

Obliczenia *ab initio* struktury elektronowej
nadprzewodników zawierających atomy żelazowców

grant nr 158

dr inż. Maciej Winiarski

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu

Sprawozdanie KDM WCSS 11.02.2014

Praca doktorska: M. Winiarski

„Badanie struktury elektronowej nadprzewodników zawierających atomy żelazowców”

promotor – dr hab. M. Samsel-Czekąła, INTiBS PAN

2012

3 – publikacje
(2 x 35 pkt., 1 x 15)

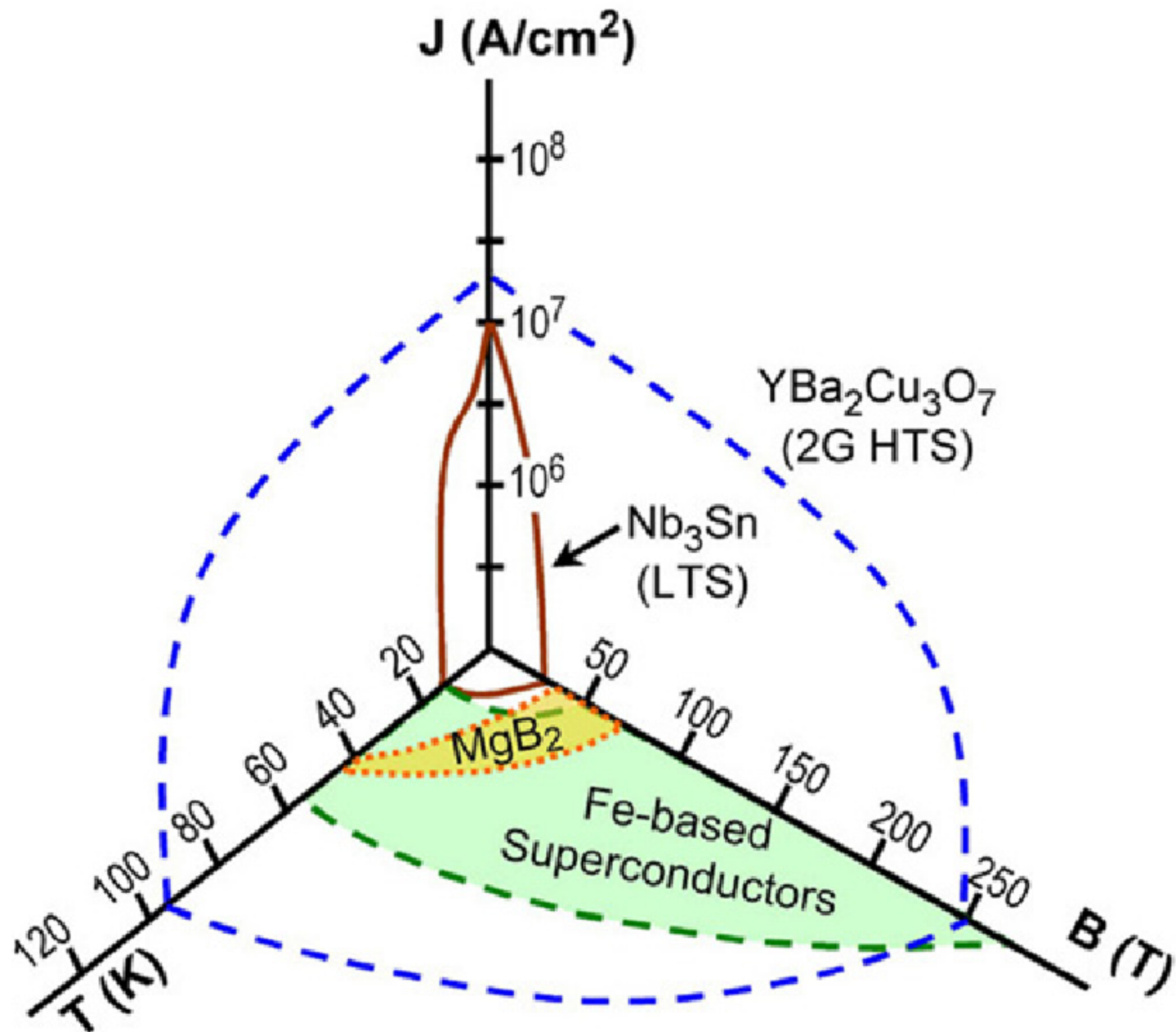
2013

8 – publikacji
(6 x 35 pkt., 1 x 25, 1 konf.)

