

*На правах рукописи*

СКОРНЯКОВ Сергей Львович

**КУЛОНОВСКИЕ КОРРЕЛЯЦИИ И АНОМАЛИИ  
СПЕКТРАЛЬНЫХ, МАГНИТНЫХ И  
РЕШЕТОЧНЫХ СВОЙСТВ ПНИКТИДОВ И  
ХАЛЬКОГЕНИДОВ ЖЕЛЕЗА**

Специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Екатеринбург – 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН).

**Научный консультант:**

Анисимов Владимир Ильич, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН (г. Екатеринбург).

**Официальные оппоненты:**

Рубцов Алексей Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (г. Москва);

Медведева Надежда Ивановна, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, ФГБУН Институт химии твердого тела УрО РАН (г. Екатеринбург);

Григорьев Павел Дмитриевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН (г. Черноголовка).

**Ведущая организация:**

ФГБУН Институт электрофизики УрО РАН (г. Екатеринбург).

Защита состоится « 14 » октября 2022 г. в 11:00 на заседании диссертационного совета 24.1.133.01 на базе ФГБУН Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН по адресу: 620108, г. Екатеринбург, ул С. Ковалевской, 18.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФМ УрО РАН и на сайте [www.imp.uran.ru](http://www.imp.uran.ru).

Автореферат разослан «     » июня 2022 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
д.ф.-м.н.

Чарикова Т. Б.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Свойства слоистых пниктидов и халькогенидов железа (соединения вида  $(A, Ae)FeAs$ ,  $(A, Ae)Fe_2As_2$ ,  $LnFeAs(P)O$ ,  $FeCh$ , где  $A$ ,  $Ae$  – щелочные и щелочноземельные металлы ( $Ba$ ,  $Ca$ ,  $K$ ,  $Li$ ,  $Na$ ,  $Sr$ ),  $Ch$  – халькогены ( $S$ ,  $Se$ ,  $Te$ ),  $Ln=(La, Nd)$ ) на протяжении более чем десяти лет являются предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований [1, 2]. Интерес к данному классу соединений обусловлен, в первую очередь, высокой критической температурой сверхпроводящего перехода, в ряде случаев превышающей максимальные значения, регистрируемые в электрон-фононных сверхпроводниках. Дополнительным, но далеко не последним по значимости фактором, мотивирующим исследователей, является сходство фазовой диаграммы и структурное родство сверхпроводников на основе железа с хорошо изученными ВТСП-купратами [3, 4].

Как и в случае купратов, вопрос о механизме формирования куперовских пар в пниктидах и халькогенидах остается дискуссионным [2]. Это является одной из причин, стимулирующей всесторонние исследования особенностей нормального состояния данных соединений, из которого развивается сверхпроводимость. Спектральные (электронная структура), магнитные и решеточные свойства пниктидов и халькогенидов железа в нормальной фазе, как оказалось, демонстрируют крайне необычное поведение, которое, в большинстве случаев, не может быть интерпретировано в рамках стандартных зонных подходов. Например, было обнаружено сосуществование больших перенормировок квази-частичной массы с отсутствием особенностей в фотоэмиссионных спектрах, ассоциируемых с хаббардовскими зонами [5]. Аномальными оказались и некоторые магнитные свойства. В частности, температурная зависимость магнитной восприимчивости в парамагнитном состоянии пниктидов и халькогенидов не подчиняется ни закону Кюри, ни закону Паули, а является линейной [6, 7]. Наконец, отдельного упоминания заслуживает взаимосвязь электронных и решеточных степеней свободы. В этом контексте следует выделить важность учета кулоновских корреляций для объ-

яснения структурных и спектральных свойств при расширении и сжатии элементарной ячейки [8], а также формирование экзотического нематического состояния, которое в ряде случаев предшествует сверхпроводящему переходу [9].

Таким образом, даже не находясь в сверхпроводящем состоянии, пниктиды и халькогениды железа проявляют разнообразные интересные, а в некоторых случаях и уникальные, свойства, которые не могут быть объяснены в рамках стандартных зонных методов. По этой причине построение четкой физической картины взаимодействия электронных и решеточных степеней свободы в нормальном состоянии, из которого происходит формирование сверхпроводящей фазы, путем применения подходов, позволяющих учесть эффект кулоновских корреляций, представляется необходимым и важным шагом для понимания механизма сверхпроводимости новых ВТСП систем на основе железа, что и определяет актуальность темы данной диссертационной работы.

**Цель** данной диссертационной работы – установить взаимосвязь между кулоновскими корреляционными эффектами в  $3d$  оболочке и аномалиями спектральных, магнитных и решеточных свойств представителей основных классов пниктидов и халькогенидов железа.

### **Задачи исследования**

- Разработать программный комплекс, позволяющий учитывать кулоновские корреляции при расчетах поверхности Ферми, интегральных и разрешенных по волновому вектору спектральных функций, а также определении симметрии спиновых флуктуаций.
- Объяснить сосуществование больших перенормировок зонной структуры, получаемых из сравнения фотоэмиссионных спектров с результатами расчетов методом функционала электронной плотности, и отсутствие признаков формирования хаббардовских зон.
- Установить необходимость учета кулоновских корреляцион-



ных эффектов для объяснения спектральных свойств пниктидов и халькогенидов железа.

- Объяснить причины аномального температурного роста магнитной восприимчивости пниктидов и халькогенидов железа в парамагнитной фазе.
- Определить роль кулоновских корреляционных эффектов для корректного описания структурных параметров, спектральных и магнитных свойств пниктидов и халькогенидов железа для нормального и повышенного давления.
- Исследовать природу фазовых переходов (переход металл-диэлектрик, структурные и магнитные переходы) в пниктидах и халькогенидах железа при легировании.

**Выбор объектов исследования.** В качестве объектов исследования были выбраны соединения основных классов пниктидов и халькогенидов железа, проявляющие аномальное поведение спектральных, магнитных и решеточных свойств, не находящее объяснения в рамках стандартных зонных подходов. Были изучены:

- $\text{La(Nd)FeAsO}$ ,  $\text{Ba(K)Fe}_2\text{As}_2$  – соединения с аномалиями температурной зависимости магнитной восприимчивости и спектральных свойств
- $\text{FeSe}$ ,  $\text{FeS}$  – системы, демонстрирующие фазовые переходы под давлением (изменение структурных, спектральных и магнитных свойств)
- серия соединений  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ , в которой регистрируется переход металл-диэлектрик
- $\text{LiFeAs}$  – система со слабо выраженным нестингом поверхности Ферми
- $\text{LaFe(Ni)PO}$  – соединения с аномалиями спектральных свойств

## Научная новизна

- Разработан и реализован программный комплекс обработки данных расчета методом DFT+DMFT. Созданный пакет программ позволяет анализировать влияние корреляционных эффектов на спектральные характеристики (поверхность Ферми, интегральные и разрешенные по волновому вектору спектральные функции), а также симметрию спиновых флуктуаций.
- Впервые показано, что учет корреляционных эффектов в рамках подхода DFT+DMFT позволяет получить количественное описание фотоэмиссионных экспериментов с угловым разрешением основных классов родительских соединений ВТСП систем на основе железа.
- Для объяснения особенностей спектральных свойств ВТСП пниктидов железа показана возможность реализации ситуации состояния с 'промежуточной' силой корреляционных эффектов, когда большие величины перенормировки эффективной массы квазичастиц сосуществуют с отсутствием переноса спектрального веса в хаббардовские зоны.
- Объяснена слабая выраженность нестинга поверхности Ферми в соединении LiFeAs. Показано, что формирование данной особенности электронной структуры обусловлено сильной орбитальной селективностью корреляционных эффектов в  $3d$  оболочке железа.
- Дано теоретическое описание эволюции спектральных и магнитных свойств серии  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ . Показано, что учет кулоновских корреляционных эффектов позволяет объяснить переход Мотта металл-диэлектрик при  $x = 0.5$ .
- Впервые показано, что температурный рост магнитной восприимчивости в системах  $\text{LaFeAsO}$  и  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  может быть описан в рамках одноузельного подхода DFT+DMFT. Продемонстрировано, что данное явление является следствием термического возбуждения состояний, формирующих узкие

пики спектральной функции под уровнем Ферми, и не требует для своего объяснения учета межузельных флуктуаций.

- Установлено, что в соединении  $\text{KFe}_2\text{As}_2$ , в отличие от  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  и  $\text{LaFeAsO}$ , корреляционные эффекты являются более выраженными, демонстрируют большую орбитальную селективность и оказывают большее влияние на спектральные свойства. Показано, что это объясняет отличия температурной зависимости магнитного отклика  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  от других представителей пниктидов железа.
- Предложена микроскопическая модель, объясняющая условия реализации режимов температурного роста и убывания магнитной восприимчивости в системах с узкими пиками плотности состояний в окрестности уровня Ферми.
- Показано, что корректное описание структурных параметров халькогенидов  $\text{FeSe}$  и  $\text{FeS}$  для нормального и повышенного давления возможно только при учете корреляционной поправки к внутренней энергии.
- Предсказано, что увеличение объема ячейки в системах  $\text{FeSe}$  и  $\text{FeS}$  приводит к аномальному поведению решеточных, спектральных и магнитных свойств, связанному с переходом Лифшица, перестройке симметрии спиновых флуктуаций и орбитально-селективным изменениям перенормировок эффективной массы квазичастиц.

**Теоретическая и практическая значимость работы** заключается в том, что выполненные исследования позволили выявить микроскопические механизмы формирования необычных физических свойств основных классов пниктидов и халькогенидов железа. Полученная информация может использоваться для обоснованного выбора параметров моделей, описывающих свойства пниктидов и халькогенидов, а также поиска путей направленного изменения характеристик данных систем.

**Методы исследования.** Большинство результатов, пред-

ставленных в диссертационной работе, получены методом, объединяющим теорию динамического среднего поля (DMFT) с теорией функционала электронной плотности (DFT), позволяющим учитывать влияние локальных динамических кулоновских корреляций на физические свойства реальных систем [10, 11]. Для решения примесной задачи DMFT применялись методы квантового Монте-Карло (QMC). Использовались варианты QMC с дискретным и непрерывным термодинамическим временем [12–15].

Зонные расчеты, являющиеся начальным приближением в схеме DFT+DMFT, производились в рамках методов локальной электронной плотности и обобщенной градиентной поправки, реализованных в программных кодах Quantum ESPRESSO (псевдопотенциальный подход, разработка Международного центра теоретической физики им. А. Салама, г. Триест, Италия, <https://www.quantum-espresso.org/>) и ELK (полнопотенциальный подход, разработка Института физики Университета Граца, Австрия, <http://elk.sourceforge.net/>). Также данный тип расчетов использовался для некоторых из исследованных систем с целью определения стабильности различных типов спиновых упорядочений.

### **Основные положения, выносимые на защиту**

- Локальные динамические кулоновские корреляционные эффекты в  $3d$  оболочке, учитываемые в рамках подхода DFT+DMFT, позволяют объяснить аномалии спектральных, магнитных и решеточных свойств пниктидов и халькогенидов железа.
- Спектральные свойства основных классов соединений пниктидов и халькогенидов железа, рассчитанные методом DFT+DMFT, находятся в хорошем количественном согласии с экспериментальными данными.
- В родительских системах ВТСП пниктидов и халькогенидов железа реализуется ситуация 'промежуточной' силы орбитально-селективных кулоновских корреляций, перенормирующих спектральные функции в окрестности энергии

Ферми, но не приводящих к переносу спектрального веса в хаббардовские зоны.

- Орбитально-селективные кулоновские корреляции являются движущей силой перехода металл-диэлектрик в системе NaFeAs при легировании медью. Спектральные свойства диэлектрика  $\text{NaFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$ , рассчитанные методом DFT+DMFT, находятся в хорошем согласии с экспериментом.
- Слабый нестинг поверхности Ферми в LiFeAs является следствием выраженного орбитально-селективного характера кулоновских корреляций.
- Аномальный линейный температурный рост магнитной восприимчивости в соединениях LaFeAsO и BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, а также температурная зависимость восприимчивости в KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, хорошо воспроизводятся в подходе DFT+DMFT.
- Предложенная микроскопическая модель объясняет условия реализации возрастающей и убывающей температурной зависимости магнитной восприимчивости в системах с пиками плотности состояний в окрестности энергии Ферми.
- Структурные параметры халькогенидов FeSe и FeS при нормальном и повышенном давлении корректно описываются только при учете локальных динамических кулоновских корреляций.
- Предложенный микроскопический механизм предсказывает и объясняет изоструктурный фазовый переход, эволюцию спектральных и магнитных свойств FeSe и FeS при увеличении объема элементарной ячейки.

**Достоверность** представленных результатов обеспечивается применением широко апробированных методов расчета спектральных, магнитных и решеточных свойств систем на основе переходных металлов, обоснованным выбором моделей и приближений, а также согласием рассчитанных физических характеристик с экспериментальными данными.

