

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ



Институт Электрофизики

Электронная структура слоистых систем FeSe на подложке SrTiO₃

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

Екатеринбург, 2017

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, FeSe_{1-x}Te_x with T_c up to 14 K [25].

Типичные кристаллические структуры

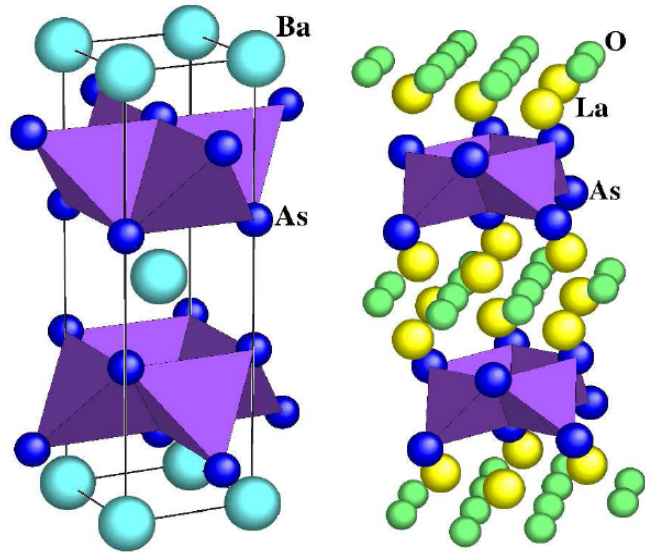
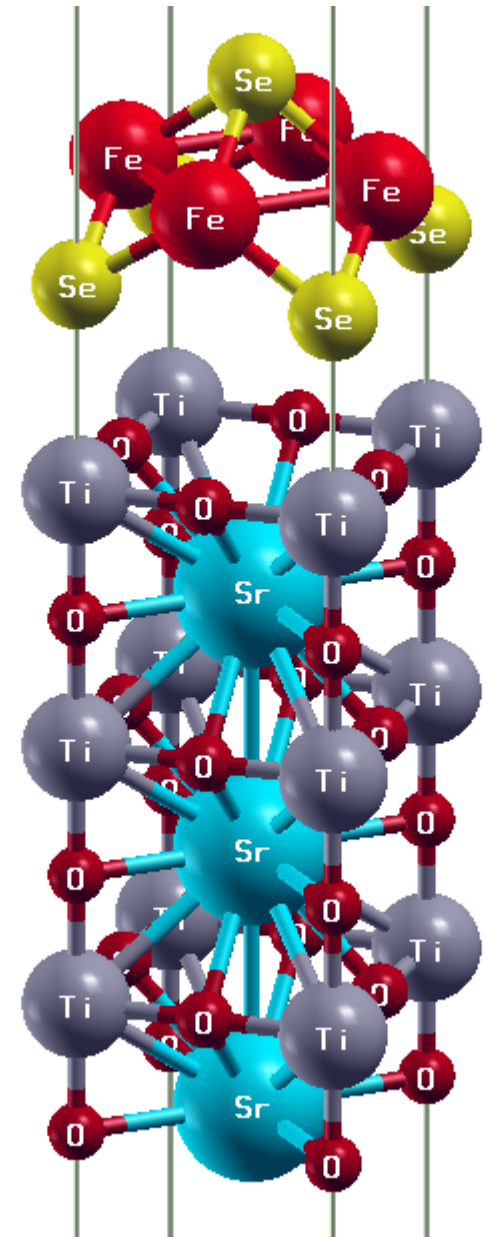
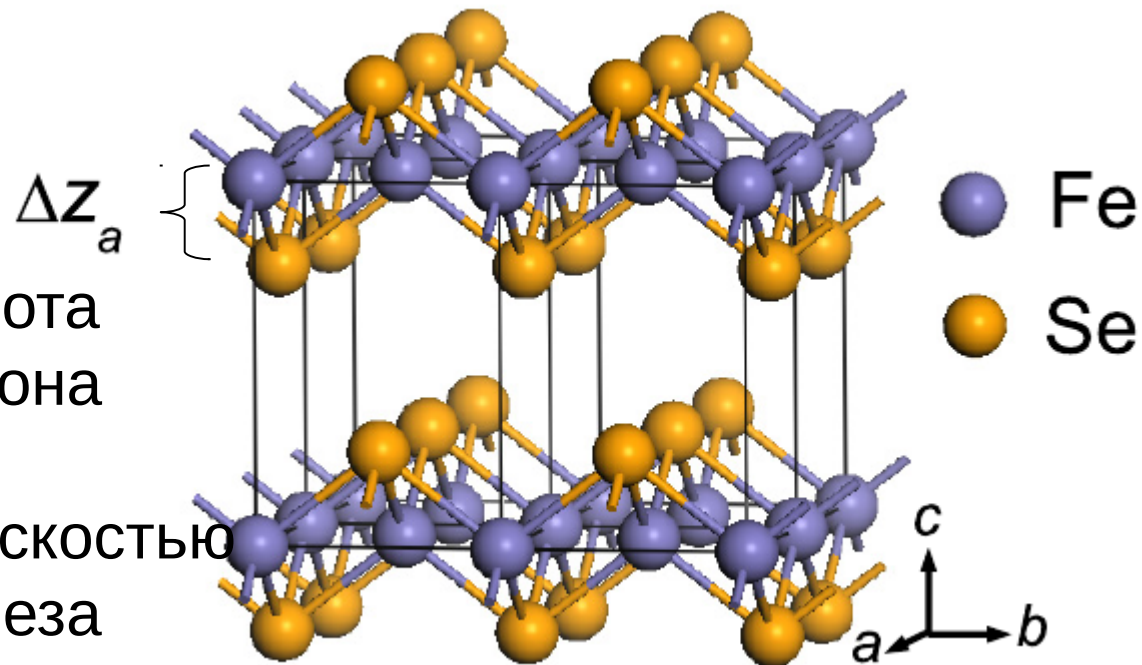


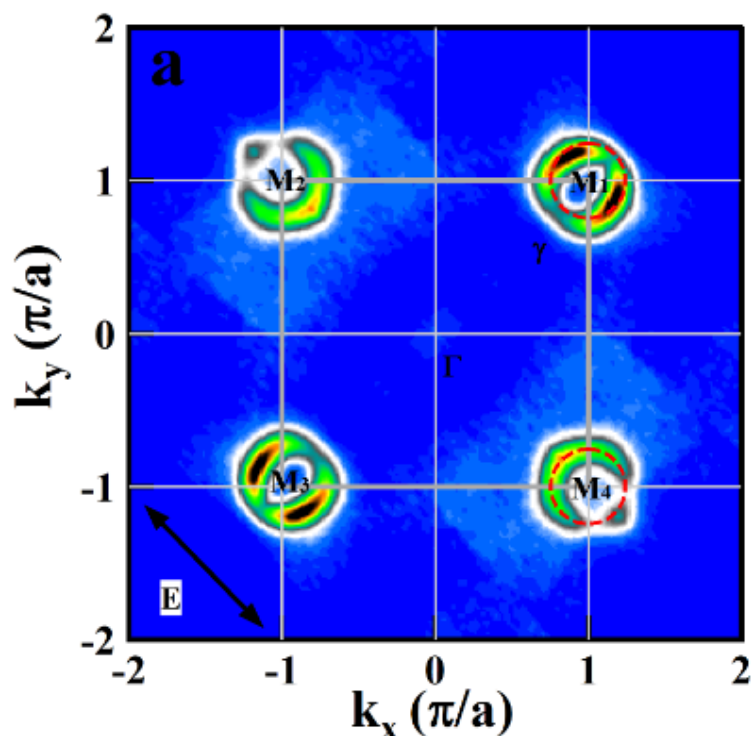
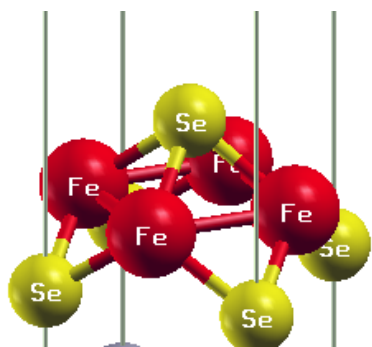
Fig. 1. Crystal structure of BaFe_2As_2 (left) and LaOFeAs (right). FeAs tetrahedra (violet) form two-dimensional layers sandwiched by Ba ion (cyan) or LaO layers (yellow and green).