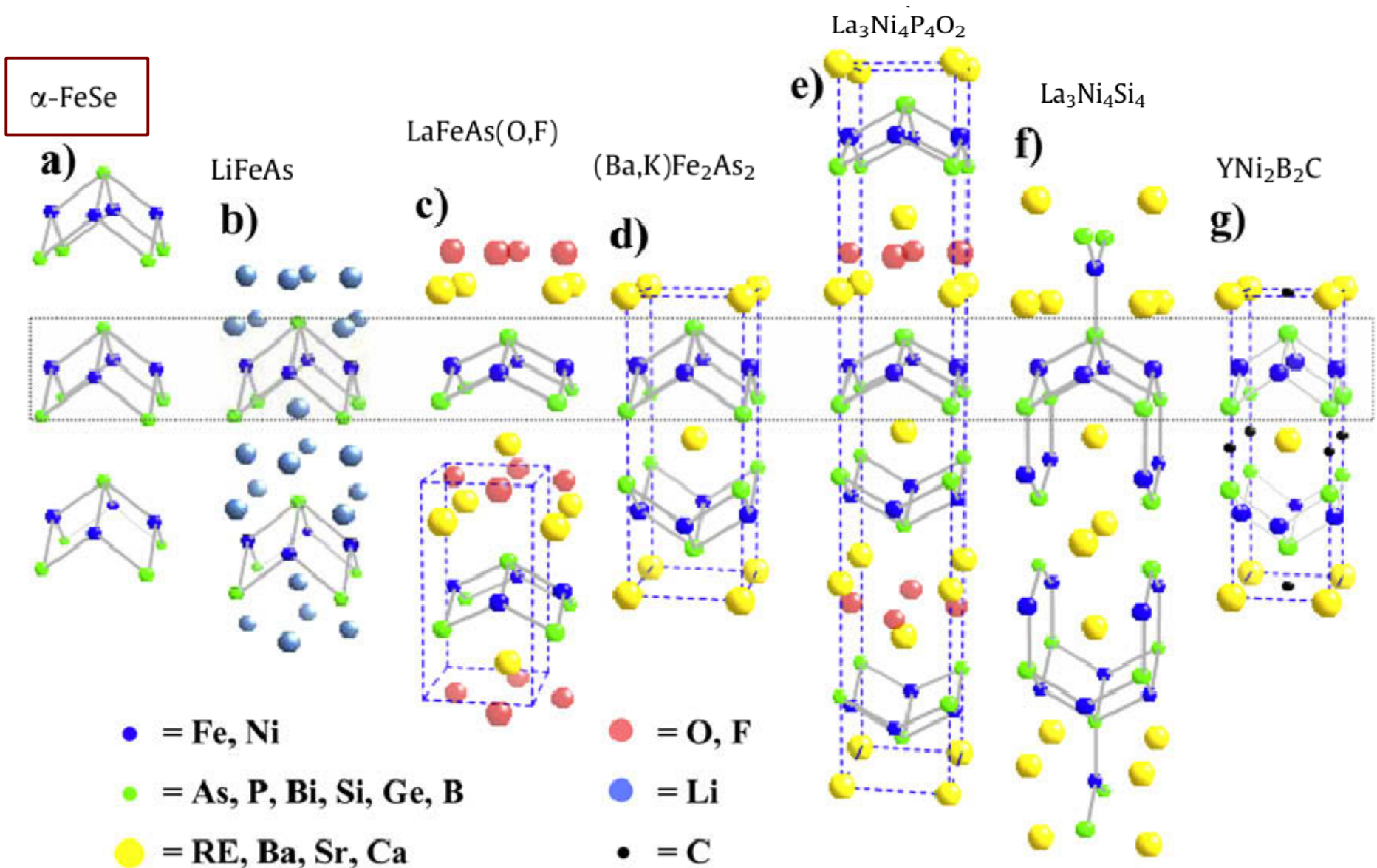
2014

3 – publikacje
(3 x 30 pkt.)

