

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ



Институт Электрофизики

Влияние подложки SrTiO_3 на электронные свойства монослоя FeSe

Слободчиков А.А., аспирант 1 года, ЛТФ
Научный руководитель: Некрасов И.А.

Екатеринбург, 2016

Новые “железные” ВТСП



Published on Web 02/23/2008

Iron-Based Layered Superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05\text{--}0.12$) with $T_c = 26$ K

Yoichi Kamihara,^{*,†} Takumi Watanabe,[‡] Masahiro Hirano,^{†,§} and Hideo Hosono^{†,‡,§}

ERATO-SORST, JST, Frontier Research Center, Tokyo Institute of Technology, Mail Box S2-13, Materials and Structures Laboratory, Tokyo Institute of Technology, Mail Box R3-1, and Frontier Research Center, Tokyo Institute of Technology, Mail Box S2-13, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama 226-8503, Japan

Received January 9, 2008; E-mail: hosono@msl.titech.ac.jp

1. Doped RE111 (RE=La,Ce,Pr,Nd,Sm,Tb,Dy) with T_c about 25–55 K, with most typical representatives such as $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ [1,5–12] and $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeP}$ [13] with much lower $T_c = 6.6$ K.
2. Doped A122 (A=Ba,Sr), such as $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ [14–17] and T_c about 38 K.
3. $\text{Li}_{1-x}\text{FeAs}$ with $T_c = 18$ K [18, 19].
4. (Sr, Ca, Eu)FFeAs [20–22] with $T_c = 36$ K [23].
5. $\text{Sr}_4(\text{Sc,V})_2\text{O}_6\text{Fe}_2(\text{P,As})_2$ with $T_c = 17$ K [24].
6. FeSe , $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ with T_c up to 14 K [25].

Типичные кристаллические структуры

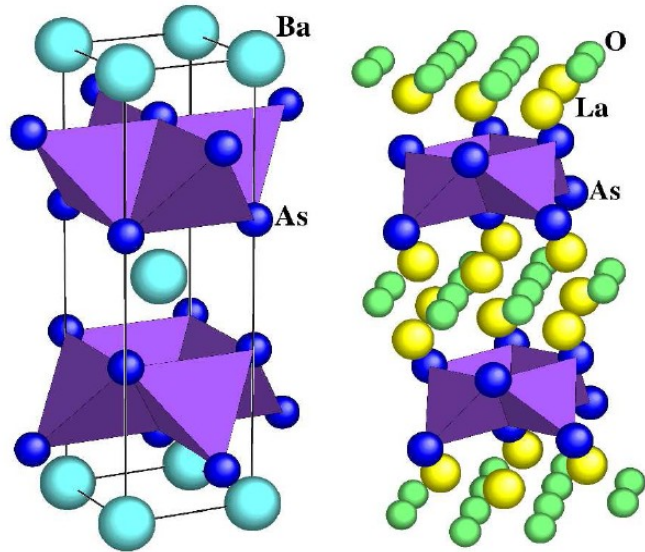


Fig. 1. Crystal structure of BaFe_2As_2 (left) and LaOFeAs (right). FeAs tetrahedra (violet) form two-dimensional layers sandwiched by Ba ion (cyan) or LaO layers (yellow and green).