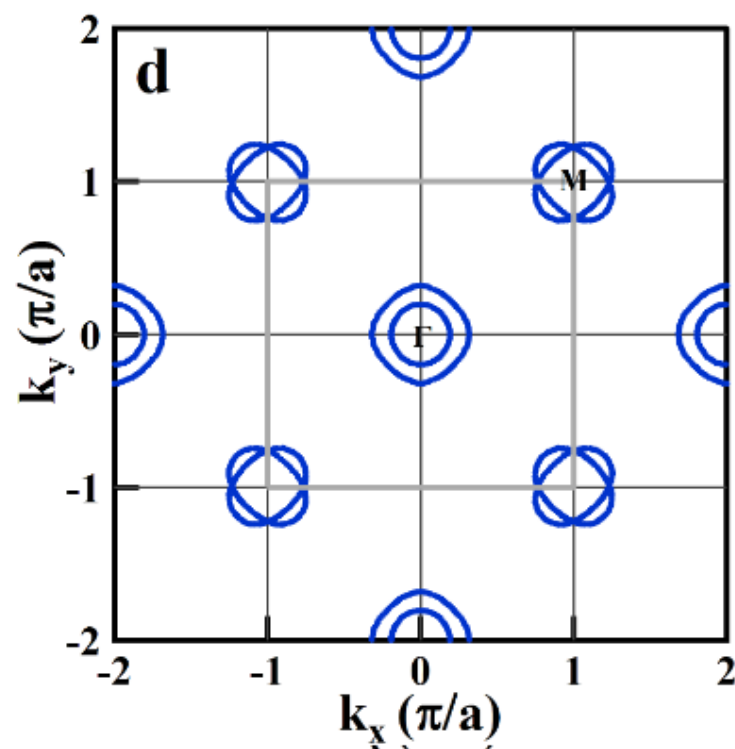
Поверхности Ферми монослоя FeSe

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

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



ARPES

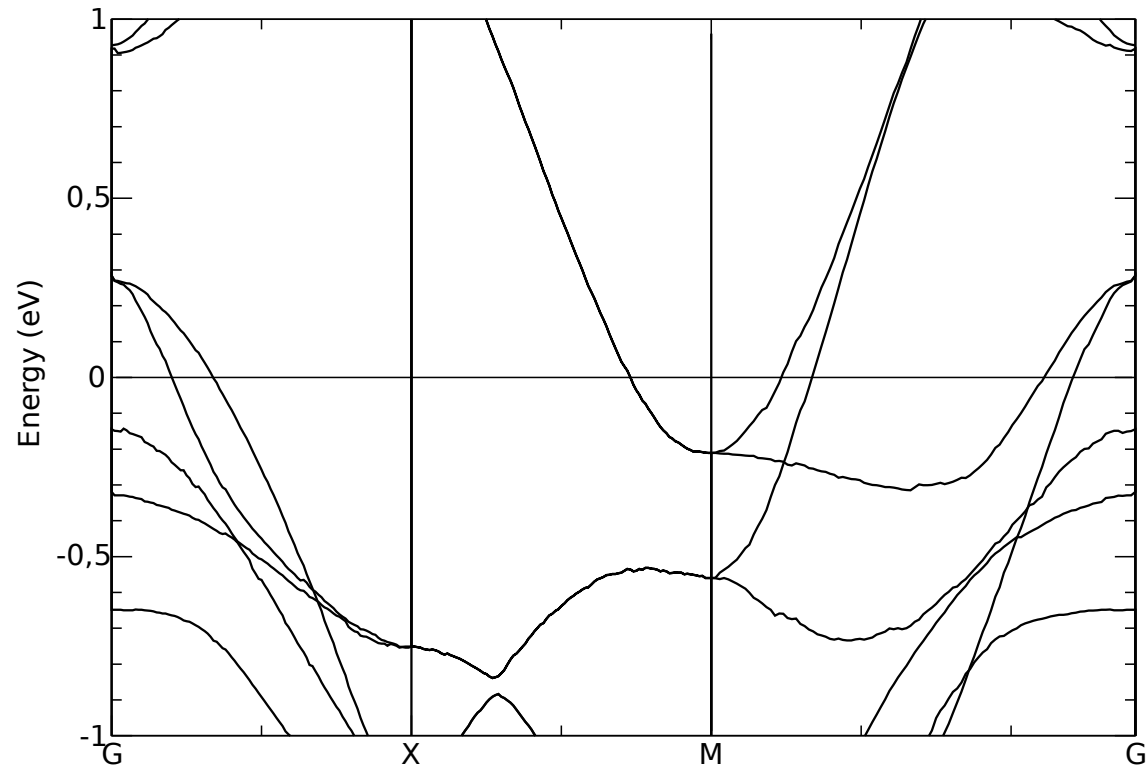
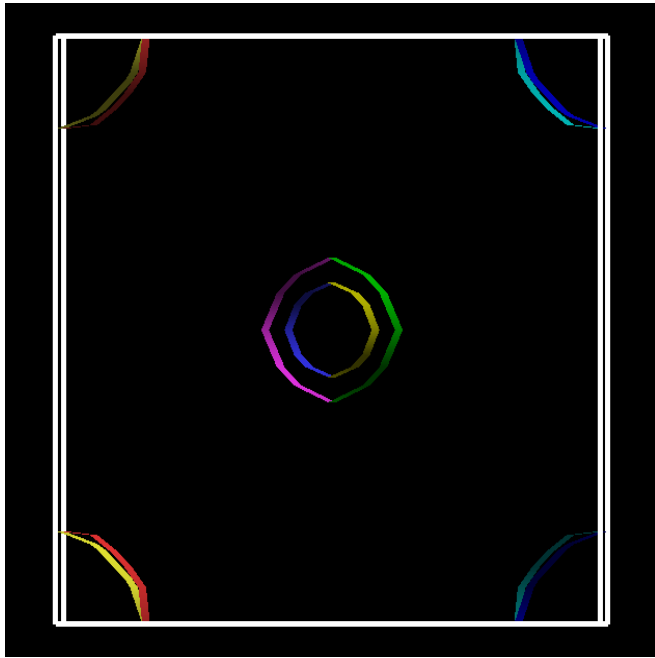


Зонный расчет (LDA)

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

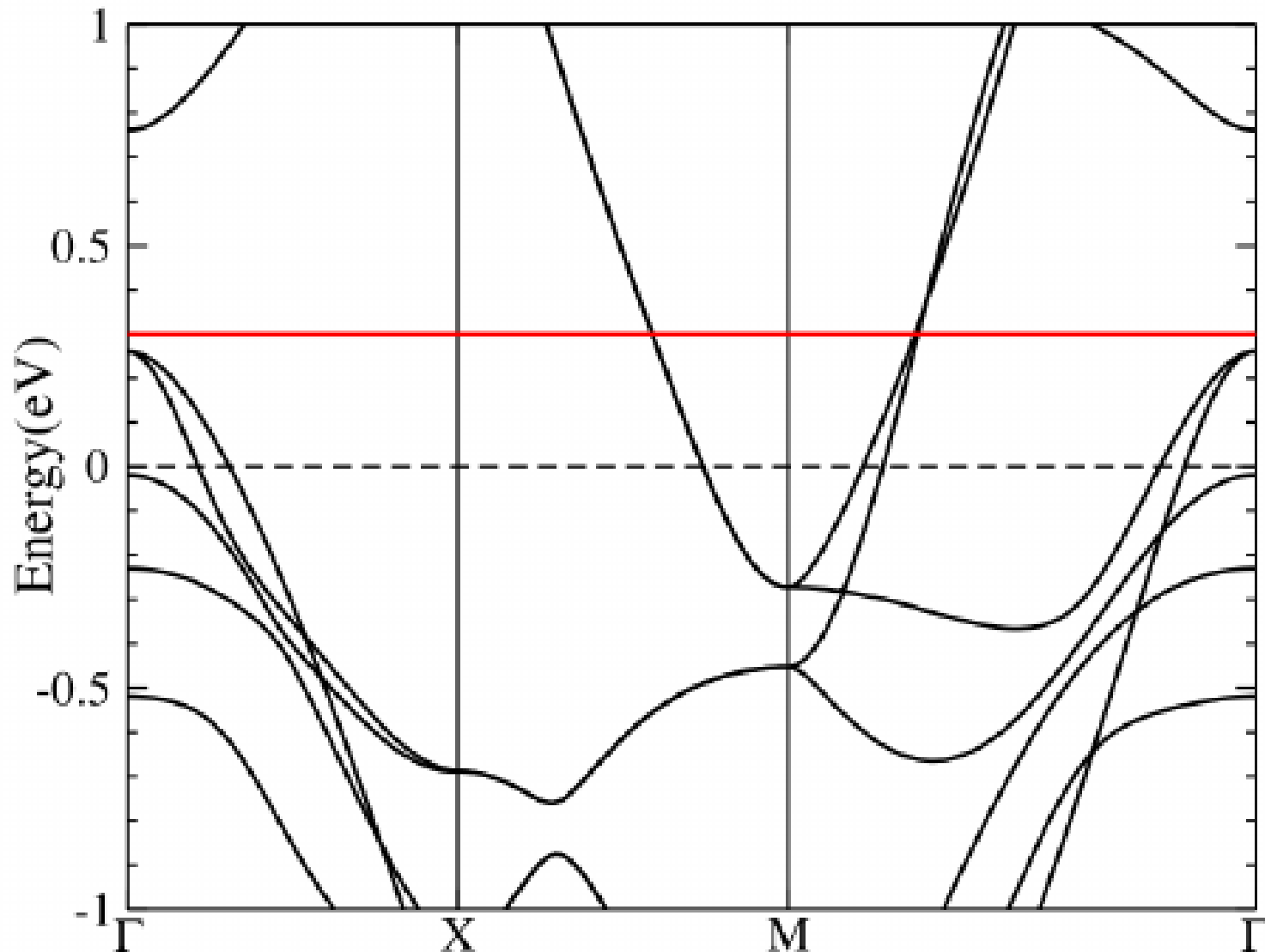
Аналогичная ПФ у $(\text{LiOH})\text{FeSe}$, $\text{K}(\text{FeAs})_2$

