-code.org/

Эволюция поверхности Ферми с допированием (δа/а, = 0)



Зависимость плотности состояний от микросмещения δа/а

Аналогично изменению допирования микросмещения влияют на положение особенностей Ван-Хова, а также величину плотности состояний на уровне Ферми, которая определяет температуру сверхпроводящего перехода.

Защищаемое положение №2

Зависимость электронной структуры классического представителя медных ВТСП La₂CuO₄ от механических микросмещений в слоях CuO₂ (расстояния Cu-O или параметров a, b).

Показано, что при фиксированном значении допирования величина микросмещения влияет на положение особенностей Ван-Хова, а также на величину плотности состояний на уровне Ферми, которая определяет температуру сверхпроводящего перехода.

I. A. Makarov, V. A. Gavrichkov, E. I. Shneyder, I. A. Nekrasov, A. A. Slobodchikov, S. G. Ovchinnikov, A. Bianconi, J Supercond Nov Magn (2019) 32: 1927.

Сверхпроводник SnAs

Открыт в 1964 г.* Новый виток интереса к данной системе возник несколько лет назад.

Рис. 1. a) Image of the SnAs crystal. b) Crystal structure of SnAs.

Кристаллическая структура типа NaCl (Fm-3m). Параметр решетки: a = 5.723 Å.

Экспериментальный образец обрезан в плоскости (111).

Рис. 7. Temperature dependence of SnAs resistivity. Inset: The region of superconducting transition for the R(T) dependence

Данной исследование проведено совместно с группой экспериментаторов из Физического института им. Лебедева, РАН, Москва.

Плотности состояний и зонная структура DFT-GGA

Сравнение рассчитанной зонной структуры DFT-GGA и ARPES

Оценка параметров, характеризующих сверхпроводящее состояние на основе DFT-GGA расчета

 $\kappa = \lambda_L(0)/\xi(0) = 0.08 \ll 1/\sqrt{2}$ Параметр Гинзбурга-Ландау $\lambda_L(0) = (3\pi^2 m^*/[\mu_0 k_F^3 e^2])^{1/2} = 25.7 \text{ to } 75.43 \text{ nm}$ - глубина проникновения $\xi(0) = 0.18\hbar^2 k_F/(k_B T_c m^*) = 170.96 - 350.47 \text{ nm}$ - длина когерентности

 $\gamma_{calc} = rac{\pi^2}{3} N_A k_B^2 N(E_F)$ Линейный коэффициент теплоемкости

 $N(E_F) = 0.81 \text{ states/eV/f.u.}$ DFT-GGA Плотность состояний на уровне Ферми

 $\gamma_n = 2.67 \text{ mJ/mol}^*\text{K}^2$ Экспериментальный линейный коэффициент теплоемкости $\frac{\gamma_n}{\gamma_{calc}} = \frac{m^*}{m_e}$ $\frac{m^*}{m_e} = 1.41$ Эффективная квазичастичная масса

 $k_F = N(E_F) \frac{4\pi^2 \hbar^2}{V \frac{m^*}{m_e} m_e}$ Импульс Ферми

Защищаемое положение Nº3

Сравнение электронной структуры объемного SnAs и SnAs с поверхностью (111) с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия с ARPES данными, а также оценка параметров сверхпроводящего состояния на основе DFT-GGA результатов.

- Получена электронная структура объемного SnAs и SnAs с поверхностью (111) в рамках DFT-GGA с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия. Показано, что рассчитанная зонная структура SnAs с поверхностью (111) существенно лучше согласуется с экспериментальной зонной структурой, полученной с помощью ARPES, по сравнению с объемным SnAs. Учет спин-орбитального взаимодействия не оказывает существенного эффекта на электронную структуру.
- Оценен параметр Гинзбурга-Ландау на основе DFT-GGA расчетов.

P. I. Bezotosnyi, K. A. Dmitrieva, A. V. Sadakov, K. S. Pervakov, A. V. Muratov, A. S. Usoltsev, A. Yu. Tsvetkov, S. Yu. Gavrilkin, N. S. Pavlov, A. A. Slobodchikov, O. Yu. Vilkov, A. G. Rybkin, I. A. Nekrasov, V. M. Pudalov, Electronic Band Structure and Superconducting Properties of SnAs, Phys. Rev. B., 2019, *в редакции*