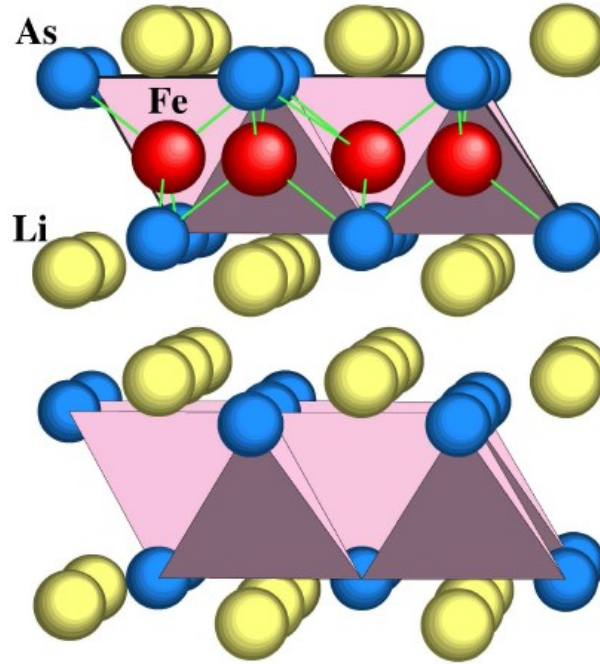
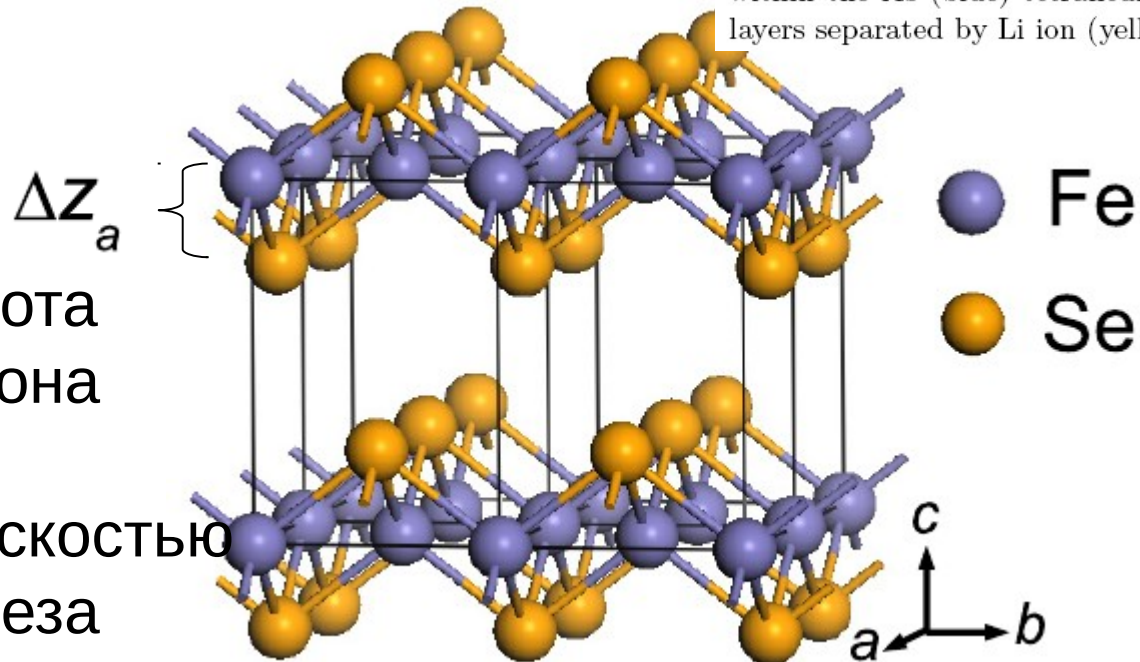
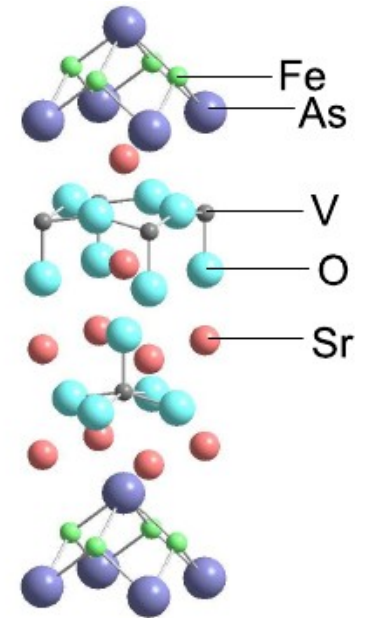
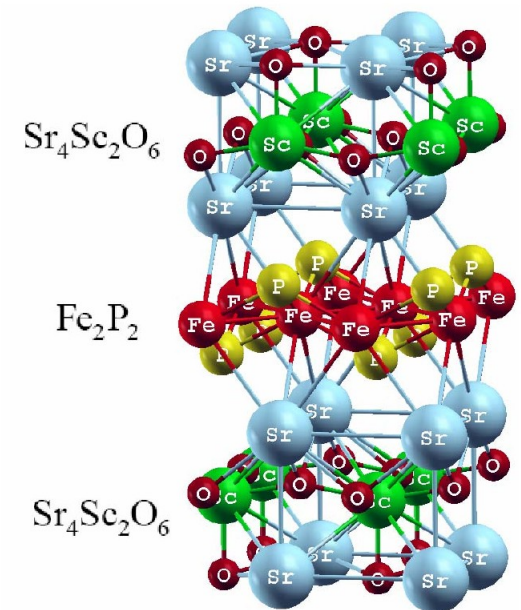