Типичная поверхность Ферми и зонная структура (LDA) для “железных” ВТСП



FeSe, объемный образец

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



BTCП mFeSe/STO

Кристаллическая структура

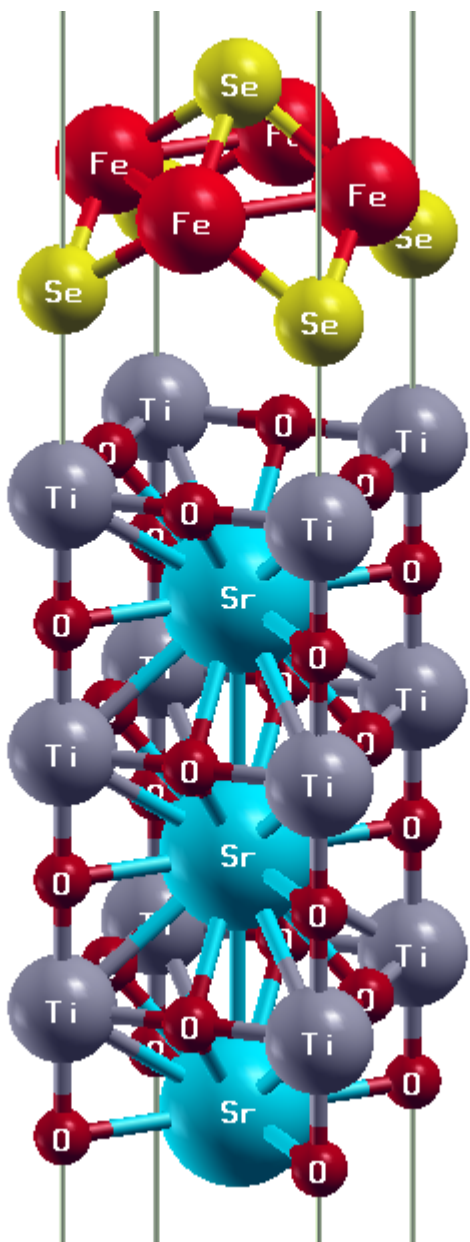
1. Монослой FeSe
2. Fe образует квадратную решетку
3. Fe имеет тетраэдрическое окружение анионов FeSe_4
4. Слой FeSe примыкает к слою TiO_2

Характерные температуры СП перехода

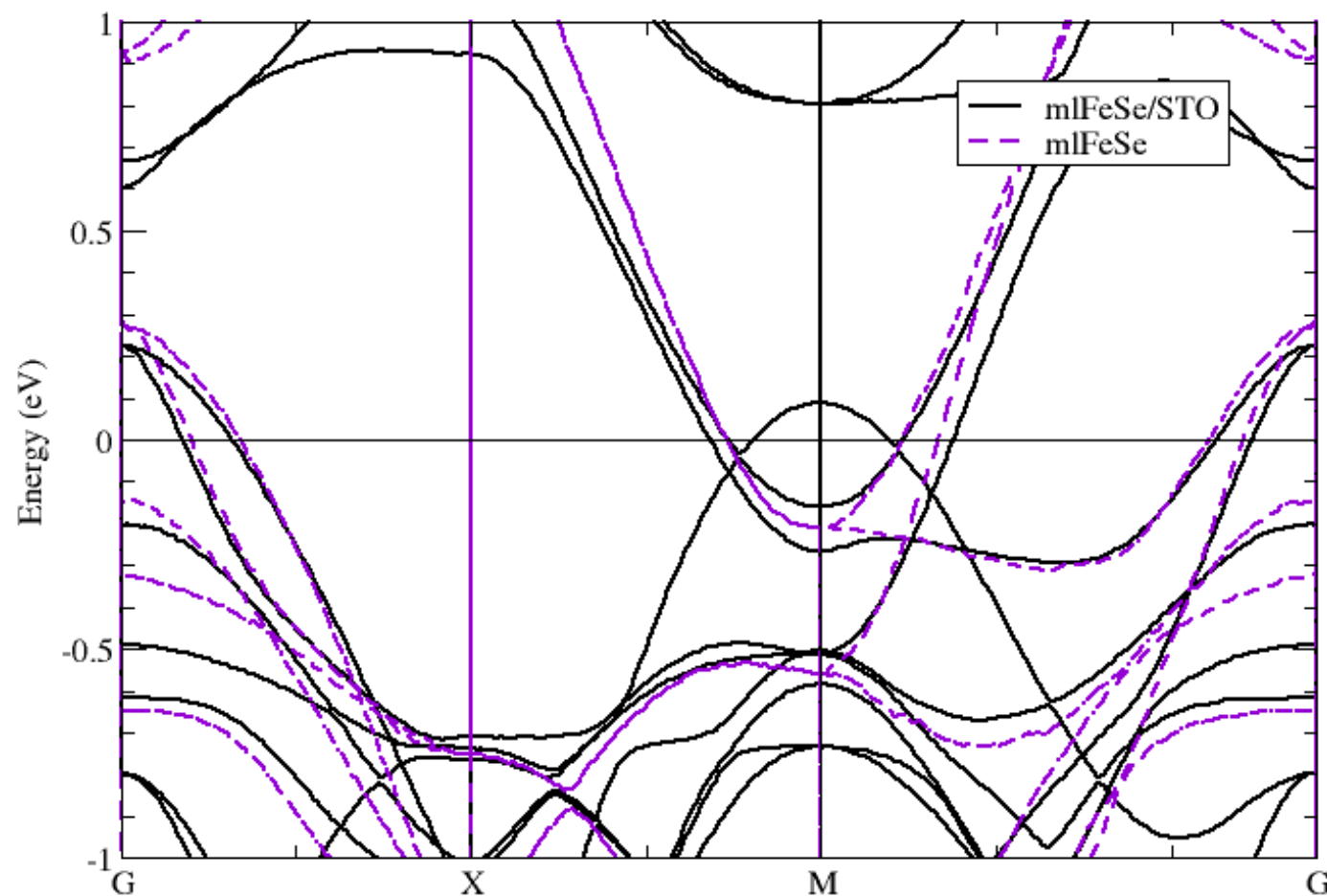
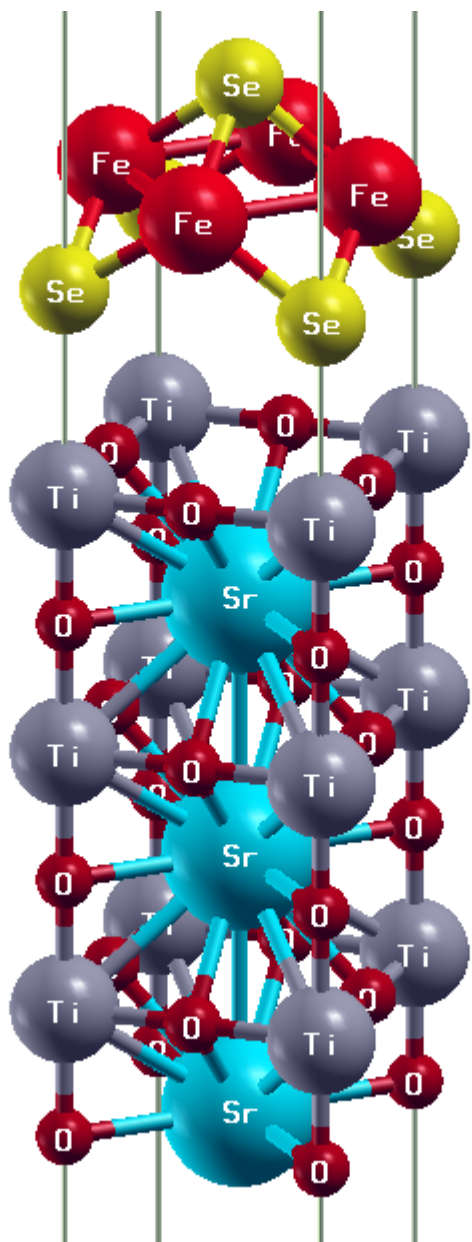
FeSe bulk: $T_c \sim 8\text{K}$ (Hsu et al., 2008)