**Личный вклад автора** включает выбор темы исследования, постановку цели и задач диссертационной работы, формулировку физической проблемы и определение методов ее решения. Автор лично выполнил большую часть расчетов спектральных, магнитных и решеточных свойств с учетом эффекта кулоновских корреляций, произвел интерпретацию и обобщение полученных результатов, сформулировал основные выводы работы. В частности, в рамках метода DFT+DMFT автором были рассчитаны спектральные и магнитные свойства соединений FeS, FeSe, BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, LaFeAsO, NaFeAs, спектральные свойства систем LaFePO, LaNiPO, LiFeAs, NdFeAsO. Оптимизация структурных параметров с учетом кулоновских корреляционных эффектов для соединения FeS выполнена автором самостоятельно, для FeSe – совместно с И.В. Леоновым. Расчеты зависимости структурных параметров от давления для системы FeSe методом DFT+DMFT произведены автором лично. Интерпретация результатов расчета магнитной восприимчивости LaFeAsO производилась совместно с А.А. Катаниным. Расчеты электронной структуры без учета эффекта кулоновских корреляций для соединения LaFeAsO выполнены совместно с А.О. Шориковым, для LiFeAs - с Д.Ю. Новоселовым и Т. Гюрелем, для BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> - с А.В. Ефремовым. Зонные расчеты соединения LaNiPO производились совместно с А.В. Лукояновым.

**Апробация работы.** В различные периоды работы над диссертацией получаемые результаты были представлены на следующих научных мероприятиях (в обратном хронологическом порядке): Симпозиуме Сколковского Института Науки и Технологий “Computational Materials Program of Excellence” (г. Москва, сентябрь 2019 г.); Международной конференции “Ab-Initio Modeling of Advanced Materials” (г. Екатеринбург, сентябрь 2019 г.); Международном научном семинаре “UK-Russia scientific workshop” (г. Екатеринбург, март 2019 г.); Международной конференции Европейской коллаборации по физике высоких давлений “56th ENPRG Meeting” (г. Авейру, Португалия, сентябрь 2018 г.); Международной конференции “Electronic Structure Theory for Accelerated Materials Design: New Tool for Materials Science” (г. Москва, ок-

тябрь 2017 г.); Ежегодном съезде Американского физического общества, APS March Meeting (г. Балтимор, США, март 2016 г.); Международной конференции “Ab Initio Based Modeling of Advanced Materials” (г. Екатеринбург, сентябрь 2016 г.); Симпозиуме и семинаре “Electronic Structure Theory for the Accelerated Design of Structural Materials” (г. Москва, октябрь 2015 г.); Ежегодном собрании Немецкого физического общества (г. Берлин, Германия, март 2015 г.); Международном семинаре “Strong electron correlation effects in complex d- and f-based magnetic materials for technological applications” (г. Прага, Чешская Республика, июнь - июль 2014 г.); Первой, второй и третьей международной конференции по применению метода DMFT для сильно коррелированных материалов (г. Дрезден, Германия, сентябрь 2012 г., октябрь 2015 г., сентябрь 2017 г.); Международном семинаре “Iron-Based Superconductors” Баварской академии наук (г. Мюнхен, Германия, март 2012 г.); Международной конференции “Superconductivity 100 years later: a Computational Approach” (г. Алгеро, Италия, сентябрь 2011 г.); Международном семинаре “Recent Developments in Dynamical Mean Field Theory” (г. Цюрих, Швейцария, сентябрь 2009 г.).

**Публикации.** Результаты работы изложены в 20 статьях [A1–A20], опубликованных в журналах, входящих в Перечень ВАК.

**Соответствие диссертации паспорту специальности.** Содержание диссертации соответствует пункту 1 “Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом (кристаллы, поликристаллы), так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления” Паспорта специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, восьми глав и заключения. Общий объем диссертации составляет 331 страницу, включая 11 таблиц и 81 рисунок. Список литературы содержит 263 наименования.

## Основное содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, восьми глав и заключения.

Во введении сформулированы основные цели работы, обоснована актуальность темы диссертации, приведены основные положения, выносимые на защиту. Также данный раздел содержит обсуждение теоретической и практической значимости работы, описание методологии исследования, список конференций и семинаров, на которых были представлены основные результаты диссертации.

В первой главе изложены основы современных широко используемых теоретических методик исследования электронной структуры реальных физических систем. Даны положения теории функционала электронной плотности и описаны приближения, позволяющие применять данную теорию на практике. Приведены детали использования волновых функций Ванье в качестве локализованного базиса подпространства состояний определенной симметрии. Особое внимание уделено вопросу исследования свойств систем с сильным локальным кулоновским взаимодействием между электронами при конечных температурах в рамках теории динамического среднего поля и связке DMFT с зонными методами. Подробно изложен стохастический подход решения примесной задачи DMFT, основанный на методе квантового Монте-Карло.

Во второй главе приведены результаты расчетов спектральных и магнитных свойств системы  $\text{LaFeAsO}$  в парамагнитной фазе. Структурно глава состоит из трех частей. В первой части обсуждаются результаты моделирования спектральных свойств  $\text{LaFeAsO}$  с учетом кулоновских корреляций. На основании анализа заселенностей и орбитально-разрешенных спектральных функций, полученных для различных значений хаббардовского параметра  $U$  и хундовского параметра  $J$  (Рисунок 1), был сделан вывод об орбитальной селективности корреляционных эффектов. А именно, получено, что влияние кулоновского взаимодействия наиболее выражено для состояний с симметрией  $t_2$ . Это проявля-



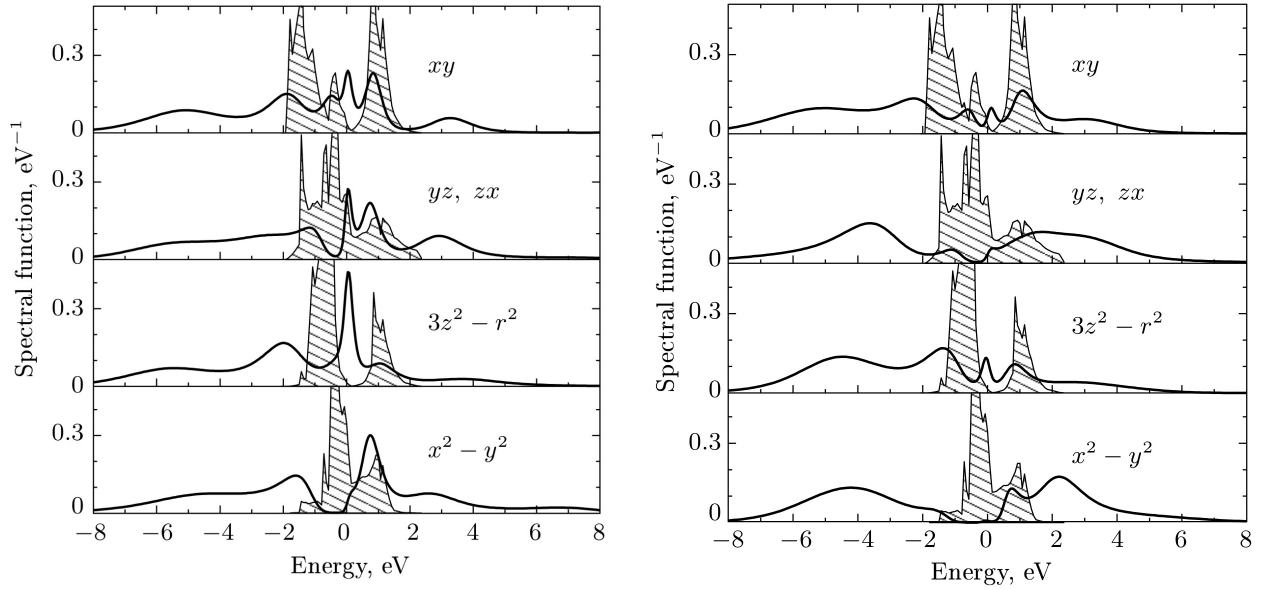


Рисунок 1 – Спектральные функции  $3d$  состояний железа в соединении  $\text{LaFeAsO}$ , полученные методом DFT+DMFT для температуры  $T = 1160$  К (сплошные линии) и DFT (заштрихованные области). Левые графики соответствуют хаббардовскому и хундовскому параметрам  $U = 4.0$  эВ и  $J = 0.7$  эВ, правые –  $U = 5.0$  эВ и  $J = 0.7$  эВ. Начало отсчета энергии соответствует уровню Ферми.

ется в сильной перенормировке спектральных функций по сравнению с результатами, получаемыми методом DFT, и связано с близостью состояний данной симметрии к половинному заполнению. Вместе с тем было показано, что для физически обоснованных величин  $U$  и  $J$  система  $\text{LaFeAsO}$  не находится на границе перехода металл-диэлектрик и проявляет свойства металла.

Во второй части главы исследуется температурная зависимость магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  соединения  $\text{LaFeAsO}$ . Результаты моделирования зависимости  $\chi(T)$ , полученные методом DFT+DMFT, приведены на Рисунке 2 в сравнении с экспериментальными данными работы [6]. Было установлено, что форма рассчитанной кривой  $\chi(T)$  в широком температурном интервале с хорошей точностью является линейной, что согласуется с экспериментом. Данный результат впервые демонстрирует возможность объяснения эффекта линейного температурного роста восприимчивости парамагнитной фазы  $\text{LaFeAsO}$  путем учета только локальных кулоновских корреляционных эффектов в рамках подхода DFT+DMFT. Выполненные расчеты показали, что при

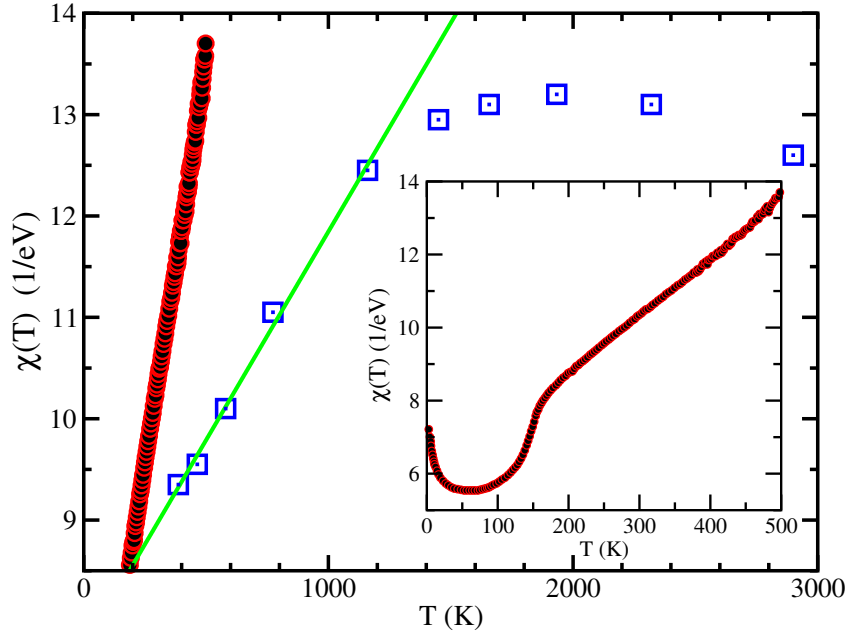


Рисунок 2 – Сравнение температурной зависимости магнитной восприимчивости  $\chi(T)$ , вычисленной методом DFT+DMFT для системы LaFeAsO (квадраты), с данными эксперимента [6] (закрашенные круги). Прямая соответствует линейной аппроксимации данных в температурном интервале от 0 до 1000 К. Полная экспериментально измеренная температурная зависимость восприимчивости изображена на вставке.

дальнейшем увеличении температуры рост восприимчивости сначала замедляется, далее функция  $\chi(T)$  имеет максимум, который переходит в убывающую часть. Для интерпретации результатов расчета восприимчивости было исследовано влияние температуры на спектральные свойства. Было показано, что изменение температуры, наряду с локальным кулоновским взаимодействием, приводит к достаточно сильному изменению спектральной функции LaFeAsO в окрестности энергии Ферми. Для фиксированных параметров  $U$  и  $J$  это выражается в смещении узких пиков заполненных состояний к уровню Ферми при понижении температуры.

На основании установленного влияния температуры на спектральные функции и анализа зависимости  $\chi(T)$  в приближении петлевой диаграммы, была предложена микроскопическая модель, объясняющая немонотонную температурную зависимость восприимчивости возбуждением состояний, формирующих узкие пики спектральной функции под уровнем Ферми. В рамках данной модели возрастающий участок функции  $\chi(T)$  является след-

ствием возбуждения состояний с энергиями от уровня Ферми до центра пика. При активации состояний с энергиями в окрестности центра пика рост восприимчивости замедляется, а при дальнейшем увеличении температуры происходит уменьшение числа активируемых состояний, что соответствует убывающему участку зависимости  $\chi(T)$ . Более детальный анализ предложенной модели представлен в третьей главе диссертации.