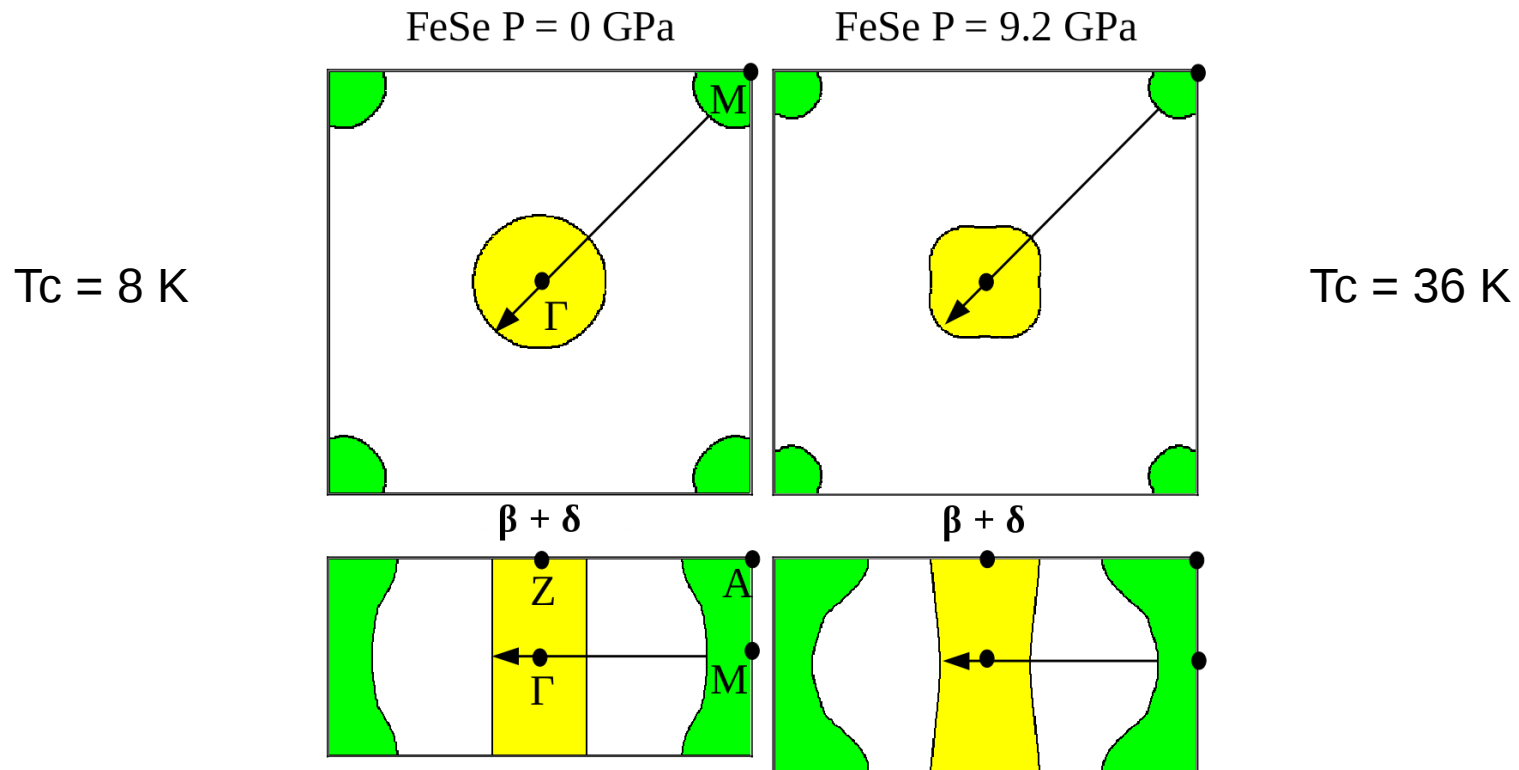
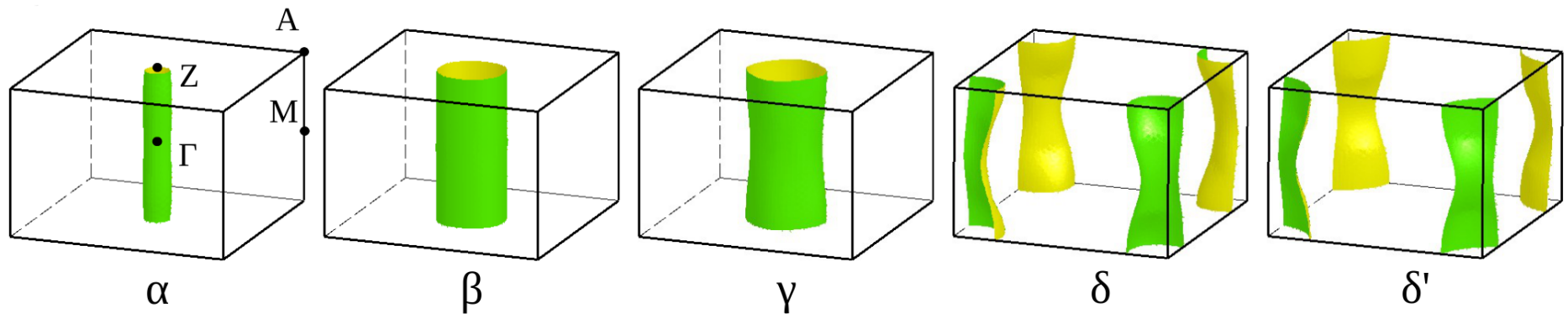
Nadprzewodniki żelazowe.