AFe_2Se_2 (A=K,Rb,Cs): $T_c \sim 30\text{K}$ (Jiangang Guo et al., 2010)

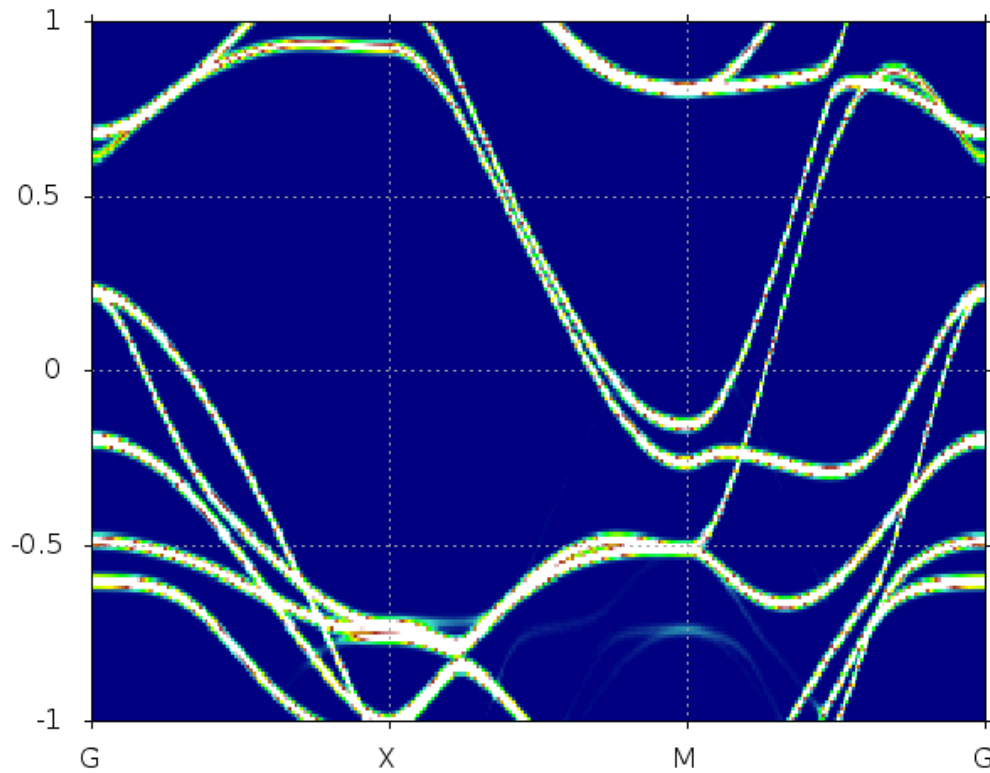
FeSe/SrTiO₃: $T_c \sim 70\text{K}$ (Qing-Yan et al., 2012)



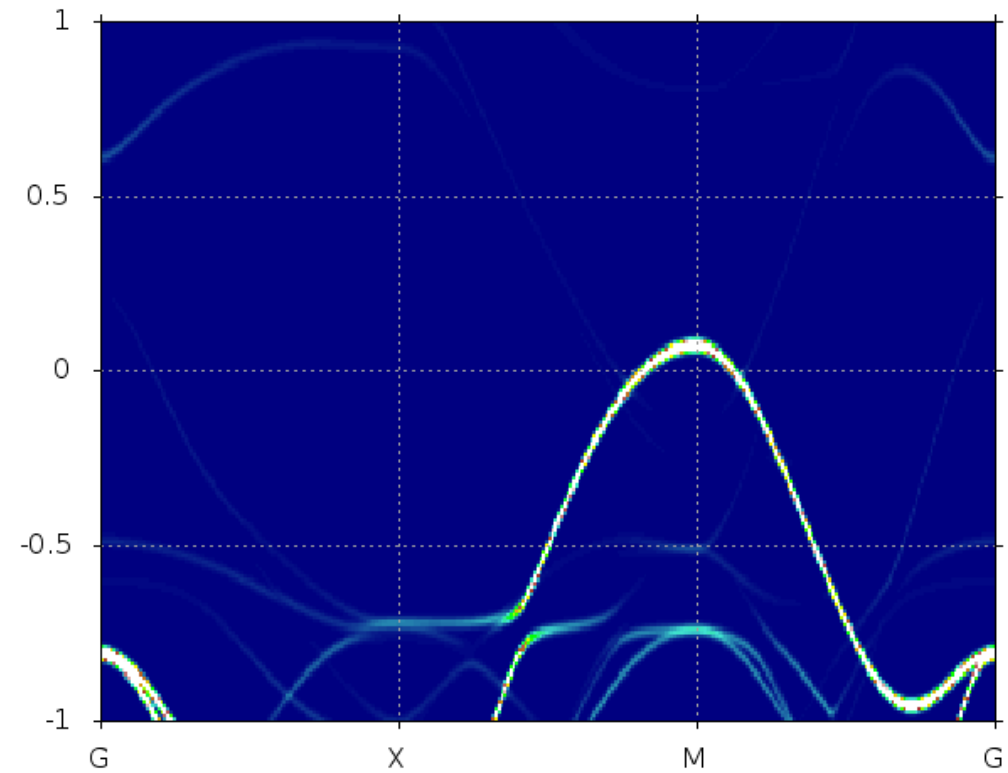
LDA зоны монослоя FeSe и mFeSe/STO вблизи уровня Ферми