В заключительной части второй главы продемонстрировано, что полное замещение лантана неодимом в  $\text{LaFeAsO}$  не приводит к существенному изменению перенормировок квазичастичных масс  $m^*/m$  для  $3d$  состояний. Значения  $m^*/m$  вычислялись согласно соотношению  $m^*/m = 1 - \partial \text{Re}\Sigma(\omega)/\partial\omega|_{\omega\rightarrow 0}$ , где  $\Sigma(\omega)$  – собственно-энергетическая часть метода DFT+DMFT, аналитически продолженная на ось действительных энергий. Ввиду значительного отличия критических температур сверхпроводников, получаемых путем легирования  $\text{LaFeAsO}$  и  $\text{NdFeAsO}$  фтором (замещение кислорода), и хорошего согласия расчетных спектральных свойств родительских соединений с экспериментом, сделан вывод об отсутствии явной связи величины  $m^*/m$  с температурой перехода в сверхпроводящее состояние. Также высказано предположение о важности спиновых флуктуаций для понимания различий сверхпроводящих свойств данных систем, на что косвенно указывает возможность изменения поверхности Ферми при легировании.

В третьей главе содержатся результаты исследования спектральных свойств и температурной зависимости магнитной восприимчивости соединений  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  и  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  в парамагнитном состоянии. Выполненные расчеты показывают, что кулоновские корреляционные эффекты в  $3d$  оболочке железа, учитываемые в рамках метода DFT+DMFT, не являются слабыми и оказывают влияние на формирование спектральных свойств. Это выражается в существенной перенормировке спектральных функций (т.е. результата, получаемого в DFT по сравнению с DFT+DMFT) в узкой окрестности энергии Ферми и слабом влиянии кулоновских корреляций на форму дисперсионных кривых и плотностей состояний при больших энергиях. В частности, для соединения

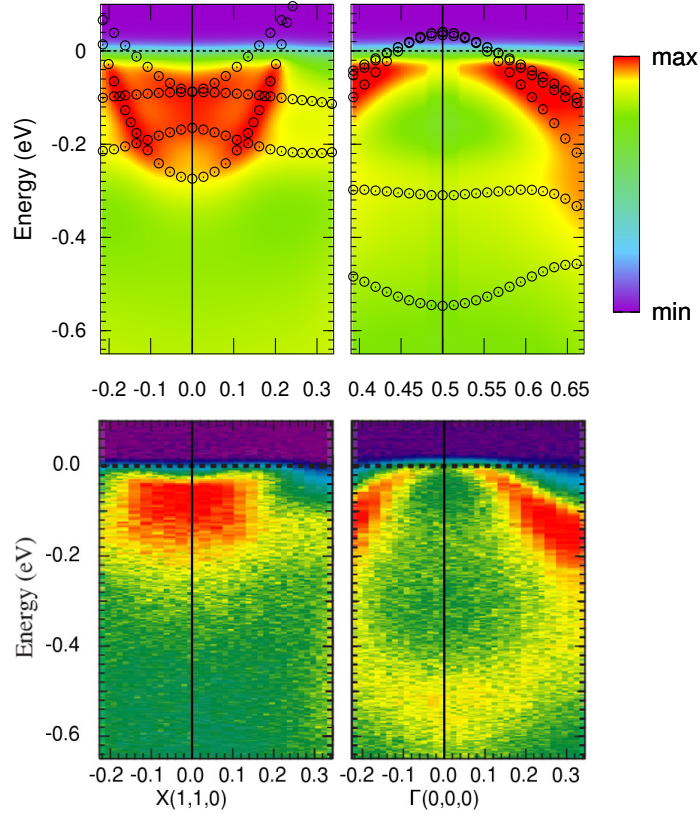


Рисунок 3 – Распределение спектрального веса в окрестности точек  $\Gamma$  и  $X$  вдоль направления  $\Gamma$ - $X$  зоны Бриллюэна в соединении  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , рассчитанное методом DFT+DMFT для температуры  $T = 580$  К (верхние графики), и фотоэмиссионные спектры с угловым разрешением из работы [16] (нижние графики). Интенсивность задана цветом, круги соответствуют зонной структуре, рассчитанной в DFT+DMFT. За начало отсчета энергии принят уровень Ферми.

$\text{BaFe}_2\text{As}_2$  было получено, что величина усиления квазичастичной массы  $m^*/m$ , количественно характеризующая силу корреляционных эффектов, слабо отличается для различных  $3d$  состояний и приближенно равна 2. В то же время, для изоструктурной системы  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  было показано, что кулоновские корреляции демонстрируют более выраженную орбитальную селективность, что проявляется в больших значениях  $m^*/m$  и большей перенормировке спектральных функций для состояний с симметрией  $t_2$ . Однако ни в том ни в другом случае не был обнаружен перенос спектрального веса из окрестности энергии Ферми в хаббардовские зоны, а получено только масштабное преобразование спектральных функций с коэффициентом  $m^*/m$  в области линейного поведения  $\text{Re}\Sigma(\omega)$ .

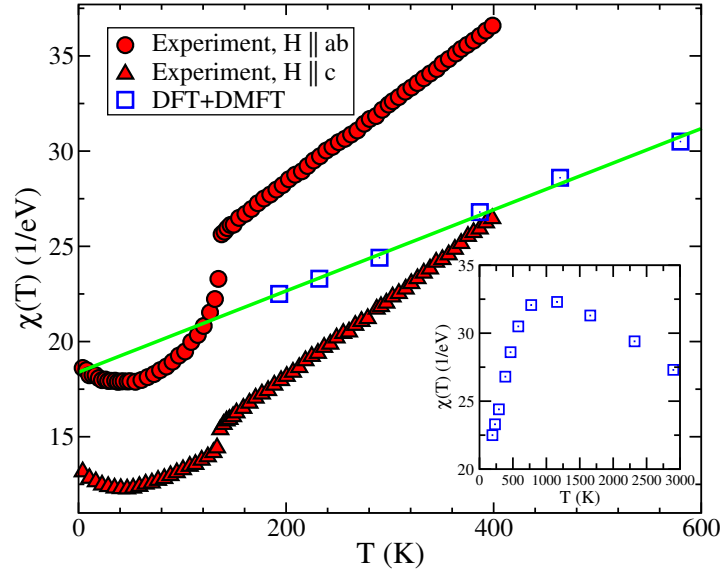


Рисунок 4 – Температурная зависимость магнитной восприимчивости соединения  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , рассчитанная методом DFT+DMFT (квадраты) в сравнении с данными эксперимента из работы [7] (круги, треугольники). Линейная аппроксимация рассчитанной магнитной восприимчивости в низкотемпературной области изображена сплошной линией. На вставке приведены данные расчета методом DFT+DMFT в широком интервале температур.

Рассчитанные интегральные спектральные функции, а также распределение спектрального веса в обратном пространстве (Рисунок 3), находятся в хорошем согласии с данными фотоэмиссионных экспериментов [16]. На основании анализа полученных данных по влиянию локального кулоновского взаимодействия на спектральные свойства соединений  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  и  $\text{KFe}_2\text{As}_2$ , а также  $\text{LaFeAsO}$ , была расширена общепринятая классификация корреляционных эффектов и введено представление о классе 'промежуточно-коррелированных' соединений, к которым относятся слоистые пниктиды и халькогениды железа. В данных системах корреляционные эффекты вызывают перенормировку энергетического спектра в окрестности уровня Ферми, но при этом не являются достаточно сильными для переноса спектрального веса в хаббардовские зоны.

Во второй части главы представлены результаты моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости  $\chi(T)$ . Для соединения  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  было показано, что, в полном согласии с экспериментом, вычисленная методом DFT+DMFT

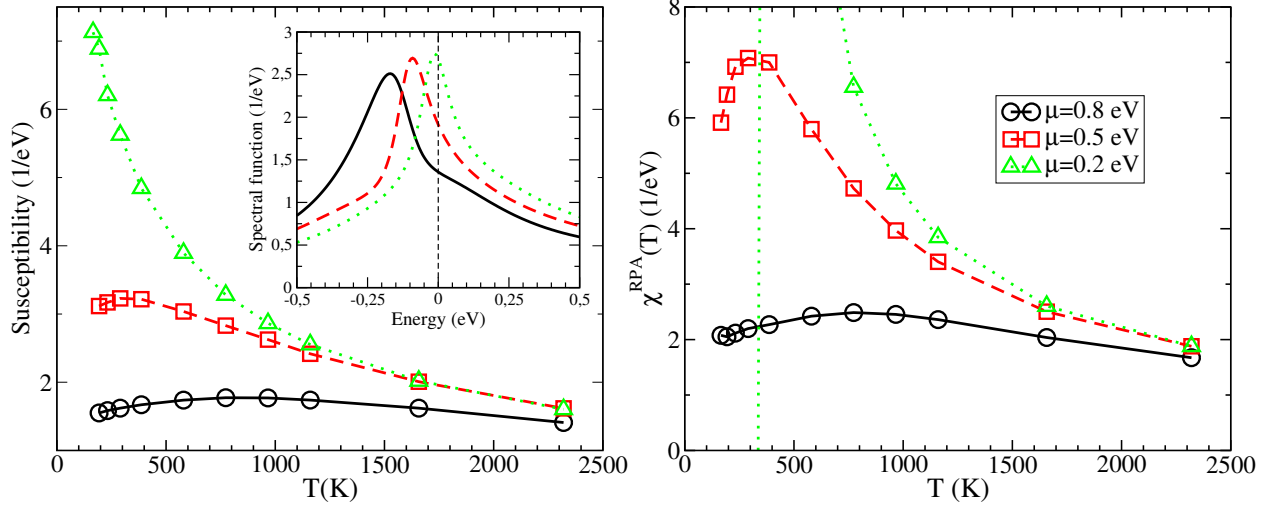


Рисунок 5 – Температурная зависимость магнитной восприимчивости однозонной модели с невзаимодействующей плотностью состояний соединения  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , рассчитанная методом DFT+DMFT для различных значений химического потенциала. На левом графике изображены результаты расчета восприимчивости как отклик на внешнее магнитное поле. Спектральные функции, полученные в DFT+DMFT, изображены на вставке. На правом графике приведен результат, полученный в приближении случайных фаз.

функция  $\chi(T)$  в широком интервале температур имеет форму, близкую к линейной (Рисунок 4). Установлено, что линейный характер имеют вклады в  $\chi(T)$  от всех  $3d$  состояний железа. При этом для орбиталей с наименее выраженными корреляционными эффектами расчет  $\chi(T)$  методом петлевой диаграммы и в приближении случайных фаз позволяет качественно воспроизвести кривую, получаемую в DFT+DMFT. Это указывает на возможную связь особенностей температурного поведения восприимчивости с одночастичными свойствами системы. Для демонстрации данной связи, на примере однозонной модели, имеющей плотность состояний реального соединения  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , было показано, что данный режим реализуется при достаточной близости узкого пика заполненных состояний к уровню Ферми (Рисунок 5). Качественно аналогичное поведение восприимчивости было получено для спектральной функции в виде гауссиана. Результаты данных расчетов являются прямым подтверждением механизма температурного роста восприимчивости, предложенного автором диссертации для системы  $\text{LaFeAsO}$ , объясняющего возрастание восприимчивости термическими возбуждениями состояний, фор-

мирующих узкие пики спектральных функций под уровнем Ферми.

Функция  $\chi(T)$ , рассчитанная для соединения  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  методом DFT+DMFT, является убывающей и в высокотемпературной области находится в хорошем согласии с экспериментом. Показано, что отличия формы кривой  $\chi(T)$  от экспериментальных данных для других пниктидов и халькогенидов железа могут быть объяснены в рамках модели, предложенной автором диссертации для интерпретации результатов расчета температурной зависимости магнитного отклика в соединениях  $\text{LaFeAsO}$  и  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ . Полученные результаты демонстрируют, что, в полном согласии с модельными представлениями, качественный характер температурной зависимости магнитного отклика систем с узкими пиками спектральной функции под уровнем Ферми может изменяться в зависимости от положения данного пика относительно уровня Ферми.

В четвертой главе приведены результаты анализа электронной структуры двух представителей слоистых оксипниктидных систем, проявляющих сверхпроводящие свойства. Для соединения  $\text{LaFePO}$  путем расчета спектральных свойств методом DFT+DMFT было показано, что усредненная по  $3d$  орбиталам железа величина перенормировки квазичастичной массы  $m^*/m$  близка к 2, что находится в хорошем согласии с экспериментальными оценками [18]. Рассчитанное распределение спектрального веса в обратном пространстве (Рисунок 6) хорошо согласуется с фотоэмиссионными спектрами с угловым разрешением из работы [17]. Сравнение спектральных функций, полученных в DFT и DFT+DMFT, а также анализ влияния кулоновских корреляций на полюсы функции Грина показали, что корреляционные эффекты, учет которых позволяет добиться хорошего согласия рассчитываемых спектральных свойств с экспериментом, не приводят к вытеснению спектрального веса из окрестности уровня Ферми и его локализации на больших энергиях (в хаббардовских зонах).