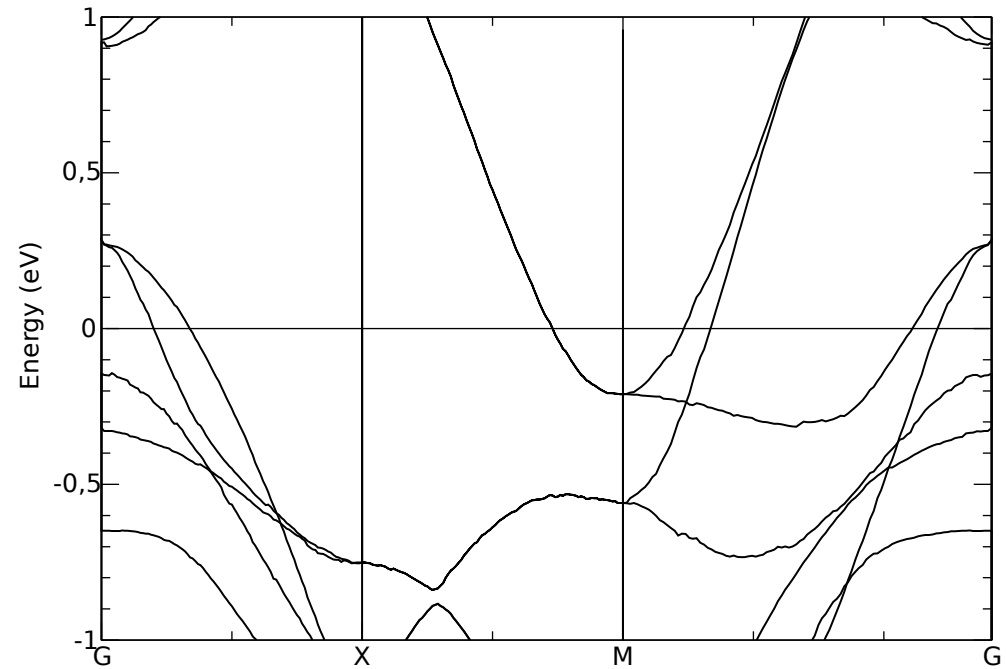
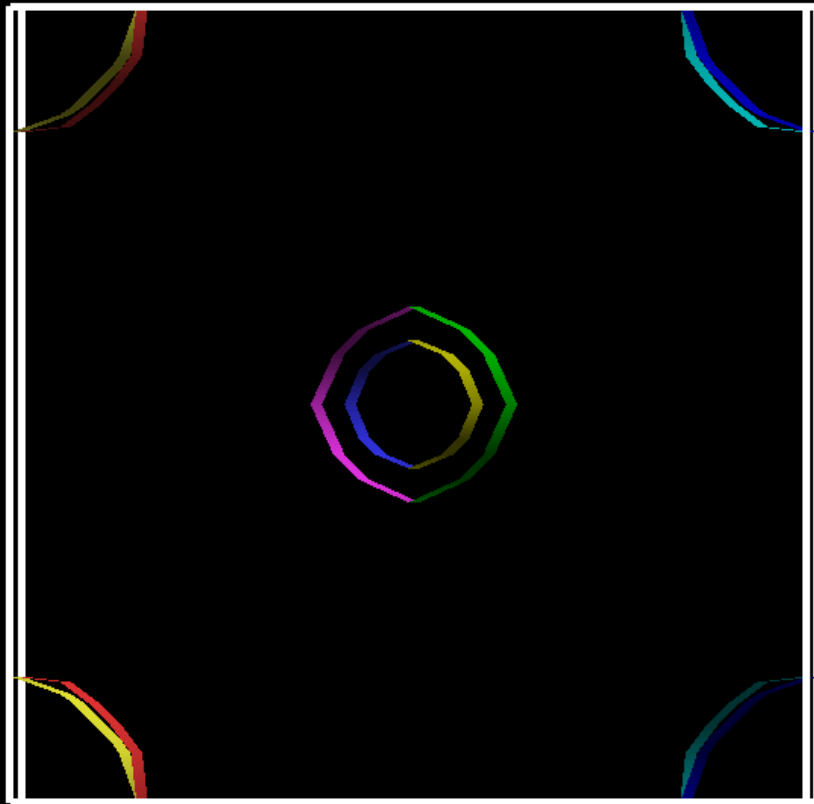
Fig. 1. Crystal structure of LiFeAs . Fe ions (red) within the As (blue) tetrahedra form two-dimensional layers separated by Li ion (yellow) stratum.