Орбитальные характеры (LDA) системы mFeSe/STO

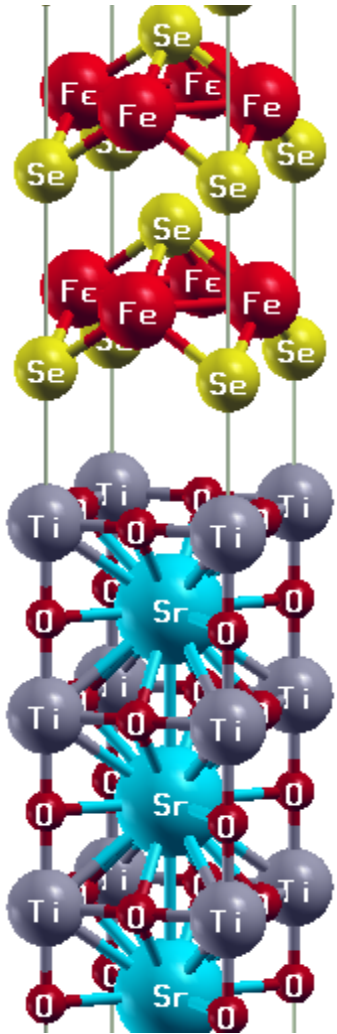


Fe-3d

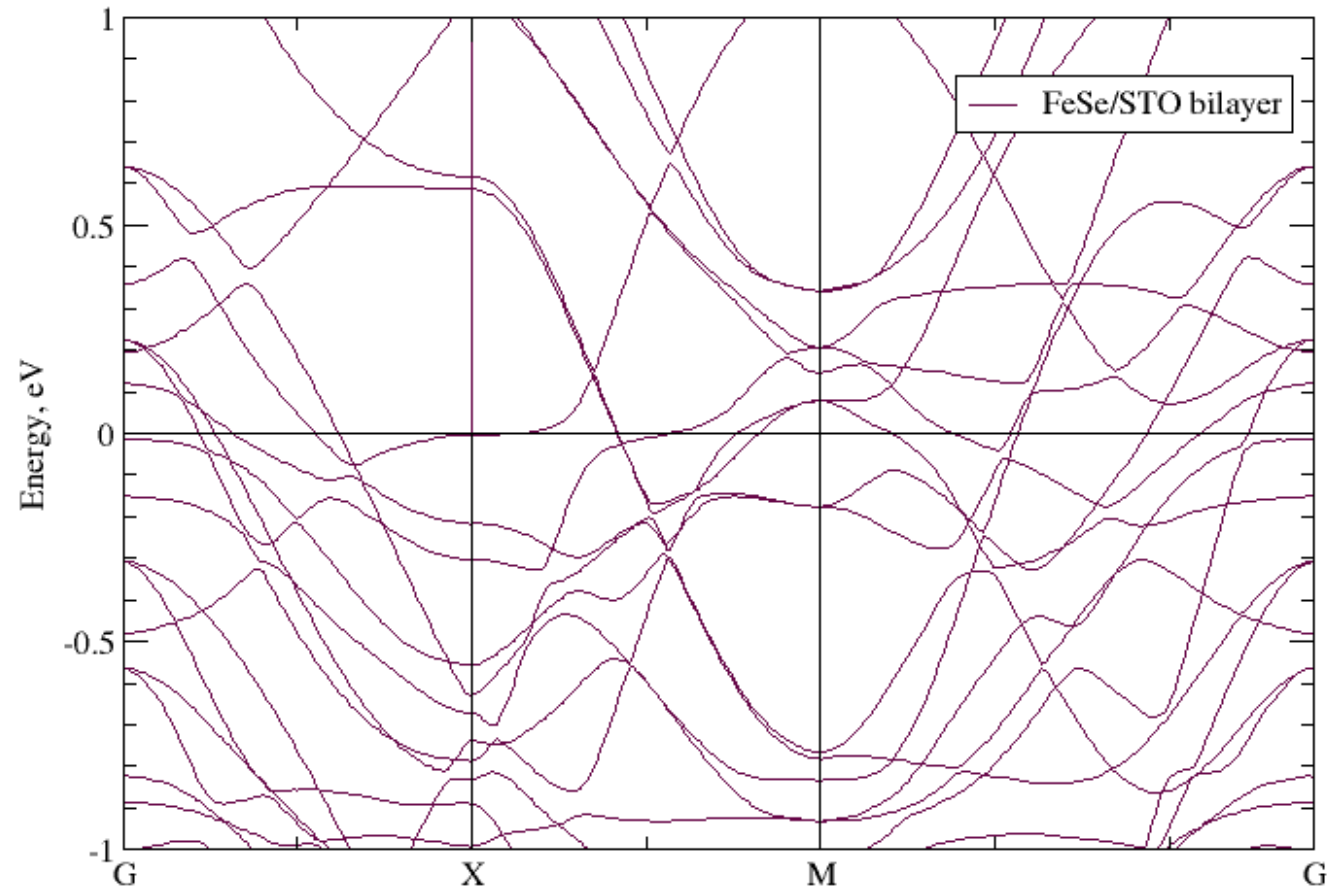
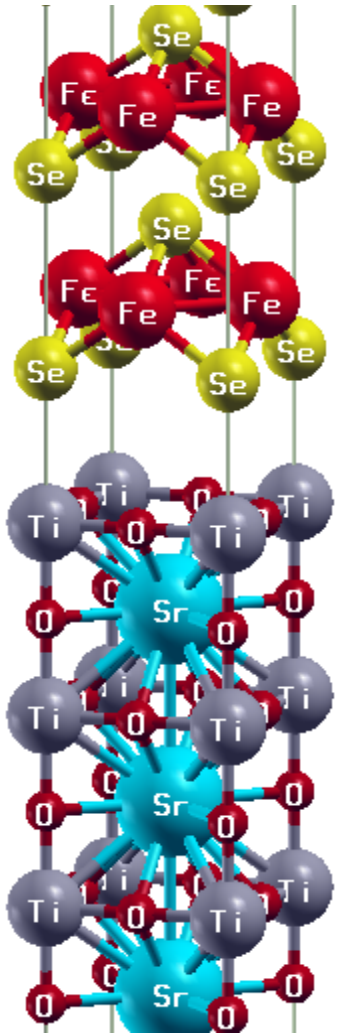


O-2p

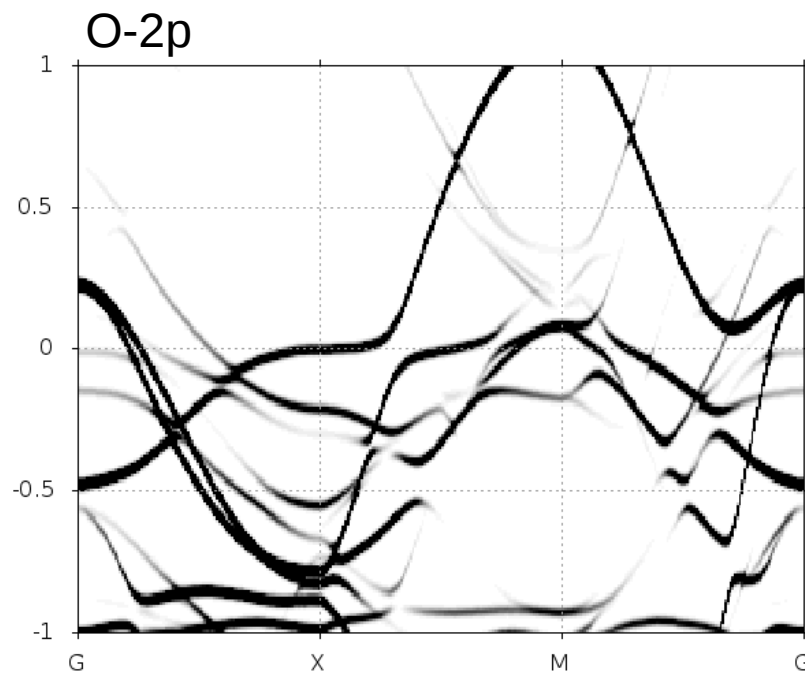
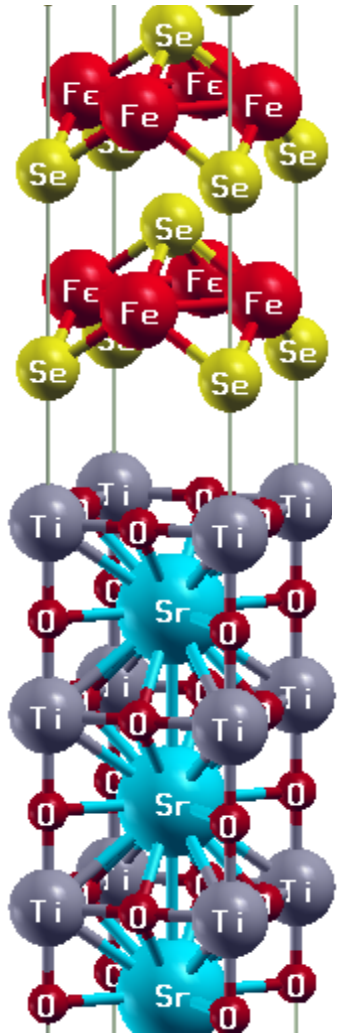
Двуслойная система b1FeSe/STO