Расчеты электронной структуры соединения  $\text{LaNiPO}$ , изоструктурного  $\text{LaFePO}$ , выполненные методом DFT+DMFT,



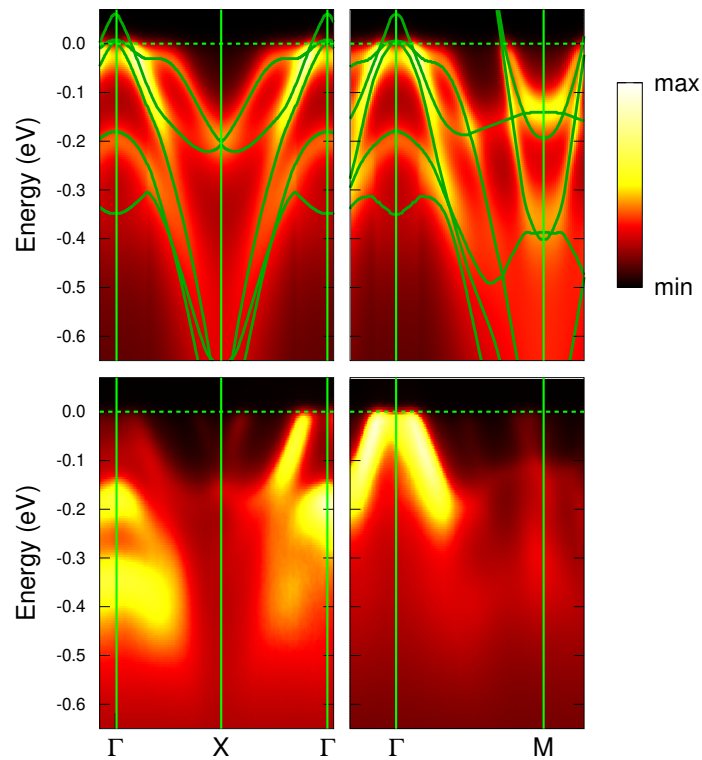


Рисунок 6 – Верхние рисунки: распределение спектрального веса (контуры) и зонная структура (линии) в соединении LaFePO, рассчитанные методом DFT+DMFT ( $T = 580$  K), для пути  $\Gamma$ -X- $\Gamma$  и направления  $\Gamma$ -M в зоне Бриллюэна. Нижние рисунки: экспериментальные фотоэмиссионные спектры с угловым разрешением [17]. Интенсивность задана цветом, начало отсчета энергии соответствует уровню Ферми.

показали, что замещение железа никелем приводит к усилению корреляционных эффектов. В данном случае, в дополнение к перенормировке спектральных функций в окрестности уровня Ферми (по сравнению с DFT результатами), свойственной многим представителям пниктидов и халькогенидов железа, добавляется перенос спектрального веса от уровня Ферми в область больших энергий возбуждения, что сопровождается формированием нижней хаббардовской зоны. Продемонстрировано, что спектральные функции LaNiPO, рассчитанные в DFT+DMFT, качественно верно описывают эксперимент (рентгеновские фотоэмиссионные спектры). Таким образом, система LaNiPO, в отличие от слоистых оксипниктидов и халькогенидов железа, является сильно коррелированным соединением.

В пятой главе обсуждается влияние локальных кулоновских корреляционных эффектов на спектральные свойства соединения



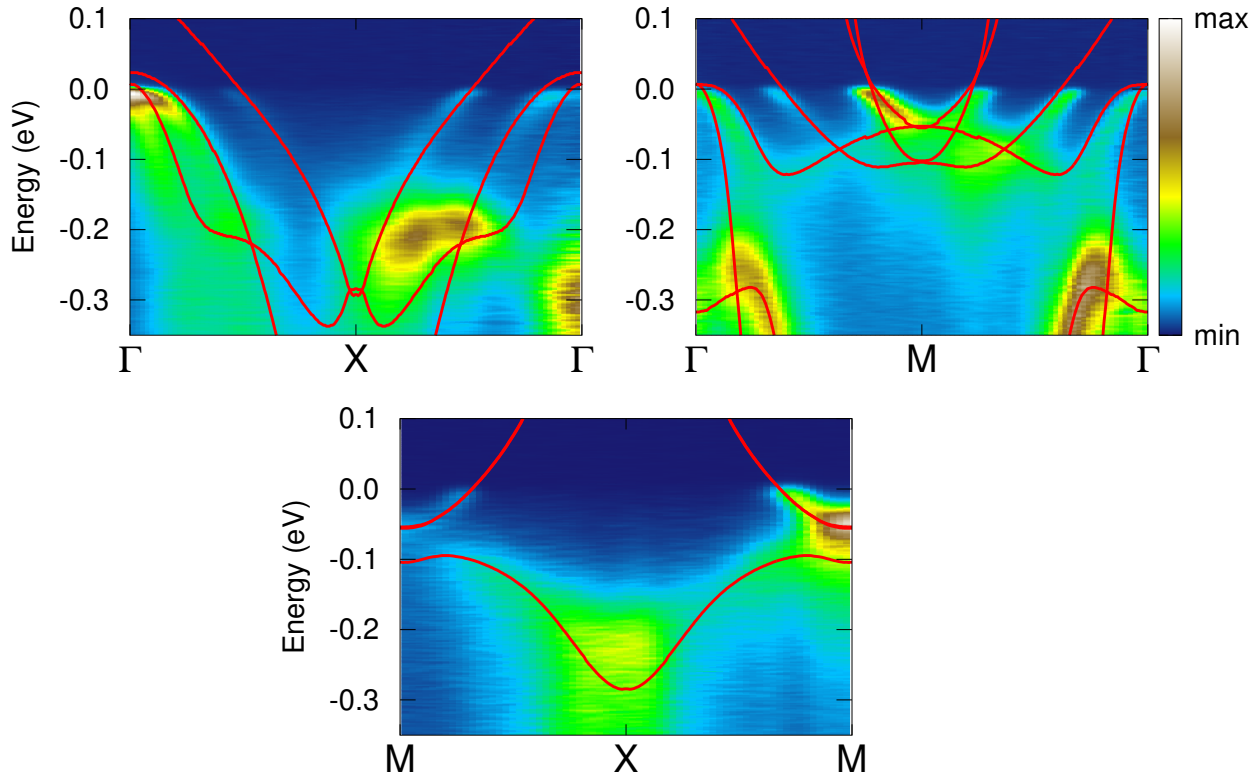


Рисунок 7 – Сравнение экспериментального распределения интенсивности фотоэлектронов (цветные контуры) [19] в соединении LiFeAs для путей  $\Gamma$ - $X$ - $\Gamma$ ,  $\Gamma$ - $M$ - $\Gamma$ ,  $M$ - $X$ - $M$  в зоне Бриллюэна и зонной структуры, рассчитанной методом DFT+DMFT (сплошные линии) для температуры  $T = 290$  К. Начало отсчета энергии соответствует уровню Ферми.

LiFeAs. Расчеты, выполненные методом DFT+DMFT, показали, что корреляционные эффекты обладают выраженной орбитальной селективностью и наиболее сильно проявляют себя для состояний с симметрией  $t_2$ . Для данных состояний это проявляется в больших значениях перенормировки эффективной массы квазичастиц  $m^*/m$  и большем масштабном преобразовании соответствующих спектральных функций, рассчитанных методом DFT, в окрестности энергии Ферми. Вычисленная величина усредненной по  $3d$  орбиталям перенормировки квазичастичной массы, а также распределение спектрального веса в обратном пространстве (Рисунок 7), находятся в хорошем согласии с данными спектроскопии и указывает на важность учета кулоновских корреляций для описания особенностей электронной структуры LiFeAs. Показано, что полученные в рамках DFT+DMFT сдвиги и перенормировки зон вблизи уровня Ферми, обусловленные орби-

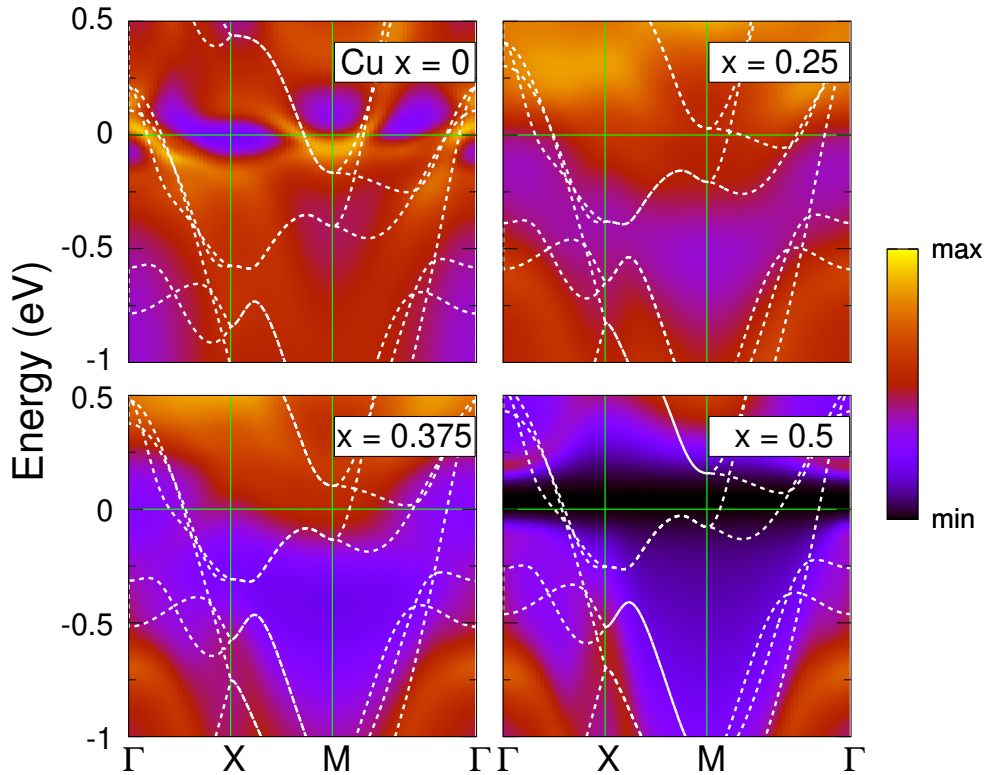


Рисунок 8 – Распределение спектрального веса вдоль пути  $\Gamma$ -X-M- $\Gamma$  зоны Бриллюэна для соединения  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ , рассчитанное в рамках модели сдвига уровня Ферми для различных значений параметра легирования  $x$  методом DFT+DMFT ( $T = 290$  K). Интенсивность задана цветом, результат расчета методом DFT изображен пунктирными линиями. Уровень Ферми соответствует 0 эВ.

тальной селективностью, приводят к изменению формы поверхности Ферми по сравнению с результатом расчетов методом DFT. Это объясняет слабо выраженный нестинг между электронными и дырочными карманами поверхности Ферми (по сравнению с другими ВТСП системами на основе железа), регистрируемый в фотоэмиссионных экспериментах с угловым разрешением [19].

В шестой главе описаны и проанализированы результаты исследования перехода металл-диэлектрик в серии соединений  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$  методом DFT+DMFT. Используются два метода учета замещения железа медью. В первом подходе различные концентрации меди исследованы в рамках модели сдвига уровня Ферми исходного соединения (т.е. как дырочное легирование  $\text{NaFeAs}$ ). Случай равных концентраций ( $\text{NaFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$ ) с экспериментально установленным упорядочением ионов меди и желе-

за, исследовался методом сверхъядер.

Было получено, что учет легирования медью в рамках модели сдвига уровня Ферми, при условии применения подхода DFT+DMFT, позволяет описать переход металл-диэлектрик с формированием энергетической щели для  $x = 0.5$  (Рисунок 8). Тогда как использование данной модели при расчетах электронной структуры методом DFT дает металлическое решение (в том числе и для  $x = 0.5$ ). Это указывает на принципиальную важность учета кулоновских корреляций для понимания отличий спектральных свойств различных соединений серии  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ . Для  $x = 0.5$  полученная в расчетах методом DFT+DMFT величина энергетической щели, равная 0.2 эВ, хорошо согласуется с данными спектроскопии с угловым разрешением [20]. Рассчитанные локальная спиновая восприимчивость  $\chi(\tau)$  и зависимость статической спиновой восприимчивости от волнового вектора  $\chi(\mathbf{q})$  позволили сделать вывод об орбитально-селективной локализации электронов и изменении симметрии спиновых флуктуаций при малых концентрациях меди. В данной и последующих главах локальная спиновая восприимчивость вычислялась методом квантового Монте-Карло при решении примесной задачи DMFT как  $\chi(\tau) = \langle \hat{m}(\tau)\hat{m}(0) \rangle$  ( $\hat{m}(\tau)$  – локальный спиновый момент железа как функция термодинамического времени  $\tau$ ). Зависимость статической спиновой восприимчивости от волнового вектора рассчитывалась в приближении петлевой диаграммы как  $\chi(\mathbf{q}) = -k_B T \text{Tr} \sum_{\mathbf{k}, n} \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n)$ , где  $\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$  – функция Грина, вычисляемая методом DFT+DMFT,  $\omega_n$  – фермионная мацубаровская частота.