высота
аниона
над
плоскостью
железа



Типичная поверхность Ферми для железных ВТСП

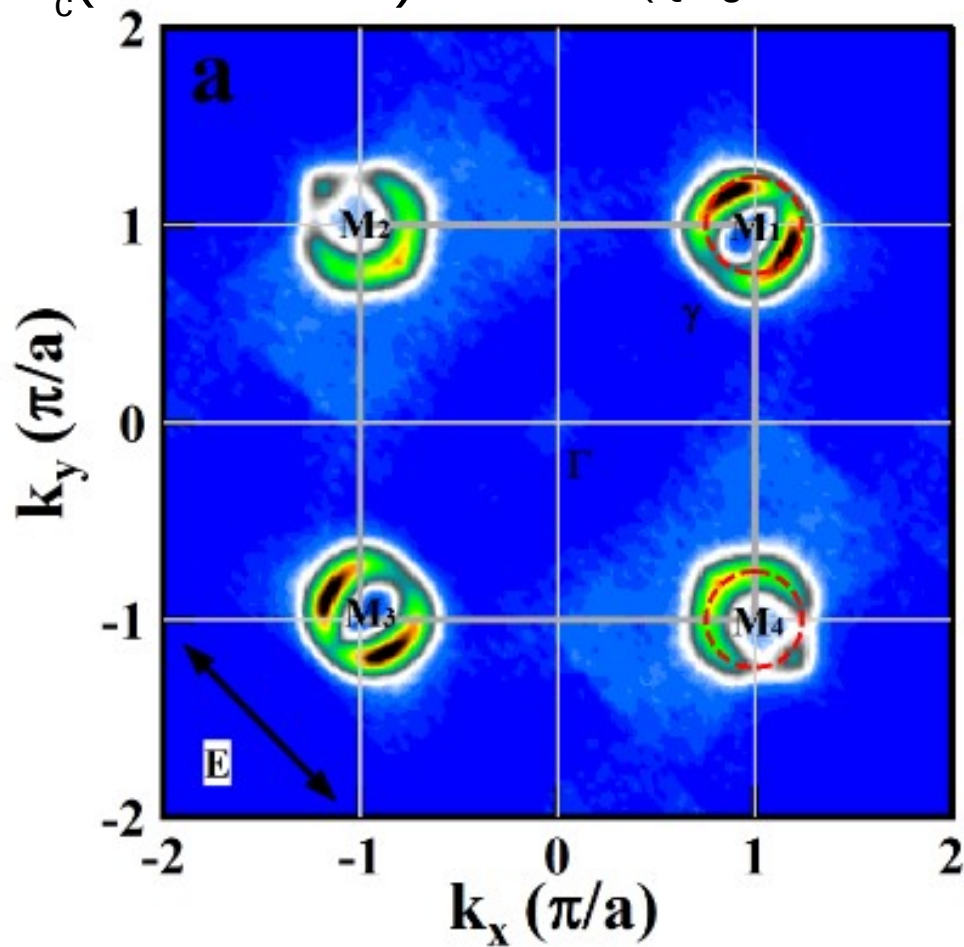


FeSe, объемный образец

Поверхности Ферми монослоя FeSe

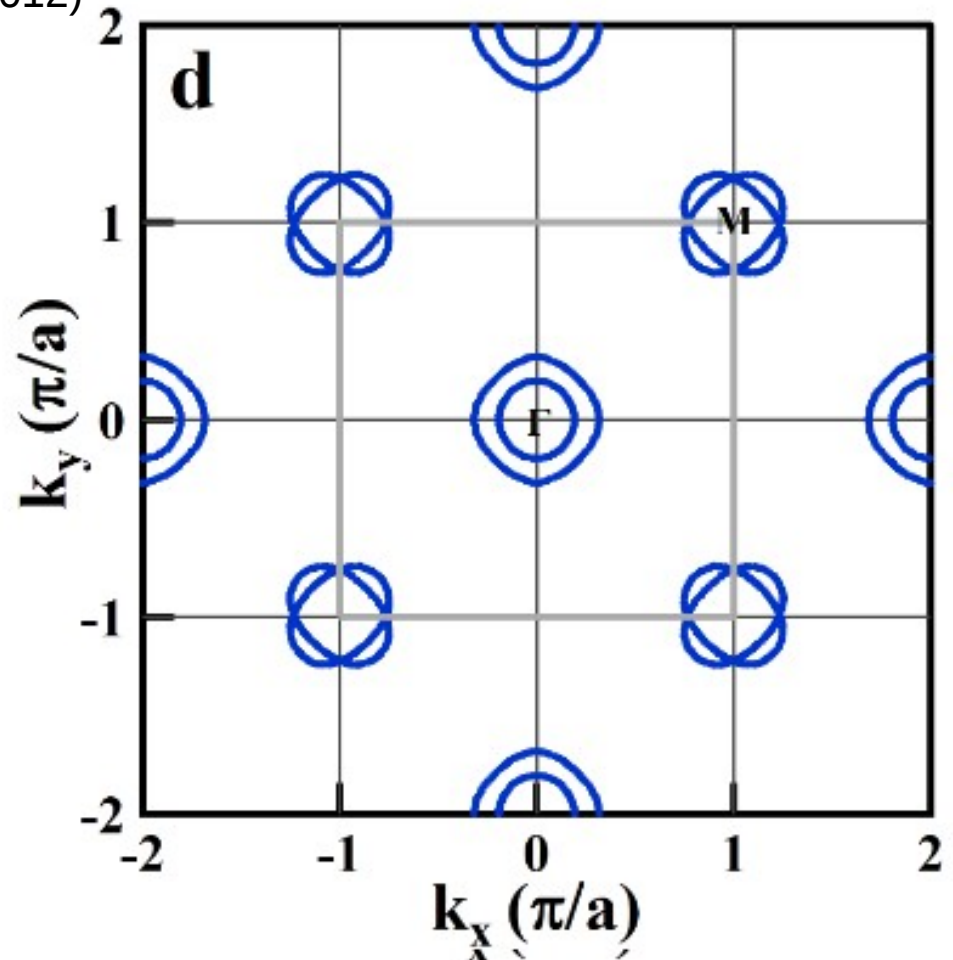