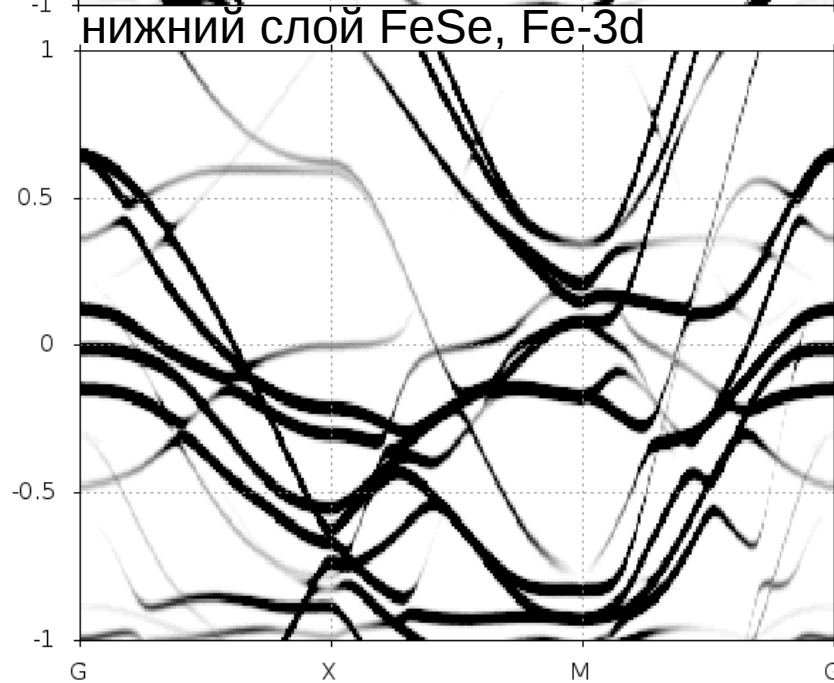
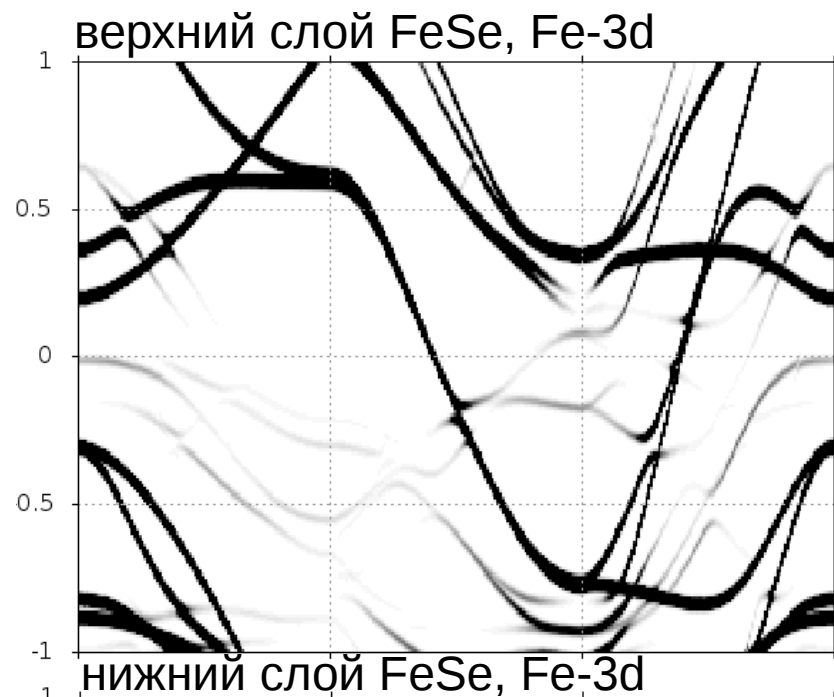
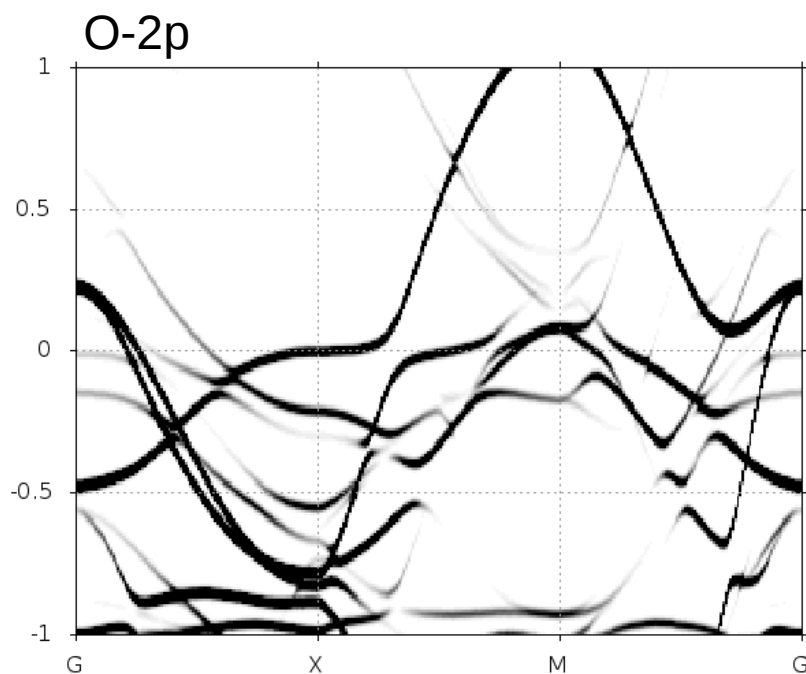
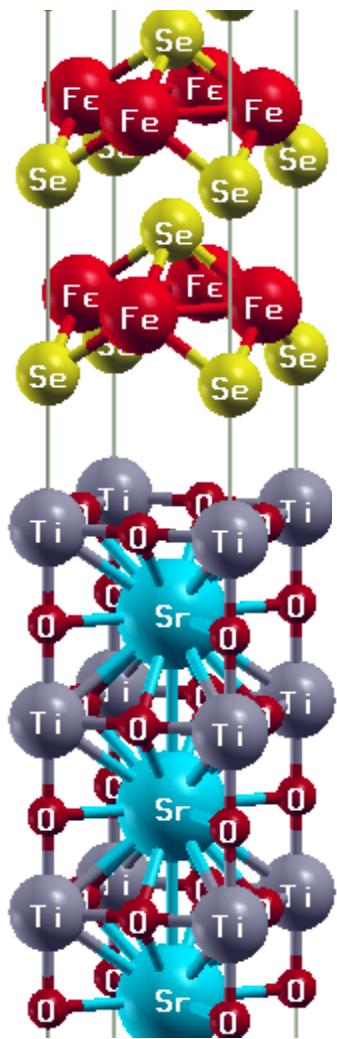
bilayer FeSe/STO