Было установлено, что полученное распределение спектрального веса в валентной зоне для  $x = 0.5$  имеет существенные расхождения с экспериментальными фотоэмиссионными спектрами в окрестности точек  $\Gamma$  и  $M$  зоны Бриллюэна. Это указывает на то, что описание перехода металл-диэлектрик в модели сдвига уровня Ферми возможно только на качественном уровне и только при явном учете кулоновского взаимодействия между электронами. Применение данной модели является физически оправдан-

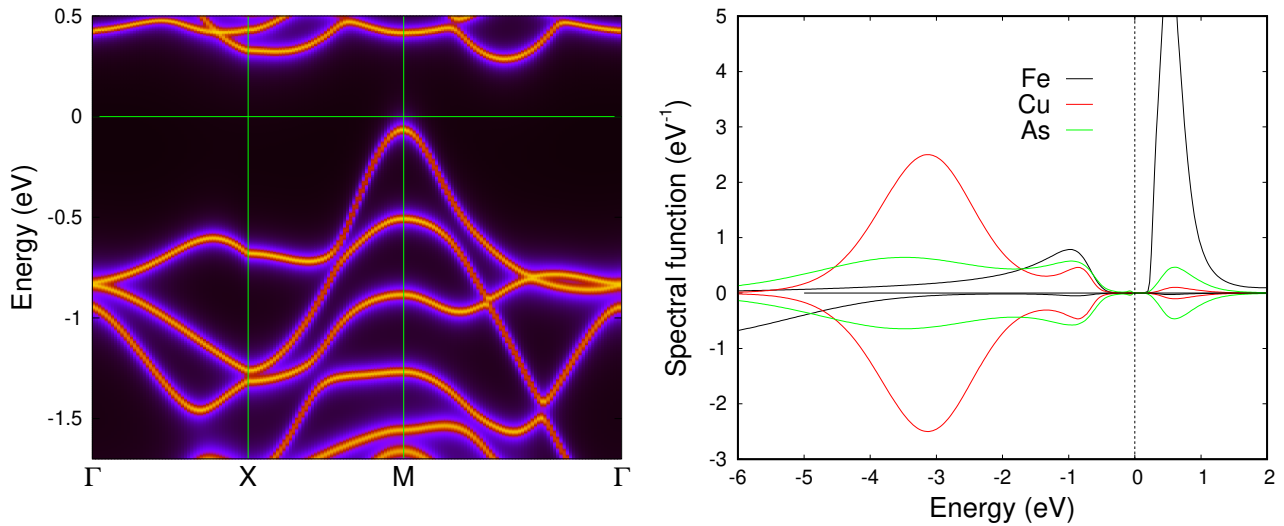


Рисунок 9 – Распределение спектрального веса для пути  $\Gamma$ - $X$ - $M$ - $\Gamma$  в зоне Бриллюэна (слева) и спектральные функции, соответствующие вкладам различных атомов (справа) системы  $\text{NaFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$ , рассчитанные методом DFT+DMFT ( $T = 290$  K). Уровень Ферми соответствует 0 эВ.

ным для понимания тенденций изменения спектральных и магнитных свойств  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$  при малых  $x$ . Был сделан вывод, что корректное описание особенностей распределения спектрального веса в валентной зоне требует принятия в рассмотрение разности локальных потенциалов меди и железа, а также реального пространственного упорядочения данных ионов.

Явный учет присутствия меди в узлах решетки путем построения соответствующей элементарной ячейки (для состава  $\text{NaFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$ ), позволил существенно улучшить описание спектральных свойств. Рассчитанные спектральные функции  $\text{NaFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$  и распределение спектрального веса в зоне Бриллюэна (Рисунок 9) соответствуют диэлектрику с энергетической щелью 0.3 эВ, что близко к значению, полученному в рамках модели сдвига уровня Ферми и находится в хорошем согласии с экспериментом. Важным отличием рассчитанной зонной структуры от результата, получаемого в рамках модели сдвига уровня Ферми, является корректное описание распределения спектрального веса в валентной зоне, согласующееся с фотоэмиссионными спектрами с угловым разрешением. Дополнительно были вычислены обменные параметры модели Гайзенберга, величины которых находятся в хорошем согласии с экспериментальными оцен-

ками [21].

Таким образом, представленные результаты демонстрируют возможность объяснения эволюции электронной структуры и магнитных свойств системы  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$  при изменении  $x$  и указывают на ключевую роль кулоновских корреляционных эффектов. При этом в случае малых концентраций меди применима модель сдвига уровня Ферми исходного соединения  $\text{NaFeAs}$ , а описание спектральных свойств и обменных параметров в диэлектрическом состоянии возможно путем построения соответствующей элементарной ячейки, содержащей одинаковое количество атомов меди и железа.

В седьмой главе изложены результаты детального исследования влияния кулоновских корреляций на структурные, спектральные и магнитные свойства базового соединения ВТСП систем на основе железа  $\text{FeSe}$ . Для моделирования использовались реализации подхода  $\text{DFT}+\text{DMFT}$  с самосогласованием по зарядовой плотности и без такового. Показано, что учет зарядового самосогласования не оказывает качественного влияния на конечный результат и не изменяет основные физические выводы.

Выполненные расчеты показали, что теоретическое описание структурных параметров  $\text{FeSe}$ , вычисляемых путем минимизации внутренней энергии в модели всестороннего расширения (сжатия), невозможно без учета корреляционных эффектов в  $3d$  оболочке железа. Рассчитанные зависимости внутренней энергии от объема ячейки при фиксированном отношении структурных параметров тетрагональной ячейки  $c/a$ , изображенные на Рисунке 10, позволяют сделать вывод о том, что постоянная решетки, получаемая в рамках  $\text{DFT}$ , недооценивается на 3%, в то время как применение подхода  $\text{DFT}+\text{DMFT}$  приводит к существенному улучшению согласия с экспериментом (отклонение менее 1%). Было показано, что при расширении решетки происходит изоструктурный переход первого рода в фазу большего объема, характеризующую большим значением спина в парамагнитном состоянии и меньшим объемным упругим модулем. Данный переход проявляется на рассчитанной зависимости внутренней энергии от постоянной решетки в виде излома кривой (Рисунок 10, левый

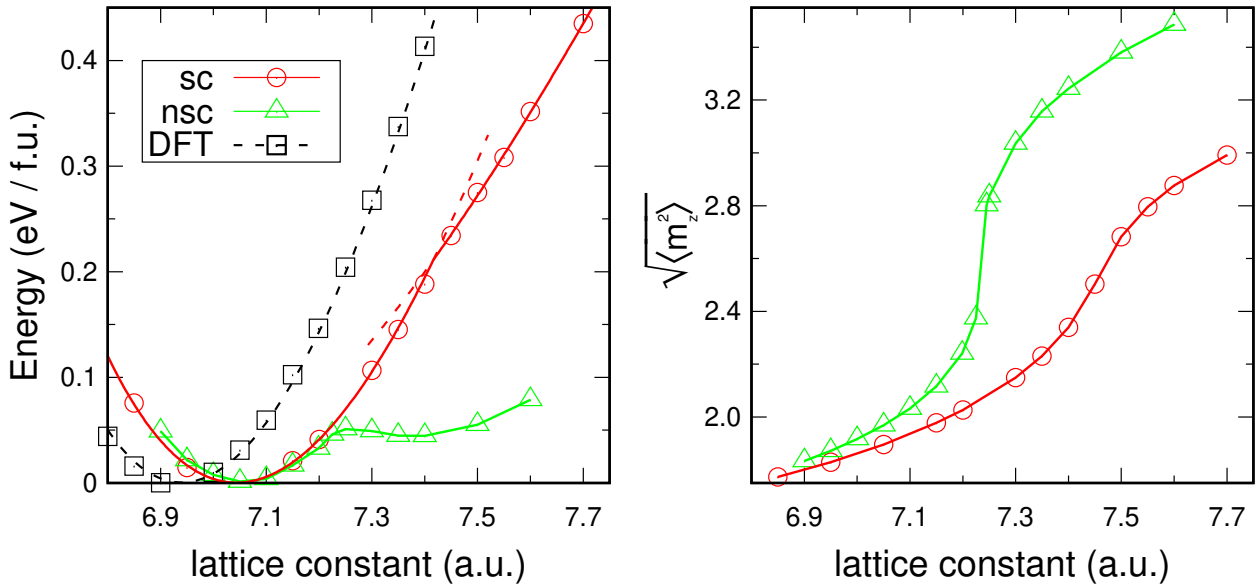


Рисунок 10 – Зависимости внутренней энергии (левые графики) элементарной ячейки и локального момента атома железа (правые графики) от постоянной решетки  $a$  в системе FeSe, рассчитанные зарядово-несогласованным (треугольники) и зарядово-согласованным (круги) методом DFT+DMFT для температуры  $T = 390$  К. Для сравнения приведен энергетический профиль, полученный спин-неполяризованным методом DFT (квадраты).

график, круги и треугольники), что делает невозможным ее описание одним уравнением Бирча-Мурнагана [22, 23]. Было показано, что зависимость внутренней энергии от объема, вычисляемая методом DFT, не имеет указанной особенности (Рисунок 10, левый график, квадраты). Это говорит о том, что кулоновские корреляции являются определяющим фактором перехода в фазу большего объема. Расчеты методом DFT+DMFT, выполненные для различных физически обоснованных значений хаббардовского и хундовского параметров, также выявили наличие особенности энергетического профиля. Таким образом, изоструктурное превращение при увеличении объема ячейки в FeSe, получаемое в расчете методом DFT+DMFT, не зависит от выбора величин  $U$  и  $J$  для  $3d$  электронов железа.

Для понимания микроскопического механизма данного изоструктурного превращения был выполнен сравнительный анализ силы корреляционных эффектов, характеризуемой отношением  $m^*/m$ , а также спектральных и магнитных свойств фаз мень-



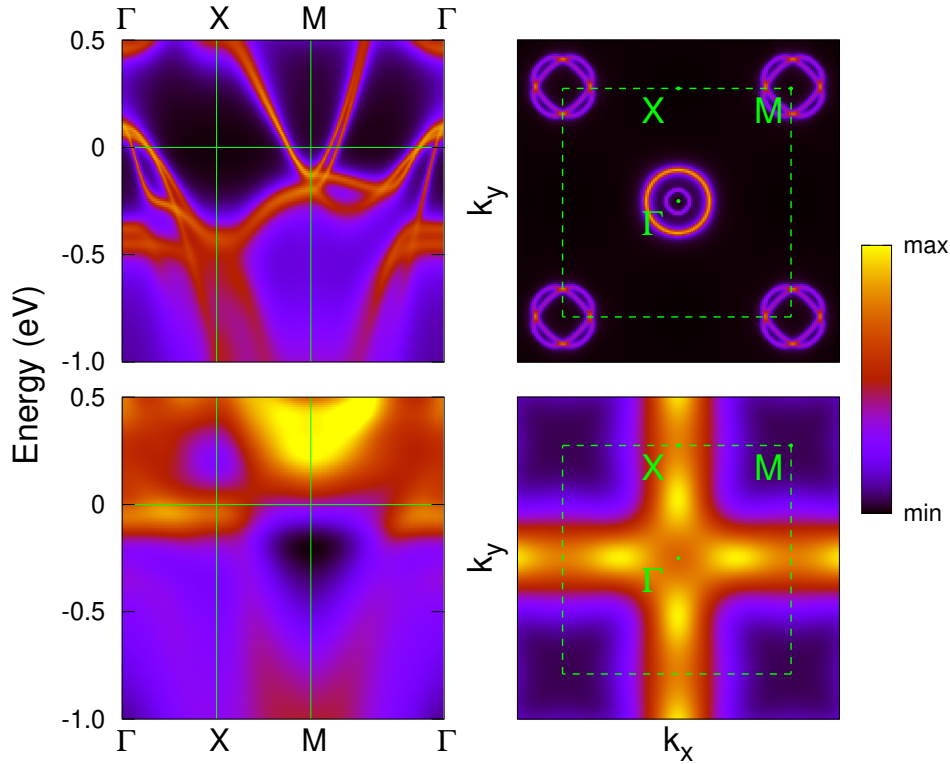


Рисунок 11 – Распределение спектрального веса для пути  $\Gamma$ -X-M- $\Gamma$  (слева) и на уровне Ферми (0 эВ, справа) для системы FeSe, рассчитанное зарядово-согласованным методом DFT+DMFT ( $T = 390$  K). Интенсивность задана цветом. В верхней части рисунка изображен результат для постоянной решетки  $a = 7.05 a_0$ , в нижней – для  $a = 7.6 a_0$  ( $a_0$  - боровский радиус).