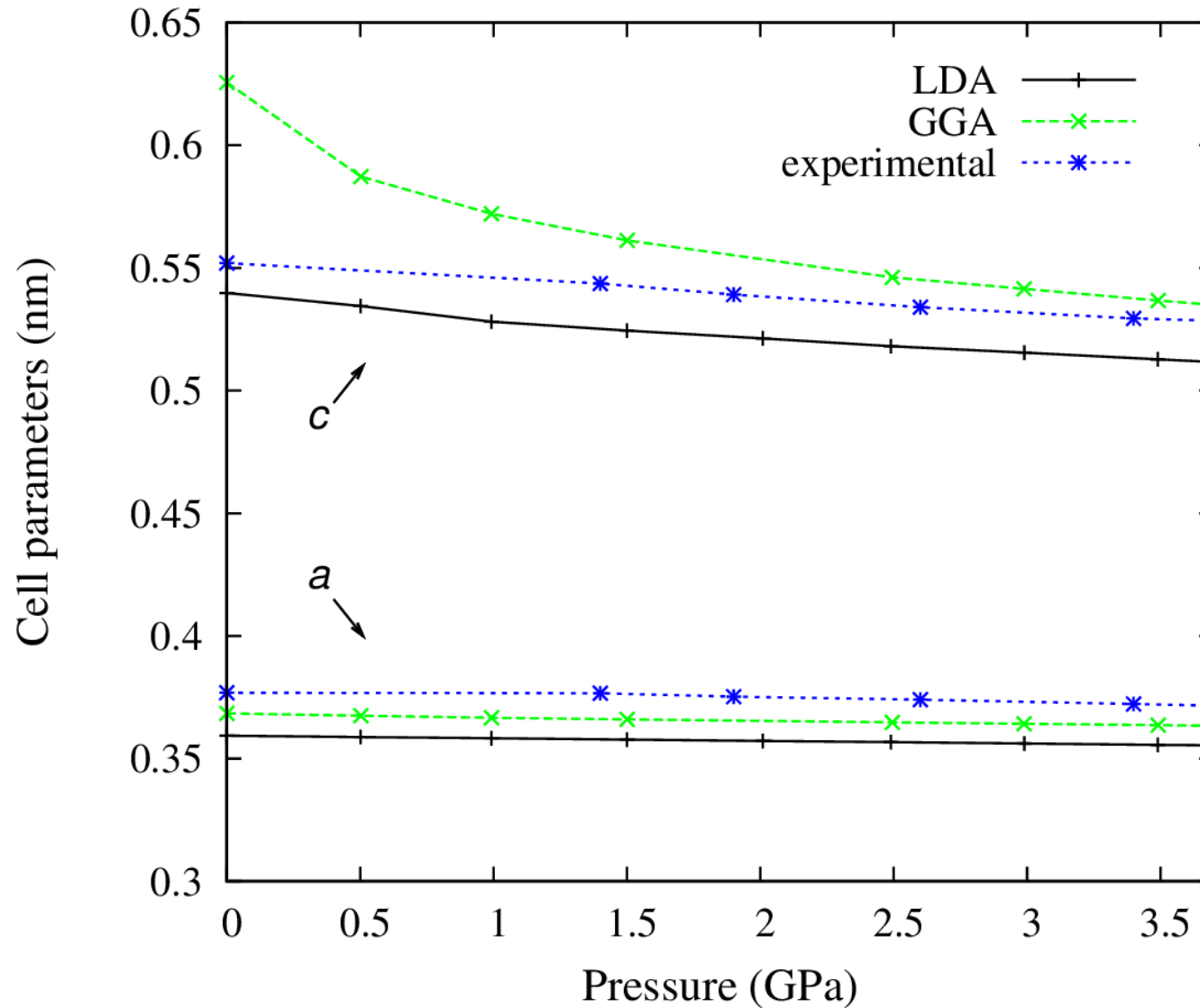
Przegląd nadprzewodników o strukturach typu PbO.