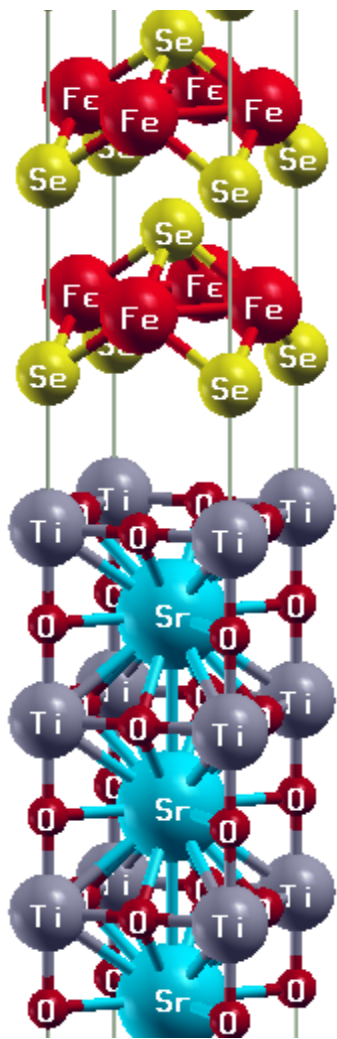
bilayer FeSe/STO



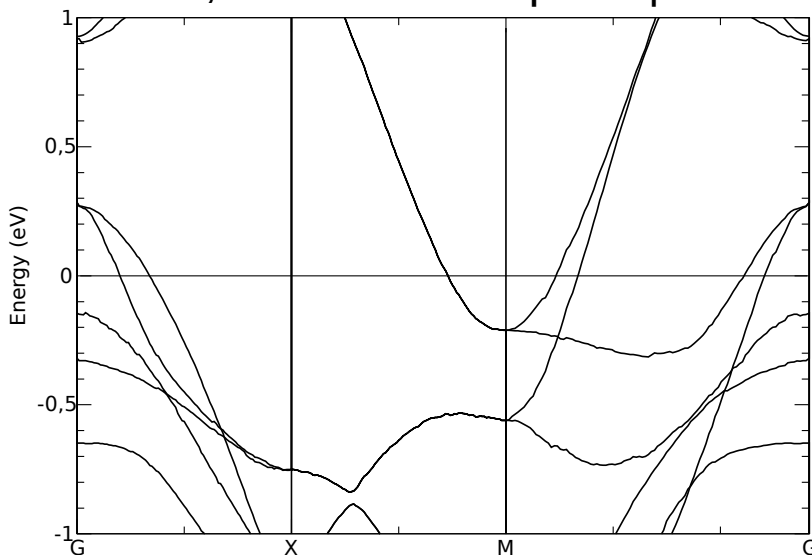
bilayer FeSe/STO



bilayer FeSe/STO

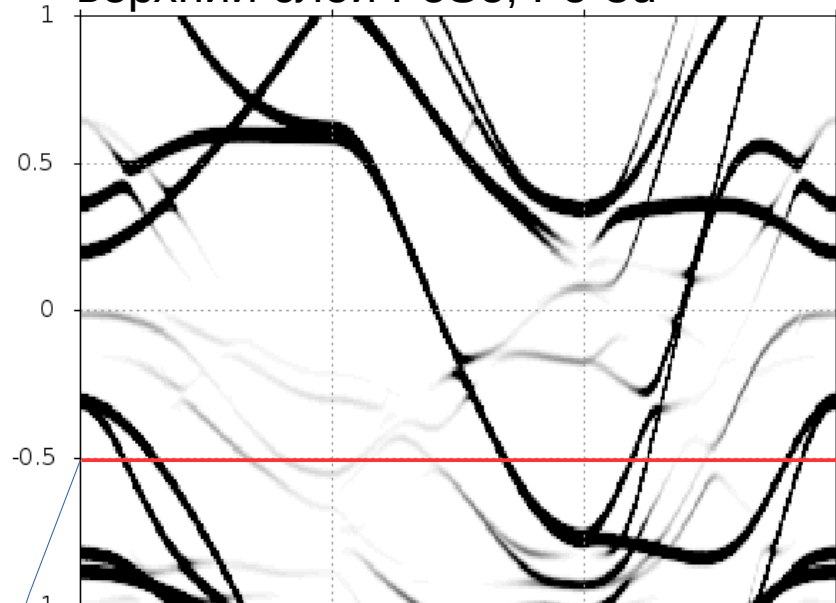


FeSe, объемный образец

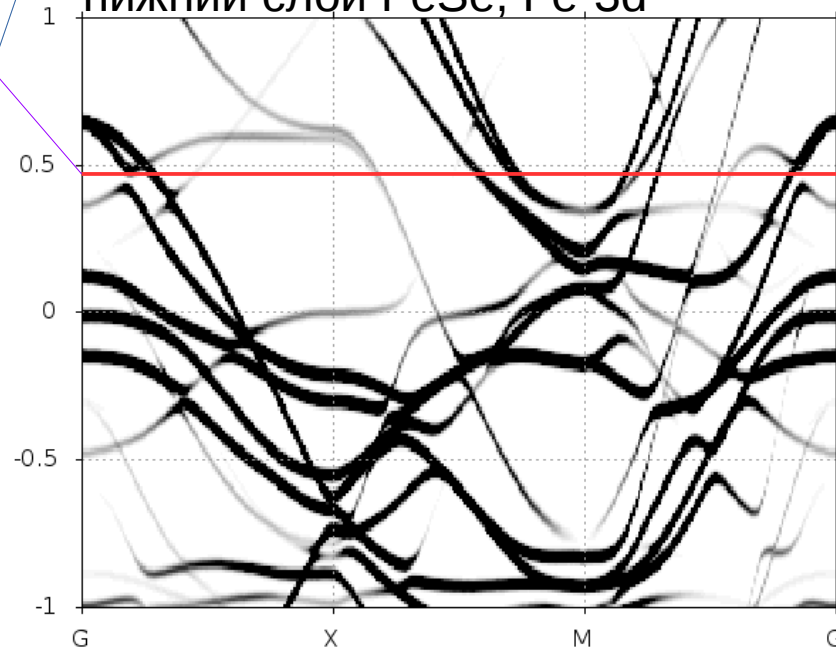


Уровень допирования для
получения типичной ПФ

верхний слой FeSe, Fe-3d

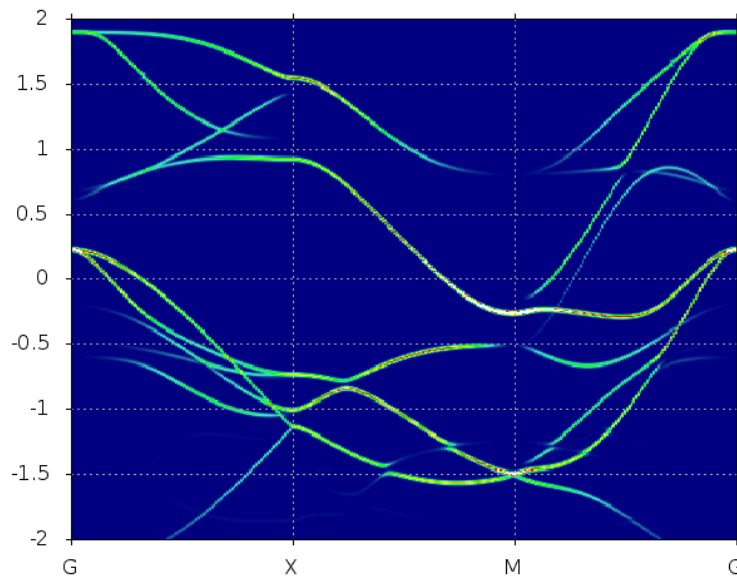


нижний слой FeSe, Fe-3d

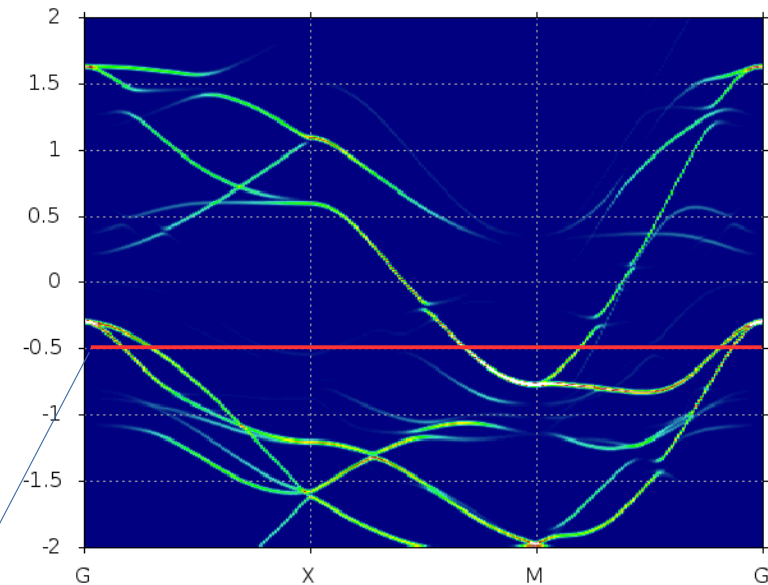


bilayer FeSe/STO

слой FeSe в mlFeSe/STO, Fe-3dxz

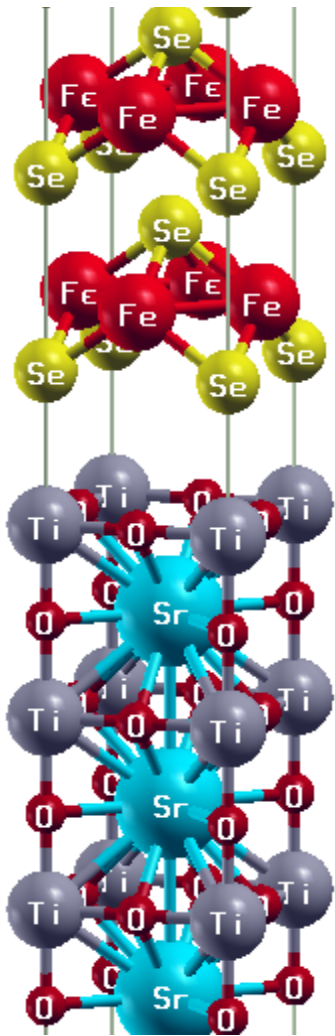
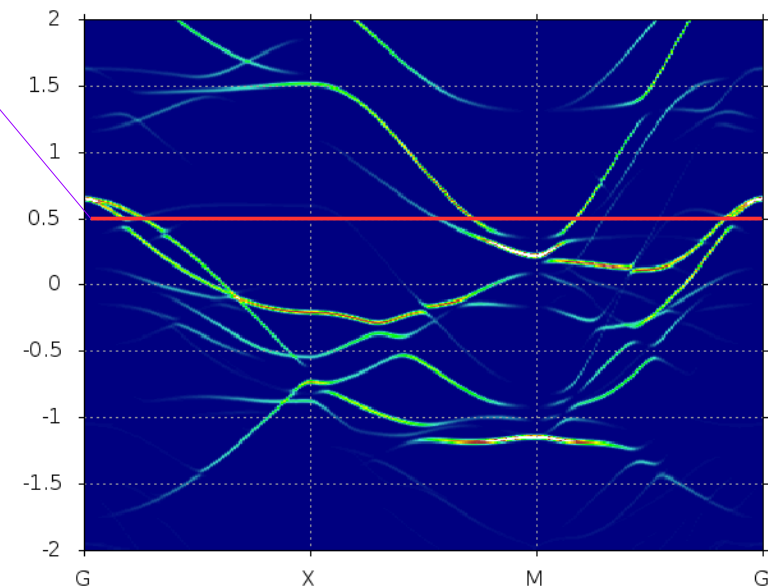


верхний слой FeSe, Fe-3dxz



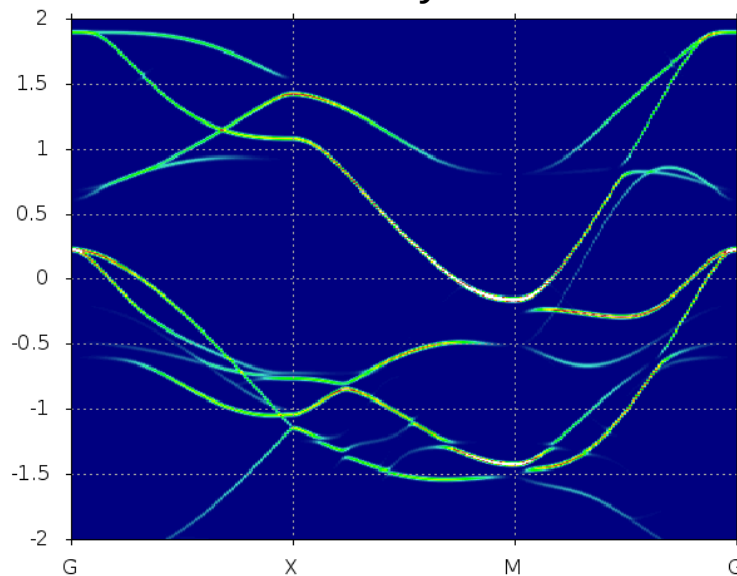
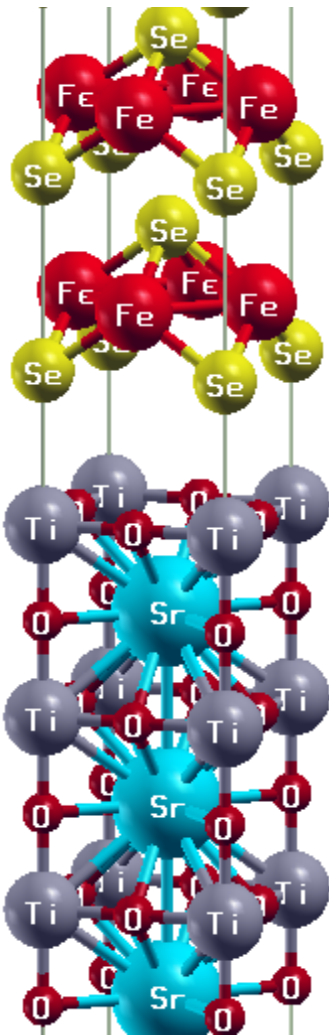
Уровень допирования для
получения типичной ПФ

нижний слой FeSe, Fe-3dxz



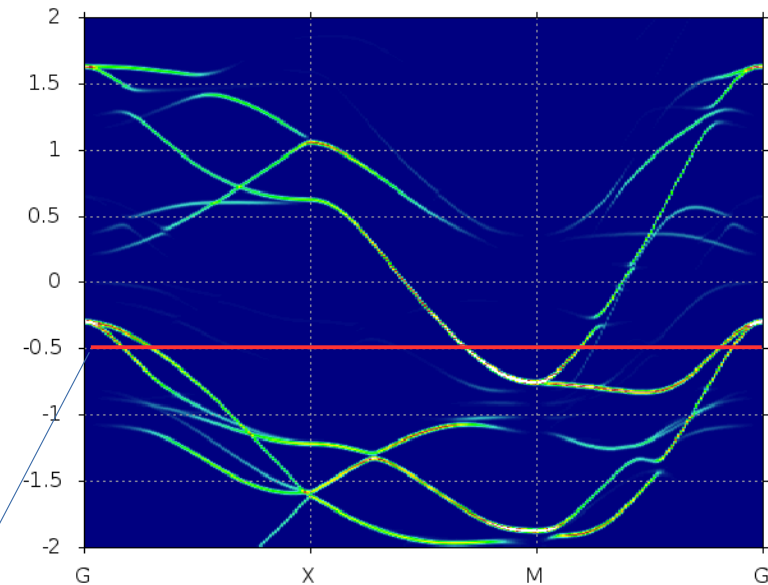
bilayer FeSe/STO