шего и большего объема. Было получено, что увеличение объема ячейки приводит к усилению орбитальной селективности перенормировок квазичастичных масс, при этом для орбиталей с симметрией  $xy$  прослеживается явная тенденция к расходимости собственно-энергетической части вблизи энергии Ферми. Показано, что усиление корреляционных эффектов сопровождается орбитально-селективным ростом величин локальных моментов, что следует из качественно разных форм кривых локальных спиновых восприимчивостей, вычисленных для различных орбиталей  $3d$  оболочки железа в фазе меньшего и большего объема. Данные теоретические результаты хорошо согласуются с наблюдаемой потерей когерентности в системе  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$  при росте концентрации теллура (увеличении объема ячейки относительно FeSe - так называемом отрицательном 'химическом' давлении) [24].

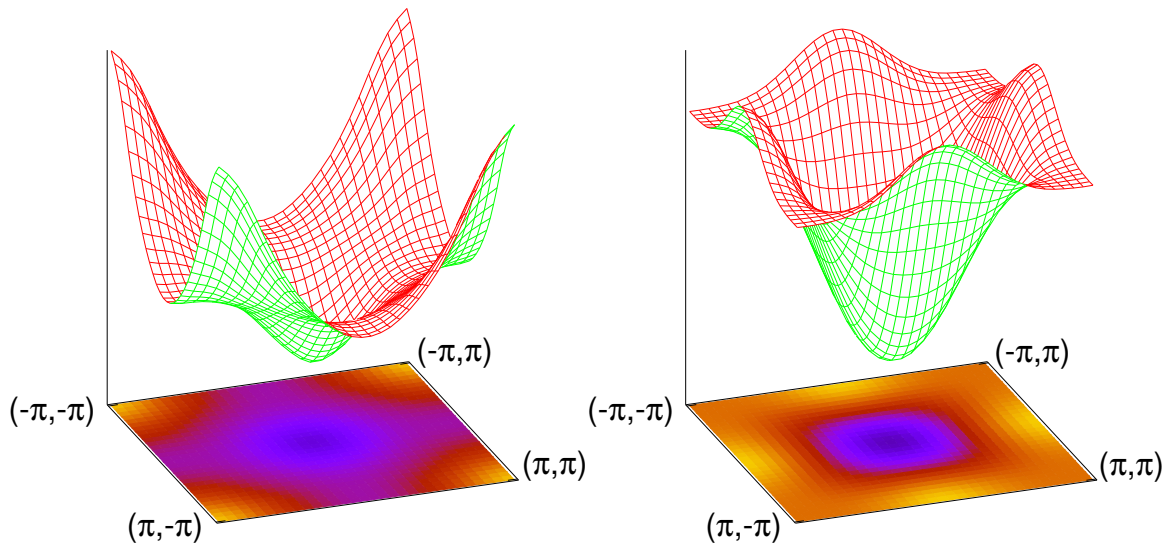


Рисунок 12 – Зависимость статической спиновой восприимчивости от волнового вектора в соединении FeSe, рассчитанная зарядово-согласованным методом DFT+DMFT для температуры  $T = 390$  К. В левой части рисунка изображен результат для постоянной решетки  $a = 7.05 a_0$ , в правой – для  $a = 7.6 a_0$  ( $a_0$  - борковский радиус).

Было продемонстрировано, что следствием выраженной орбитальной селективности в фазе большего объема является не только масштабное преобразование зонной структуры (по сравнению с результатом, получаемым в DFT) в окрестности уровня Ферми, характерное для ВТСП систем на основе железа, а качественное изменение формы спектральной функции и поверхности Ферми (переход Лифшица). Последнее заключается в переходе от доминирующего вектора нестинга  $(\pi, \pi)$  в фазе меньшего объема к  $(\pi, 0)$  в фазе большего объема (Рисунок 11, справа). Получено, что данный переход сопровождается соответствующим изменением симметрии спиновых флуктуаций, что следует из смещения пиков зависимости статической спиновой восприимчивости от волнового вектора, вычисленной для фаз большего и меньшего объема (Рисунок 12). Рассчитанное изменение спектральных и магнитных свойств согласуется с экспериментальными данными для серии изоструктурных изоэлектронных соединений  $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$  [24, 25], в которой увеличение объема ячейки происходит ввиду большего ионного радиуса теллура в сравнении с селеном.



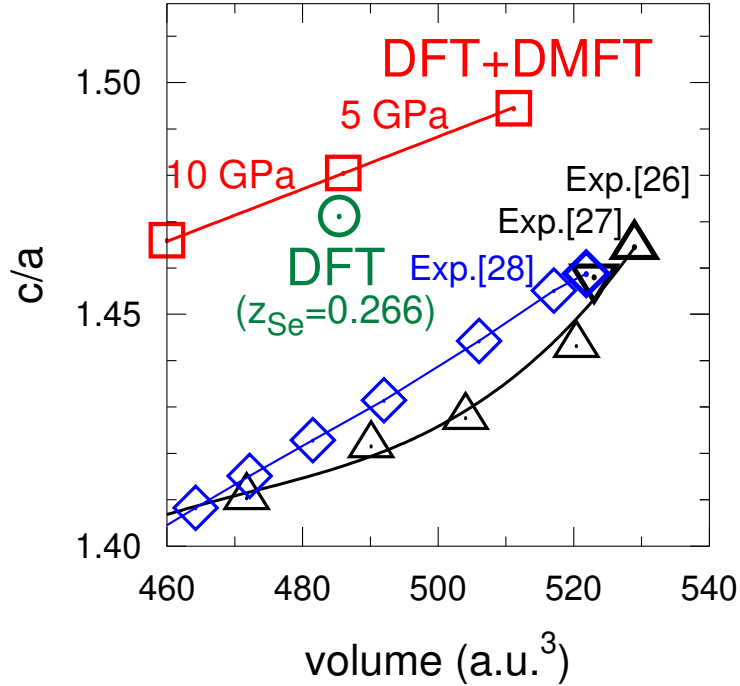


Рисунок 13 – Зависимость объема элементарной ячейки и отношения  $c/a$  тетрагональной фазы FeSe от давления (квадраты), полученная в рамках метода DFT+DMFT для температуры  $T = 290$  К. Структурные параметры при нулевом давлении, полученные методом DFT обозначены кругом. Остальными символами показаны экспериментально определенные зависимости структурных параметров от давления [26–28].

Выполненный анализ распределения спектрального веса в обратном пространстве показал, что переход Лифшица в FeSe при увеличении объема ячейки является следствием пересечения уровня Ферми особенностью Ван Хова в окрестности точки  $M$  (простой) зоны Бриллюэна тетрагональной решетки (Рисунок 11, слева). Дополнительно было показано, что микроскопический механизм изменения спектральных свойств, заключающийся в смещении особенностей одноэлектронного спектра (таких как особенность Ван Хова в случае FeSe), вызванным корреляционными эффектами, характерен не только для FeSe, а реализуется в ряде металлических систем. В частности, данный механизм позволяет объяснить переход Лифшица при легировании в новом классе двумерных сверхпроводников – тонких пленках никелатов на основе  $\text{NdNiO}_2$ , а также важен для описания поверхности Ферми

соединения  $ZrZn_2$ .

В завершении исследования было выполнено моделирование зависимости структурных, спектральных и магнитных свойств  $FeSe$  от давления. Расчеты выполнялись в рамках модели, учитывающей наличие слабо связанных плоскостей атомов железа путем оптимизации всех структурных параметров элементарной ячейки (включая координату селена  $z_{Se}$ ). Вычисленная в рамках DFT+DMFT зависимость параметров элементарной ячейки от давления (Рисунок 13) находится в хорошем согласии с экспериментом, а наблюдаемые отличия связаны с необходимостью учета взаимодействия Ван дер Ваальса между электрически нейтральными слоями тетраэдров  $FeS_4$ , которым пренебрегается в расчетной схеме DFT+DMFT. Также было показано, что моделирование данной зависимости методом DFT дает качественно неверный результат, что говорит об определяющей роли кулоновских корреляционных эффектов в  $3d$  оболочке железа для объяснения эволюции структурных параметров  $FeSe$  под давлением.

Анализ полученных результатов показал, что сжатие элементарной ячейки также способно вызвать переход Лифшица. В данном случае изменение поверхности Ферми заключается в ослаблении ее квазидвумерного характера, что отличается от результата, полученного для расширения ячейки. Ослабление квазидвумерности выражается в более сильной зависимости площади сечения карманов поверхности Ферми в плоскости  $(k_x, k_y)$  от компоненты волнового вектора  $k_z$ . В частности, было получено, что центральный дырочный карман, при нормальном давлении представляющий собой цилиндр с осью на направлении  $\Gamma$ -Z, становится замкнутым при давлении около 10 ГПа. Подобное поведение спектральных свойств хорошо согласуется с результатами фотоэмиссионной спектроскопии, полученными для серии соединений  $FeSe_{1-x}S_x$ , представители которой в первом приближении могут рассматриваться как  $FeSe$ , сжатый 'химическим' способом (ввиду меньшего ионного радиуса серы по сравнению с селеном) [29].

Выполненные расчеты магнитных свойств не выявили существенных изменений величин локальных магнитных моментов и симметрии спиновых флуктуаций (а также их амплитуды) при

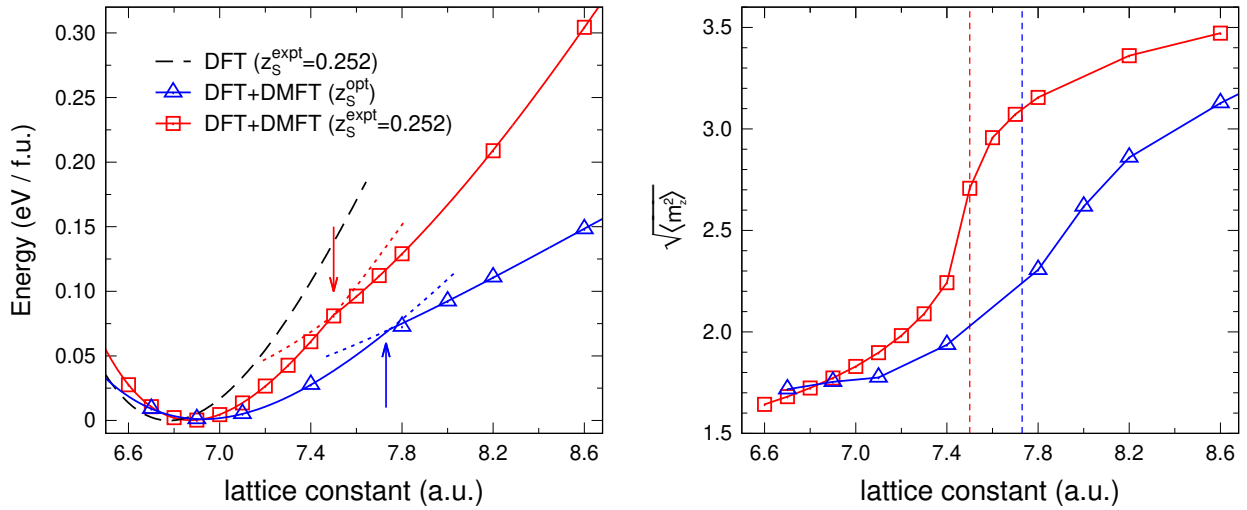


Рисунок 14 – Зависимости внутренней энергии (слева) и локального момента (справа) в соединении FeS от постоянной решетки, полученные методом DFT+DMFT для температуры  $T = 290$  К. Пунктирная кривая на левом графике соответствует результатам, полученным спин-неполяризованным методом DFT. Расчеты выполнены для экспериментальной ( $z_S^{\text{exp}}$ ) и оптимизированной ( $z_S^{\text{opt}}$ ) координаты атома серы. Положение особенности энергетического профиля отмечено стрелками на левом графике и вертикальными пунктирными линиями на правом.

сжатии элементарной ячейки FeSe. Это позволило высказать предположение об электрон-фононном механизме образования куперовских пар в FeSe под давлением, что также косвенно подтверждается опубликованными теоретическими данными по расчетам константы электрон-фононной связи при сжатии элементарной ячейки данного соединения [30].

В восьмой главе приведены результаты теоретического исследования взаимосвязи кулоновских корреляционных эффектов со структурными, спектральными и магнитными свойствами соединения FeS в тетрагональной фазе. Выполненная оптимизация параметров кристаллической структуры FeS показала, что при использовании подхода функционала электронной плотности рассчитанная постоянная решетки оказывается меньше, чем в эксперименте, а объемный упругий модуль – существенно больше. При этом согласие рассчитанных величин с экспериментально определенными может быть существенно улучшено в случае применения метода DFT+DMFT, что демонстрирует важность учета

кулоновских корреляций для описания структурных свойств FeS.