$T_c(\text{FeSe}) \sim 8 \text{ K}$ (Hsu et al., 2008)

$T_c(\text{FeSe/STO}) \sim 70 \text{ K}$ (Qing-Yan et al., 2012)



ARPES

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

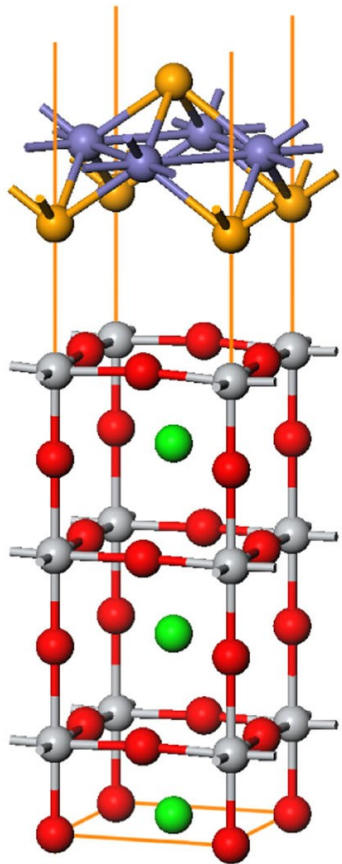


Зонный расчет (LDA)