Powierzchnia Fermiego (PF) FeSe. Nesting (π,π).



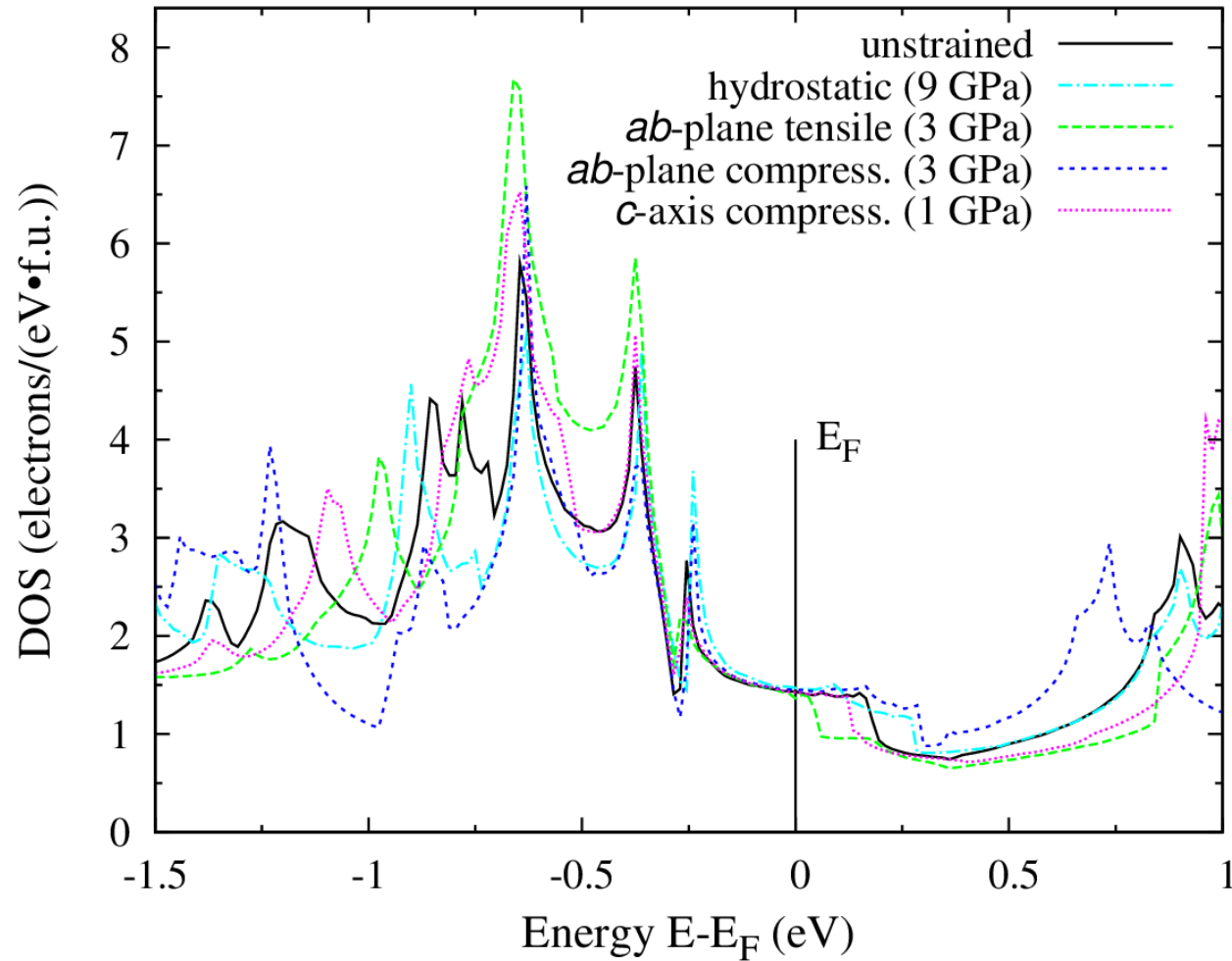
Wpływ naprężeń na strukturę krystaliczną FeSe. Porównanie z danymi eksperymentalnymi *