Исследование зависимости внутренней энергии от объема элементарной ячейки в рамках метода DFT+DMFT показало, что при расширении ячейки данная кривая имеет излом (Рисунок 14, левые графики) и не может быть описана одним уравнением Бирча-Мурнагана. Указанная особенность поведения внутренней энергии в области больших объемов ячейки сохраняется при оптимизации координаты серы  $z_S$ . По аналогии с выполненным исследованием структурных свойств FeSe, полученное поведение было интерпретировано как изоструктурный фазовый переход, сопровождающийся скачком объема элементарной ячейки.

Для понимания механизма данного перехода были проанализированы зависимости величин перенормировки квазичастичной массы, спектральных и магнитных свойств от объема элементарной ячейки. Было получено, что в точке минимума внутренней энергии как усредненная по  $3d$  орбиталям величина  $m^*/m$ , так и отклонение перенормировок квазичастичных масс отдельных орбиталей от среднего значения в FeS существенно меньше, чем в FeSe. При расширении элементарной ячейки величина  $m^*/m$  сначала демонстрирует плавный рост, который сменяется резким увеличением перенормировки для группы орбиталей, что указывает на орбитальную селективность корреляционных эффектов в фазе большего объема. Проведенные расчеты локальной спиновой восприимчивости подтвердили рост величины и выраженности орбитальной зависимости локальных моментов при увеличении объема элементарной ячейки, что вместе с описанным поведением  $m^*/m$  говорит о доминирующей роли орбиталей определенной симметрии в формировании магнитных свойств фазы большего объема. Конкретная симметрия орбиталей с наибольшей локализацией проявляет сильную чувствительность к значению координаты атома серы ( $xy$ ,  $xz/yz$  для фиксированной  $z_S$  и  $xz/yz$ ,  $3z^2 - r^2$  – для оптимизированной), однако общая тенденция к формированию орбитально-селективных корреляций и связанных с ними локальных моментов не зависит от вариации данного параметра.

Выполненные расчеты показали, что спектральные свойства

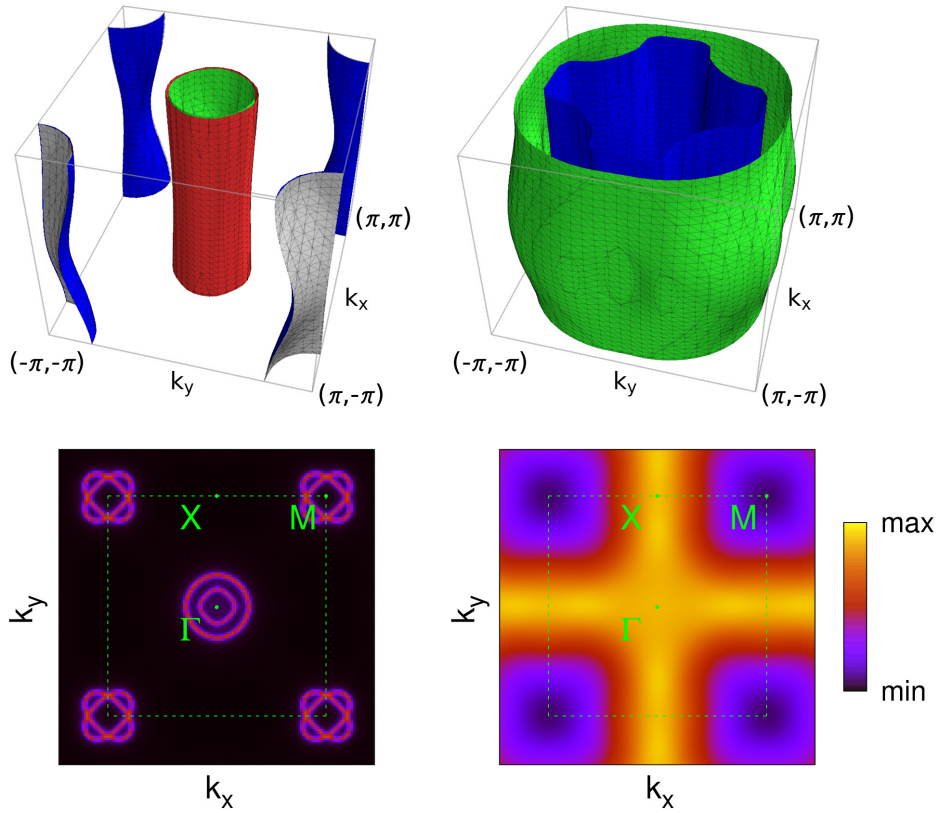


Рисунок 15 – Поверхность Ферми (верхние рисунки) и распределение спектрального веса на уровне Ферми (нижние рисунки) соединения FeS, рассчитанные методом DFT+DMFT для параметров элементарной ячейки  $a = 6.90a_0$  (левый ряд) и  $a = 8.20a_0$  (правый ряд), и температуры  $T = 290$  К. Внутренняя координата атома серы зафиксирована на экспериментально определенном значении  $z_S = 0.252$ ,  $a_0$  соответствует борновскому радиусу.

FeS являются существенно разными для фаз меньшего и большего объема. Для нормального давления в фазе меньшего объема поверхность Ферми и распределение спектрального веса в зоне Бриллюэна качественно совпадают с результатами, полученными ранее для изоструктурного соединения FeSe (Рисунок 15, слева). А именно, несмотря на меньшую величину  $m^*/m$  в FeS при нормальном давлении, учет корреляционных эффектов приводит к заметному масштабному преобразованию спектральных функций (рассчитанных в DFT) в окрестности энергии Ферми. При расширении ячейки в FeS, как и в FeSe, происходит переход Лифшица, который выражается в перераспределении спектрального веса в окрестности энергии Ферми и изменении формы поверхности Ферми в фазе большего объема (Рисунок 15, справа). Характер изменения спектральных функций при фазовом переходе в FeS

Таблица 1 – Вычисленные структурные параметры FeS и FeSe, а также положение особенности Ван Хова в точке  $M$   $E_{\text{VHS}}^{\text{DMFT}}$  (относительно уровня Ферми), соответствующие минимуму внутренней энергии. Расчеты выполнены в рамках зарядово-согласованного метода DFT+DMFT для температуры  $T = 290$  К. В данной таблице  $h_{\text{ch}}$  имеет смысл расстояния от атома халькогена (ch=S, Se) до плоскости атомов железа, измеренное в боровских радиусах  $a_0$ , а  $E_{\text{VHS}}^{\text{GGA}}$  обозначает положение особенности Ван Хова, получаемое в спин-неполяризованном методе GGA.

	$E_{\text{VHS}}^{\text{GGA}}$ (eV)	$E_{\text{VHS}}^{\text{DMFT}}$ (eV)	$z_{\text{ch}}$	$h_{\text{ch}}/a_0$	$c/a$
FeS	-0.35	-0.21	0.247	2.332	1.367
FeSe	-0.25	-0.12	0.261	2.729	1.494

качественно совпадает с таковым в FeSe и заключается в смещении узких пиков, локализованных под уровнем Ферми, в область пустых состояний. Данные пики являются следствием наличия особенности Ван Хова в зонной структуре квазидвумерных соединений, таких как FeS и FeSe. При этом была установлена корреляция между расстоянием от особенности Ван Хова (пика) до уровня Ферми и величиной изменения объема, необходимой для достижения границы фазового перехода (Таблица 1). Это подтверждает выдвинутое ранее автором диссертации предположение об определяющей роли особенности Ван Хова для понимания механизмов изоструктурных переходов, спектральных и магнитных аномалий, происходящих в квазидвумерных соединениях на основе железа при изменении объема элементарной ячейки.

## Основные результаты и выводы

Основные результаты диссертационной работы разделены на две категории. В первую группу можно выделить результаты, носящие достаточно общий характер, и потенциально способные служить основой для объяснения механизмов формирования спектральных и магнитных свойств не только пниктидов и халькогенидов железа, но и других систем с сильными кулоновскими корреляциями:

1. Введено представление о режиме 'промежуточной' силы кулоновских корреляционных эффектов, характеризуемом сосуществованием значительных перенормировок эффективной массы квазичастиц и отсутствием переноса спектрального веса в хаббардовские зоны. Показано, что данная ситуация реализуется в исследованных пниктидах и халькогенидах железа.
2. Для систем с узкими пиками плотности состояний в окрестности уровня Ферми предложена микроскопическая модель, объясняющая условия реализации режимов температурного роста и убывания магнитной восприимчивости.

Вторую группу образуют результаты, полученные при объяснении и интерпретации особенностей электронной структуры, поведения магнитных и решеточных свойств характерных представителей основных классов родительских систем ВТСП пниктидов и халькогенидов железа:

3. Впервые показано, что фотоэмиссионные спектры с угловым разрешением основных классов родительских систем ВТСП пниктидов и халькогенидов железа количественно верно описываются при учете кулоновских корреляционных эффектов в рамках подхода DFT+DMFT.
4. Продемонстрировано, что экспериментально наблюдаемый слабый нестинг поверхности Ферми в  $\text{LiFeAs}$  формируется благодаря сильному кулоновскому взаимодействию в  $3d$  оболочке железа и объясняется выраженной орбитальной селективностью корреляционных эффектов.
5. Произведено теоретическое исследование влияния легирования на спектральные и магнитные свойства серии систем  $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ . Показано, что переход металл-диэлектрик при  $x = 0.5$  объясняется сильным локальным кулоновским взаимодействием в  $3d$  оболочке.

6. Впервые показано, что температурный рост магнитной восприимчивости в соединениях  $\text{LaFeAsO}$  и  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  является следствием термического возбуждения состояний, формирующих узкие пики спектральной функции под уровнем Ферми, и может быть описан в рамках подхода DFT+DMFT.
7. Установлено, что корреляционные эффекты в  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  оказывают большее влияние на спектральные свойства и демонстрируют большую орбитальную селективность по сравнению с соединениями  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  и  $\text{LaFeAsO}$ . Показано, что отличия температурной зависимости магнитной восприимчивости  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  от других представителей пниктидов железа объясняются большей перенормировкой зонной структуры в окрестности энергии Ферми.
8. Показано, что учет локальных кулоновских корреляционных эффектов между  $3d$  электронами в халькогенидах  $\text{FeSe}$  и  $\text{FeS}$  позволяет получить корректные значения структурных параметров при нормальном и повышенном давлении.
9. Предсказано аномальное поведение решеточных, спектральных и магнитных свойств систем  $\text{FeSe}$  и  $\text{FeS}$  при расширении элементарной ячейки. Показано, что увеличение объема ячейки приводит к переходу Лифшица, перестройке симметрии спиновых флуктуаций и усилению орбитальной селективности корреляционных эффектов.

### Публикации автора по теме диссертации

- [A1] Skornyakov, S. L. Orbital-selective coherence-incoherence crossover and metal-insulator transition in Cu-doped  $\text{NaFeAs}$  [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, I. Leonov // Phys. Rev. B. — 2021. — Vol. 103. — P. 155115(8).
- [A2] Effect of electronic correlations on the spectral and magnetic properties of  $\text{ZrZn}_2$  [Text] / S. L. Skornyakov, V. S. Protsenko,



- V. I. Anisimov, A. A. Katanin // Phys. Rev. B. — 2020. — Vol. 102. — P. 085101(12).
- [A3] Leonov, I. Lifshitz transition and frustration of magnetic moments in infinite-layer NdNiO<sub>2</sub> upon hole doping [Text] / I. Leonov, S. L. Skornyakov, S. Y. Savrasov // Phys. Rev. B. — 2020. — Vol. 101. — P. 241108(5).
- [A4] Dynamical Mean-Field Theory for Correlated Electron Materials [Text] / D. Vollhardt, V. I. Anisimov, S. L. Skornyakov, I. Leonov // Materials Today: Proceedings. — 2019. — Vol. 14. — P. 176–180.
- [A5] Skornyakov, S. L. Correlated electronic structure, orbital-dependent correlations, and Lifshitz transition in tetragonal FeS [Text] / S. L. Skornyakov, I. V. Leonov // Phys. Rev. B. — 2019. — Vol. 100. — P. 235123(13).
- [A6] Correlation strength, Lifshitz transition, and the emergence of a two-dimensional to three-dimensional crossover in FeSe under pressure [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt, I. Leonov // Phys. Rev. B. — 2018. — Vol. 100. — P. 115165(9).
- [A7] Anisimov, V. I. Electronic Structure and Magnetic Properties of Strongly Correlated Transition Metal Compounds [Text] / V. I. Anisimov, A. V. Lukoyanov, S. L. Skornyakov // Physics of Metals and Metallography. — 2018. — Vol. 119. — P. 1254–1258.
- [A8] Effect of electron correlations on the electronic structure and phase stability of FeSe upon lattice expansion [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt, I. Leonov // Phys. Rev. B. — 2017. — Vol. 96. — P. 035137(10).
- [A9] Skornyakov, S. L. Effect of magnetic order on the phase stability of the parent chalcogenide compound FeSe [Text] / S. L. Skornyakov, I. Leonov, V. I. Anisimov // Письма в ЖЭТФ.— 2016.— Т. 103.— С. 291–297.