Аналогичная ПФ у $(\text{LiOH})\text{FeSe}$, $\text{K}(\text{FeSe})_2$

ВТСП FeSe/STO с $T_c \sim 70$ K

Кристаллическая структура



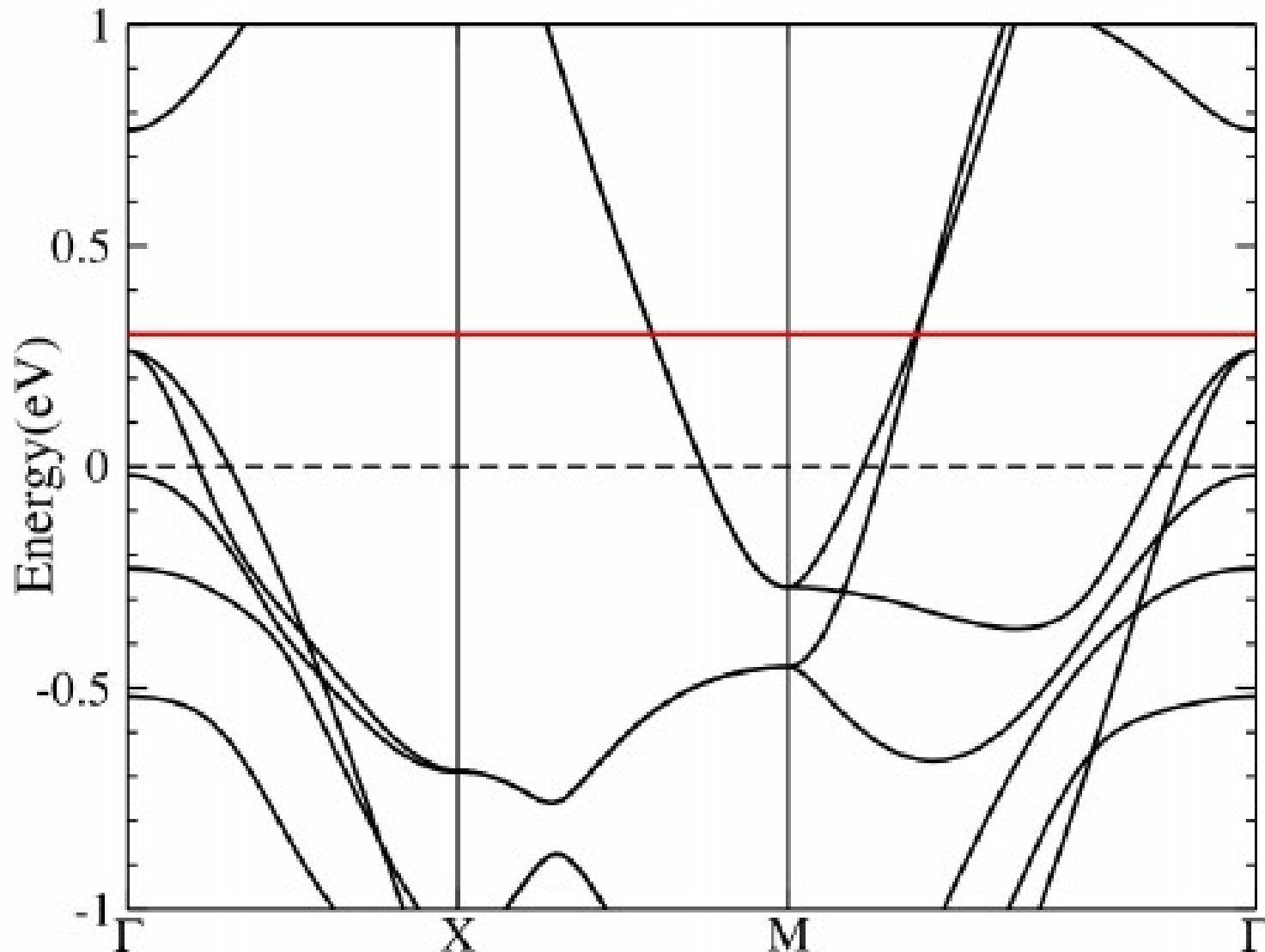
1. Монослой FeSe
2. Fe образует квадратную решетку
3. Fe имеет тетраэдрическое окружение анионов FeSe_4
4. Слой FeSe примыкает к слою TiO_2

Температура СП перехода

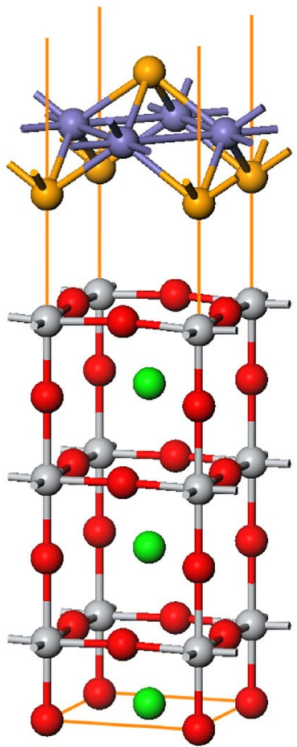
$T_c(\text{FeSe}) \sim 8$ K (Hsu et al., 2008)

$T_c(\text{FeSe/STO}) \sim 70$ K (Qing-Yan et al., 2012)