M.J. Winiarski, M. Samsel-Czekala, A. Ciechan, EPL - Europhys. Lett. 100, 47005 (2012).

* Kumar et al. J. Phys. Chem. B, 114 (2010) 12597.

Wpływ naprężeń na strukturę elektronową FeSe. Gęstości stanów.

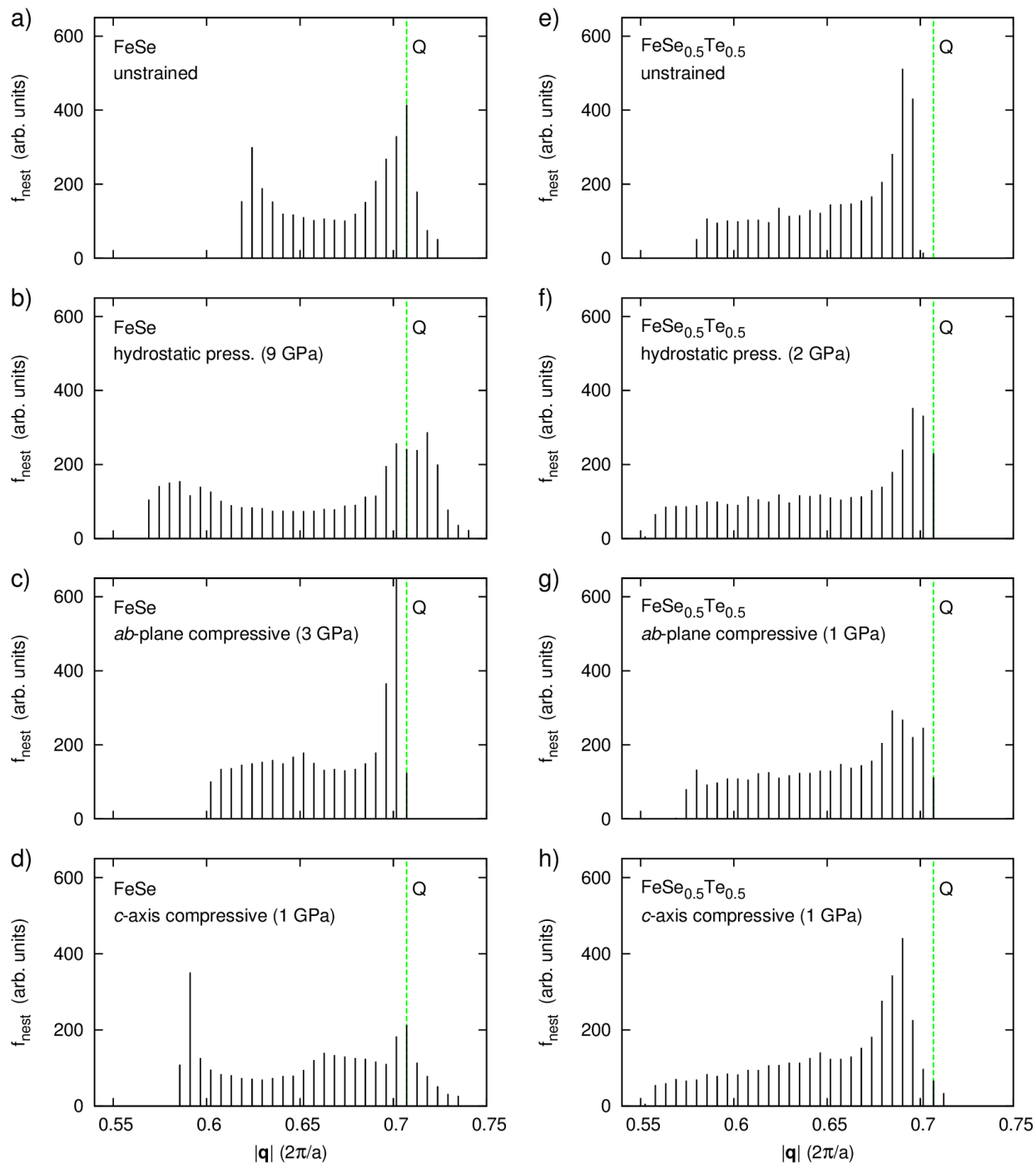


Wpływ odkształceń na PF chalcogenidków żelaza.