- [A10] Skornyakov, S. L. Computation of electronic structure and magnetic properties of strongly correlated materials with LDA+DMFT method [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov // *Phil. Mag.* — 2015. — Vol. 95. — P. 1244–1259.
- [A11] Correlation-Driven Topological Fermi Surface Transition in FeSe [Text] / I. Leonov, S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Vol. 115. — P. 106402(6).
- [A12] Skornyakov, S. L. Effect of correlations and doping on the spin susceptibility of iron pnictides: the case of  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt // *Письма в ЖЭТФ.* — 2014. — Т. 100. — С. 128–133.
- [A13] Correlated band structure of superconducting  $\text{NdFeAsO}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ : dynamical mean-field study [Text] / S. L. Skornyakov, I. R. Shein, A. L. Ivanovskii, V. I. Anisimov // *Письма в ЖЭТФ.* — 2013. — Т. 98. — С. 427–431.
- [A14] Spectral properties of  $\text{LiFeAs}$ : an LDA+DMFT study [Text] / S. L. Skornyakov, D. Y. Novoselov, T. Gurel, V. I. Anisimov // *Письма в ЖЭТФ.* — 2012. — Т. 96. — С. 123–127.
- [A15] Skornyakov, S. L. Microscopic origin of the linear temperature increase of the magnetic susceptibility of  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  [Text] / S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, D. Vollhardt // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Vol. 86. — P. 125124(7).
- [A16] Skornyakov, S. L. Linear-Temperature Dependence of Static Magnetic Susceptibility in  $\text{LaFeAsO}$  from Dynamical Mean-Field Theory [Text] / S. L. Skornyakov, A. A. Katanin, V. I. Anisimov // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Vol. 106. — P. 047007(4).
- [A17] Correlation effects in Ni 3d states of  $\text{LaNiPO}$  [Text] / A. V. Lukoyanov, S. L. Skornyakov, J. A. McLeod, M. Abu-

Samak, R. G. Wilks, E. Z. Kurmaev, A. Moewes, N. A. Skorikov, Yu. A. Izyumov, L. D. Finkelstein, V. I. Anisimov, D. Johrendt // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81. — P. 235121(5).

[A18] LDA+DMFT spectral functions and effective electron mass enhancement in the superconductor LaFePO [Text] / S. L. Skornyakov, N. A. Skorikov, A. V. Lukoyanov, A. O. Shorikov, V. I. Anisimov // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81. — P. 174522(6).

[A19] Classification of the electronic correlation strength in the iron pnictides: The case of the parent compound BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> [Text] / S. L. Skornyakov, A. V. Efremov, N. A. Skorikov, M. A. Korotin, Yu. A. Izyumov, V. I. Anisimov, A. V. Kozhevnikov, D. Vollhardt // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 092501(4).

[A20] Coulomb correlation effects in LaFeAsO: An LDA+DMFT(QMC) study [Text] / A. O. Shorikov, M. A. Korotin, S. V. Streltsov, S. L. Skornyakov, Dm. M. Korotin, V. I. Anisimov // ЖЭТФ.— 2009.— Т. 135.— С. 134–138.

### Список цитируемой литературы

- [1] Paglione, J. High-temperature superconductivity in iron-based materials [Text] / J. Paglione, R. L. Greene // Nat. Phys. — 2010. — Vol. 6. — P. 645–658.
- [2] Si, Q. High-temperature superconductivity in iron pnictides and chalcogenides [Text] / Q. Si, R. Yu, E. Abrahams // Nat. Rev. Mater. — 2016. — Vol. 1. — P. 16017(15).
- [3] Sadovskii, M. V. High-temperature superconductivity in iron-based layered iron compounds [Text] / M. V. Sadovskii // Sov. Phys.—Uspekhi. — 2008. — Vol. 51. — P. 1201–1227.

- [4] Mazin, I. I. Superconductivity gets an iron boost [Text] / I. I. Mazin // Nat. Phys. — 2010. — Vol. 464. — P. 183–186.
- [5] Dynamical mean-field theory within an augmented plane-wave framework: Assessing electronic correlations in the iron pnictide LaFeAsO [Text] / M. Aichhorn, L. Pourovskii, V. Vildosola, M. Ferrero, O. Parcollet, T. Miyake, A. Georges, S. Biermann // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 085101(15).
- [6] Local antiferromagnetic correlations in the iron pnictide superconductors LaFeAsO<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub> and Ca(Fe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>)<sub>2</sub>As<sub>2</sub> as seen via normal-state susceptibility [Text] / R. Klingeler, N. Leps, I. Hellmann, A. Popa, U. Stockert, C. Hess, V. Kataev, H.-J. Grafe, F. Hammerath, G. Lang, S. Wurmehl, G. Behr, L. Harnagea, S. Singh, B. Büchner // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81. — P. 024506(5).
- [7] Anisotropy in the Electrical Resistivity and Susceptibility of Superconducting BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> Single Crystals [Text] / X. F. Wang, T. Wu, G. Wu, H. Chen, Y. L. Xie, J. J. Ying, Y. J. Yan, R. H. Liu, X. H. Chen // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Vol. 102. — P. 117005(4).
- [8] Aichhorn, M. Importance of electronic correlations for structural and magnetic properties of the iron pnictide superconductor LaFeAsO [Text] / M. Aichhorn, L. Pourovskii, A. Georges // Phys. Rev. B. — 2011. — Vol. 84. — P. 054529(7).
- [9] Chubukov, A. Iron-based superconductors, seven years later [Text] / A. Chubukov, P. J. Hirschfeld // Phys. Today. — 2015. — Vol. 68. — P. 46–52.
- [10] First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory [Text] / V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, G. Kotliar // J. Phys.: Condens. Matter. — 1997. — Vol. 9. — P. 7359–7367.

- [11] Realistic investigations of correlated electron systems with LDA + DMFT [Text] / K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller, V. Eyert, N. Blümer, A. K. McMahan, R. T. Scalettar, T. Pruschke, V. I. Anosomov, D. Vollhardt // Phys. Stat. Sol. B. — 2006. — Vol. 243. — P. 2599–2631.
- [12] Hirsch, J. E. Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals [Text] / J. E. Hirsch, R. M. Fye // Phys. Rev. Lett. — 1986. — Vol. 56. — P. 2521–2524.
- [13] Fye, R. M. Monte Carlo study of the symmetric Anderson-impurity model [Text] / R. M. Fye, J. E. Hirsch // Phys. Rev. B. — 1988. — Vol. 38. — P. 433–441.
- [14] Rubtsov, A. N. Continuous-time quantum Monte-Carlo method for fermions [Text] / A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, A. I. Lichtenstein // Phys. Rev. B. — 2005. — Vol. 72. — P. 035122(9).
- [15] Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models [Text] / E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, P. Werner // Rev. Mod. Phys. — 2011. — Vol. 83. — P. 349–404.
- [16] K-Doping Dependence of the Fermi Surface of the Iron-Arsenic  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  Superconductor Using Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy [Text] / C. Liu, G. D. Samolyuk, Y. Lee, N. Ni, T. Kondo, A. F. Santander-Syro, S. L. Bud'ko, J. L. McChesney, E. Rotenberg, T. Valla, A. V. Fedorov, P. C. Canfield, B. N. Harmon, A. Kaminski // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 101. — P. 177005(4).
- [17] Electronic structure of the iron-based superconductor  $\text{LaOFeP}$  [Text] / D. H. Lu, M. Yi, S.-K. Mo, A. S. Erickson, J. Analytis, J.-H. Chu, D. J. Singh, Z. Hussain, T. H. Geballe, I. R. Fisher, Z.-X. Shen // Nature. — 2008. — Vol. 455. — P. 81–84.

- [18] Fermi Surface of Superconducting LaFePO Determined from Quantum Oscillations [Text] / A. I. Coldea, J. D. Fletcher, A. Carrington, J. G. Analytis, A. F. Bangura, J.-H. Chu, A. S. Erickson, I. R. Fisher, N. E. Hussey, R. D. McDonald // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 101. — P. 216402(4).
- [19] Superconductivity without Nesting in LiFeAs [Text] / S. V. Borisenko, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, T. K. Kim, I. V. Morozov, A. N. Yaresko, A. A. Kordyuk, G. Behr, A. Vasiliev, R. Follath, B. Büchner // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Vol. 105. — P. 067002(4).
- [20] NaFe<sub>0.56</sub>Cu<sub>0.44</sub>As: A Pnictide Insulating Phase Induced by On-Site Coulomb Interaction [Text] / C. E. Matt, N. Xu, B. Lv, J. Ma, F. Bisti, J. Park, T. Shang, C. Cao, Yu Song, A. H. Nevidomskyy, P. Dai, L. Patthey, N. C. Plumb, M. Radovic, J. Mesot, M. Shi // Phys. Rev. Lett. — 2016. — Vol. 117. — P. 097001(6).
- [21] Effect of Pnictogen Height on Spin Waves in Iron Pnictides [Text] / C. Zhang, L. W. Harriger, Z. Yin, W. Lv, M. Wang, G. Tan, Y. Song, D. L. Abernathy, W. Tian, T. Egami, K. Haule, G. Kotliar, P. Dai // Phys. Rev. Lett. — 2014. — Vol. 112. — P. 217202(5).
- [22] Murnaghan, F. D. The Compressibility of Media under Extreme Pressures [Text] / F. D. Murnaghan // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. — 1944. — Vol. 30. — P. 244–247.
- [23] Birch, F. Finite Elastic Strain of Cubic Crystals [Text] / F. Birch // Phys. Rev. — 1947. — Vol. 71. — P. 809–824.
- [24] Experimental observation of incoherent-coherent crossover and orbital-dependent band renormalization in iron chalcogenide superconductors [Text] / Z. K. Liu, Y. Zhang M. Yi, J. Hu, R. Yu, J.-X. Zhu, R.-H. He, Y. L. Chen, M. Hashimoto, R. G. Moore, S.-K. Mo, Z. Hussain, Q. Si, Z. Q. Mao, D. H. Lu, Z.-X. Shen // Phys. Rev. B. — 2015. — Vol. 92. — P. 235138(7).

- [25] Tunable  $(\delta\pi, \delta\pi)$ -Type Antiferromagnetic Order in  $\alpha$ -Fe(Te,Se) Superconductors [Text] / W. Bao, Y. Qiu, Q. Huang, M. A. Green, P. Zajdel, M. R. Fitzsimmons, M. Zhernenkov, S. Chang, M. Fang, B. Qian, E. K. Vehstedt, J. Yang, H. M. Pham, L. Spinu, Z. Q. Mao // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Vol. 102. — P. 247001(4).
- [26] Crystal structure of the new FeSe<sub>1-x</sub> superconductor [Text] / S. Margadonna, Y. Takabayashi, M. T. McDonald, K. Kasperkiewicz, Y. Mizuguchi, Y. Takano, A. N. Fitch, E. Suard, K. Prassides // Chem. Commun. (Cambridge). — 2008. — Vol. 43. — P. 5607–6509.
- [27] Crystal and Electronic Structure of FeSe at High Pressure and Low Temperature [Text] / R. S. Kumar, Y. Zhang, S. Sinogeikin, Y. Xiao, S. Kumar, P. Chow, A. L. Cornelius, C. Chen // J. Phys. Chem. — 2010. — Vol. 114. — P. 12597–12606.
- [28] Pressure evolution of the low-temperature crystal structure and bonding of the superconductor FeSe ( $T_c=37$  K) [Text] / S. Margadonna, Y. Takabayashi, Y. Ohishi, Y. Mizuguchi, Y. Takano, T. Kagayama, T. Nakagawa, M. Takata, K. Prassides // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 064506(6).
- [29] Electronic structure of FeS [Text] / J. Miao, X. H. Niu, D. F. Xu, Q. Yao, Q. Y. Chen, T. P. Ying, S. Y. Li, Y. F. Fang, J. C. Zhang, S. Ideta, K. Tanaka, B. P. Xie, D. L. Feng, Fei Chen // Phys. Rev. B. — 2017. — Vol. 95. — P. 205127(6).
- [30] Phonon anomalies in FeS [Text] / A. Baum, A. Milosavljević, N. Lazarević, M. M. Radonjić, B. Nikolić, M. Mitschek, Z. I. Maranloo, M. Šćepanović, M. Grujić-Brojčin, N. Stojilović, M. Opel, A. Wang, C. Petrović, Z. V. Popović, R. Hackl // Phys. Rev. B. — 2018. — Vol. 97. — P. 054306(11).

---

Отпечатано на Ризографе ИФМ УрО РАН. Тираж 100 экз. Заказ № 13  
объем 1,8 печ.л. формат 60×84 1/16  
620108, г. Екатеринбург, ул С. Ковалевской, 18