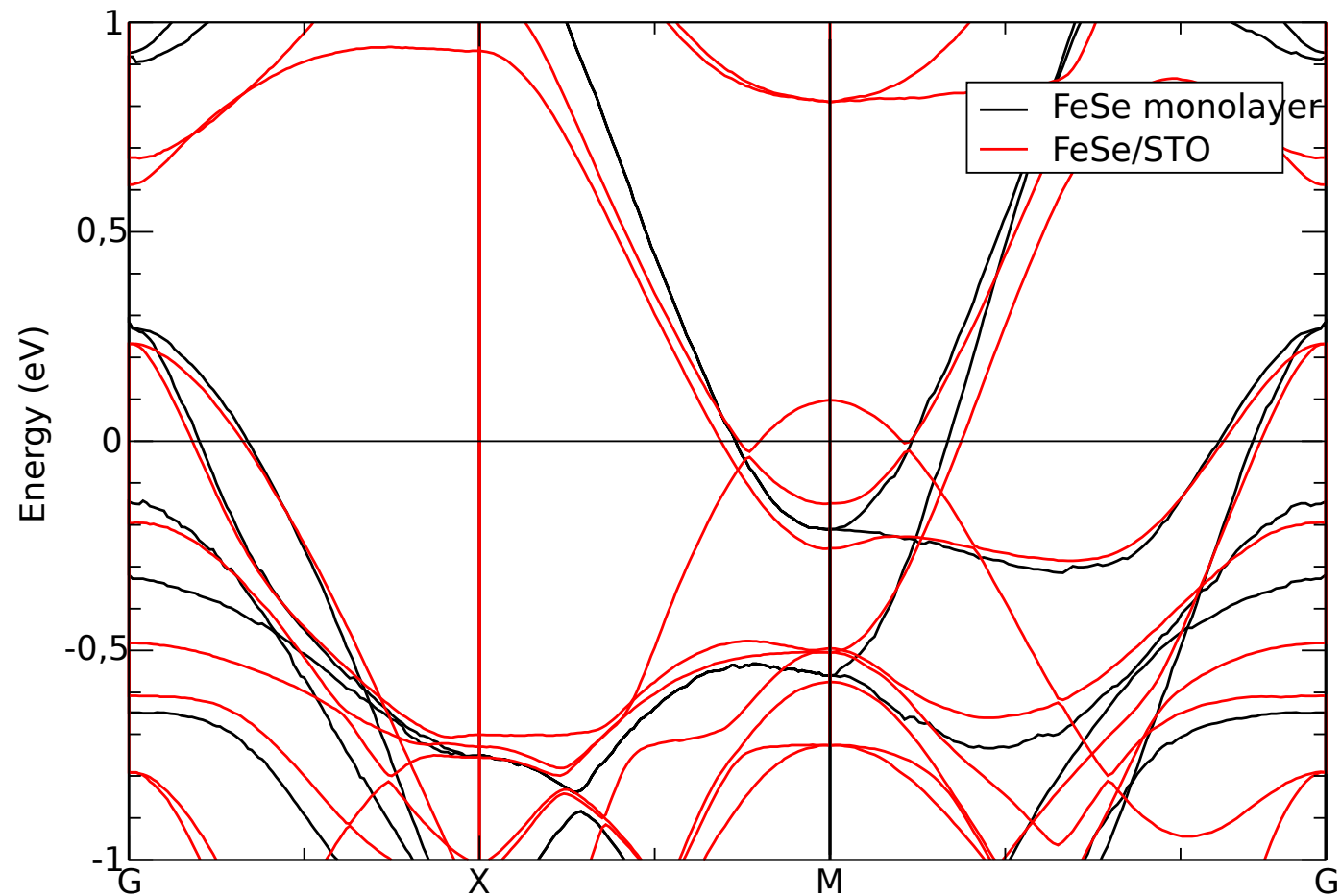
LDA зоны монослоя FeSe вблизи уровня Ферми ($E = 0$)