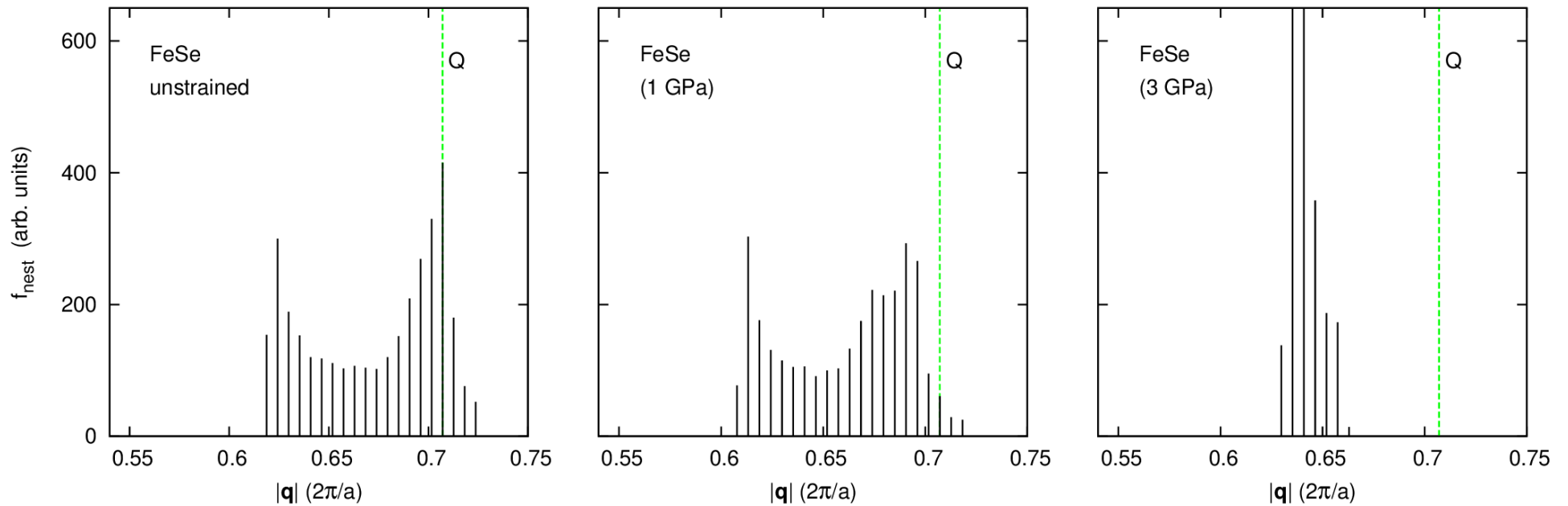
Funkcja nestingu:

$$f_{nest}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}, n, n'} \frac{[1 - F_n^\beta(\mathbf{k})] F_{n'}^\delta(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{|E_n^\beta(\mathbf{k}) - E_{n'}^\delta(\mathbf{k} + \mathbf{q})|},$$