слой FeSe в mlFeSe/STO, Fe-3d_{yz}

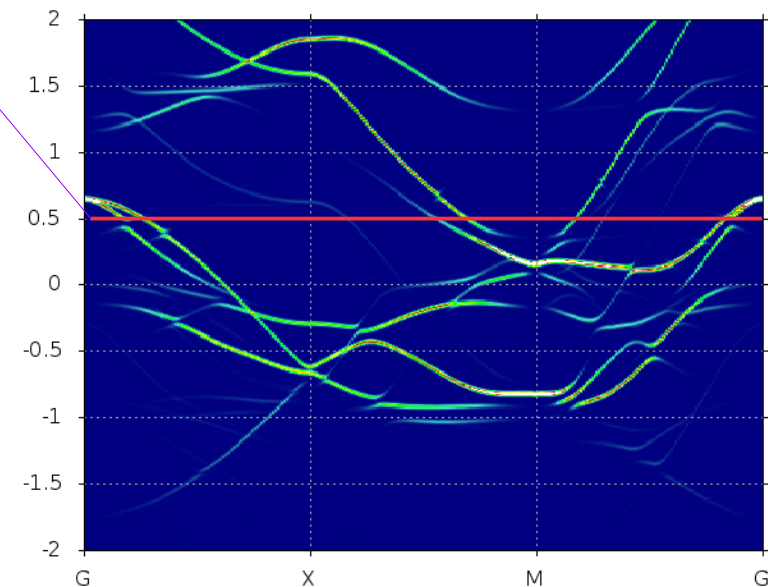


Уровень допирования для
получения типичной ПФ

верхний слой FeSe, Fe-3d_{yz}



нижний слой FeSe, Fe-3d_{yz}



Результаты

- Проведен расчет и сравнение зонной структуры систем mlFeSe/STO и blFeSe/STO .
- В отличие от mlFeSe/STO blFeSe/STO имеет достаточно сложную зонную структуру в окрестности уровня Ферми.
- Состояния Fe-3d для верхнего и нижнего слоя blFeSe/STO качественно похожи на mlFeSe/STO , но раздвинуты вверх и вниз по энергии примерно на 0.5 эВ от уровня Ферми.
- Зона O-2p в точке M, сформированная состояниями кислорода верхнего слоя TiO_2 , сдвинута вверх по энергии.

Планы

- Изучение электронной структуры систем с 3-10 слоями FeSe на подложке SrTiO_3 ;
- Учет электронных корреляций в таких системах в рамках LDA+DMFT метода.