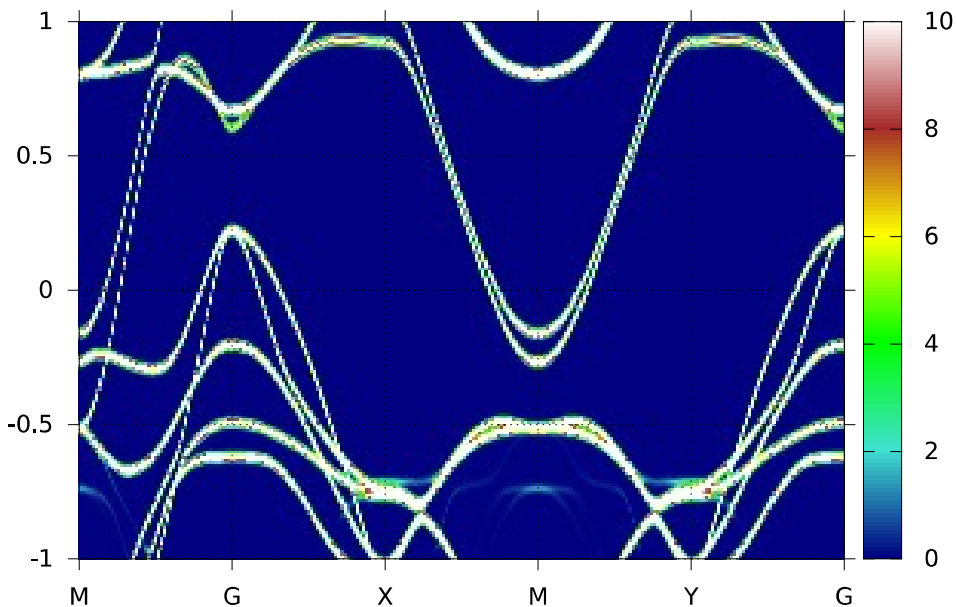
LDA зоны монослоя FeSe и FeSe/STO вблизи уровня Ферми



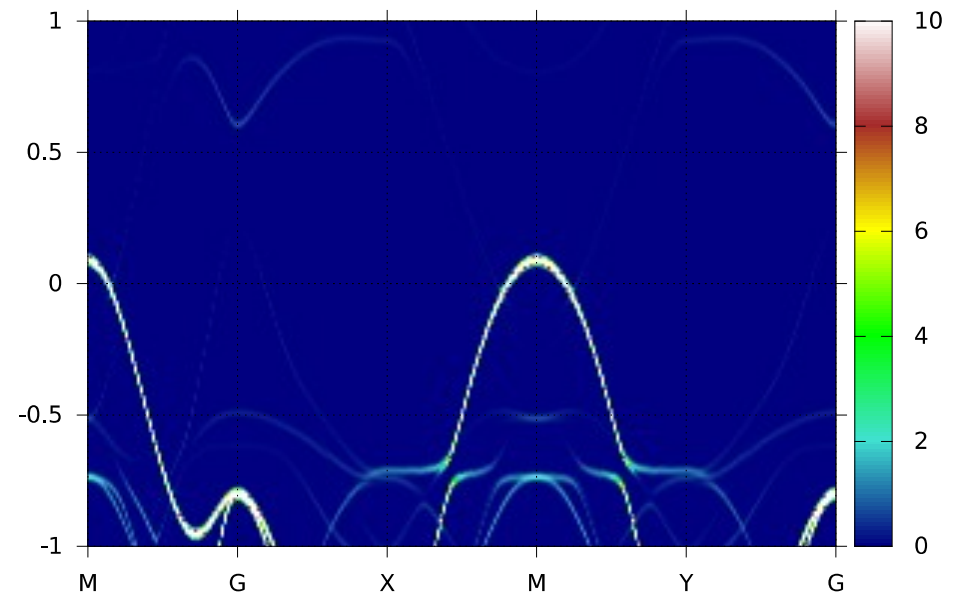
● Fe
● Se
● Sr
● Ti
● O



Орбитальные характеры (LDA) системы FeSe/STO



Fe-3d



O-2p

Результаты

- Проведены LDA зонные расчеты электронной структуры монослоя FeSe на подложке SrTiO₃ в рамках программного пакета Quantum-Espresso.
- Влияние подложки SrTiO₃ проявляется в наличии на уровне Ферми дырочного кармана в точке M, который сформирован 2p состояниями кислорода.
- Отсутствие кармана в точке Γ на эксперименте можно объяснить электронным легированием системы, что по-видимому связано с образованием кислородных вакансий в слое TiO₂ при приготовлении подложки.
- Сейчас идет работа над соединением FeSe/STO типа «сэндвич», а также над учетом корреляционных эффектов монослоя FeSe на подложке SrTiO₃.