Idealny nesting $Q = (\pi, \pi)$



Wpływ odkształcenia rozciągającego na nesting PF selenku żelaza.

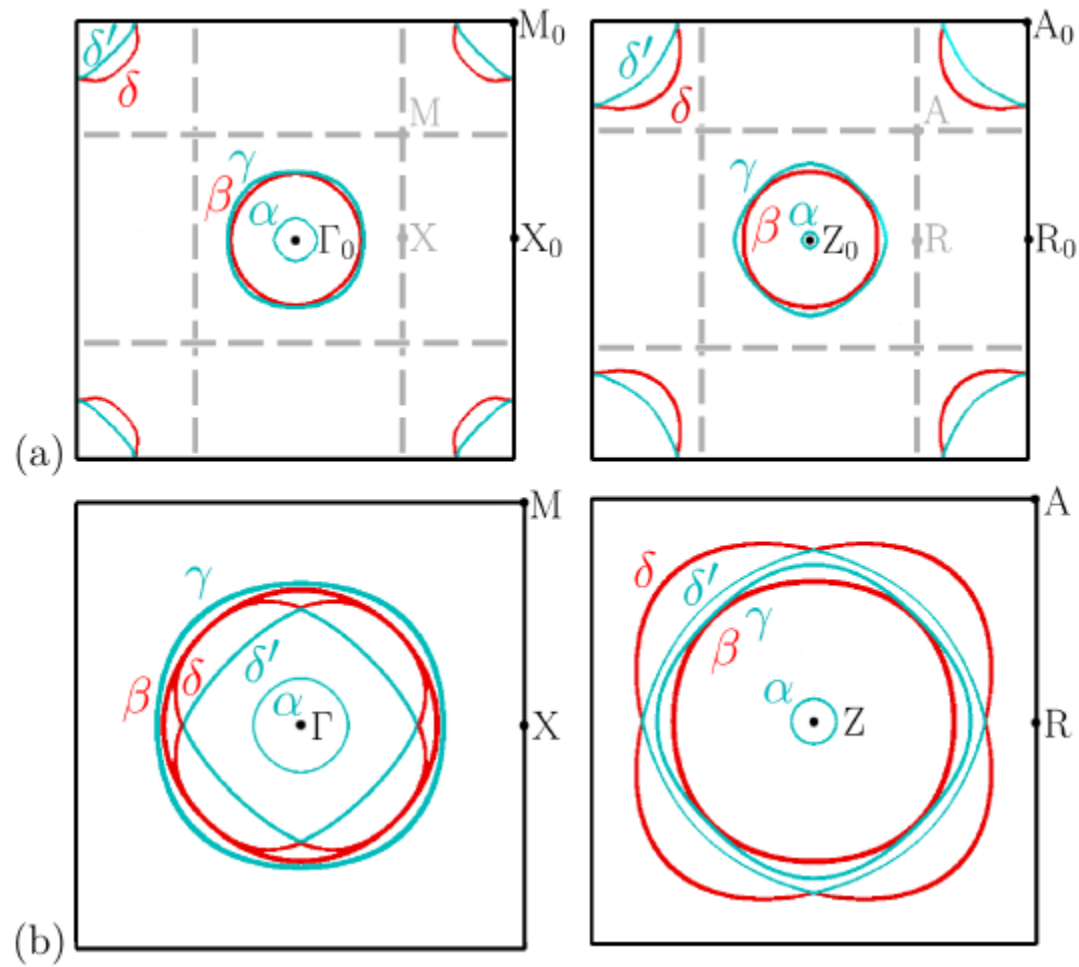


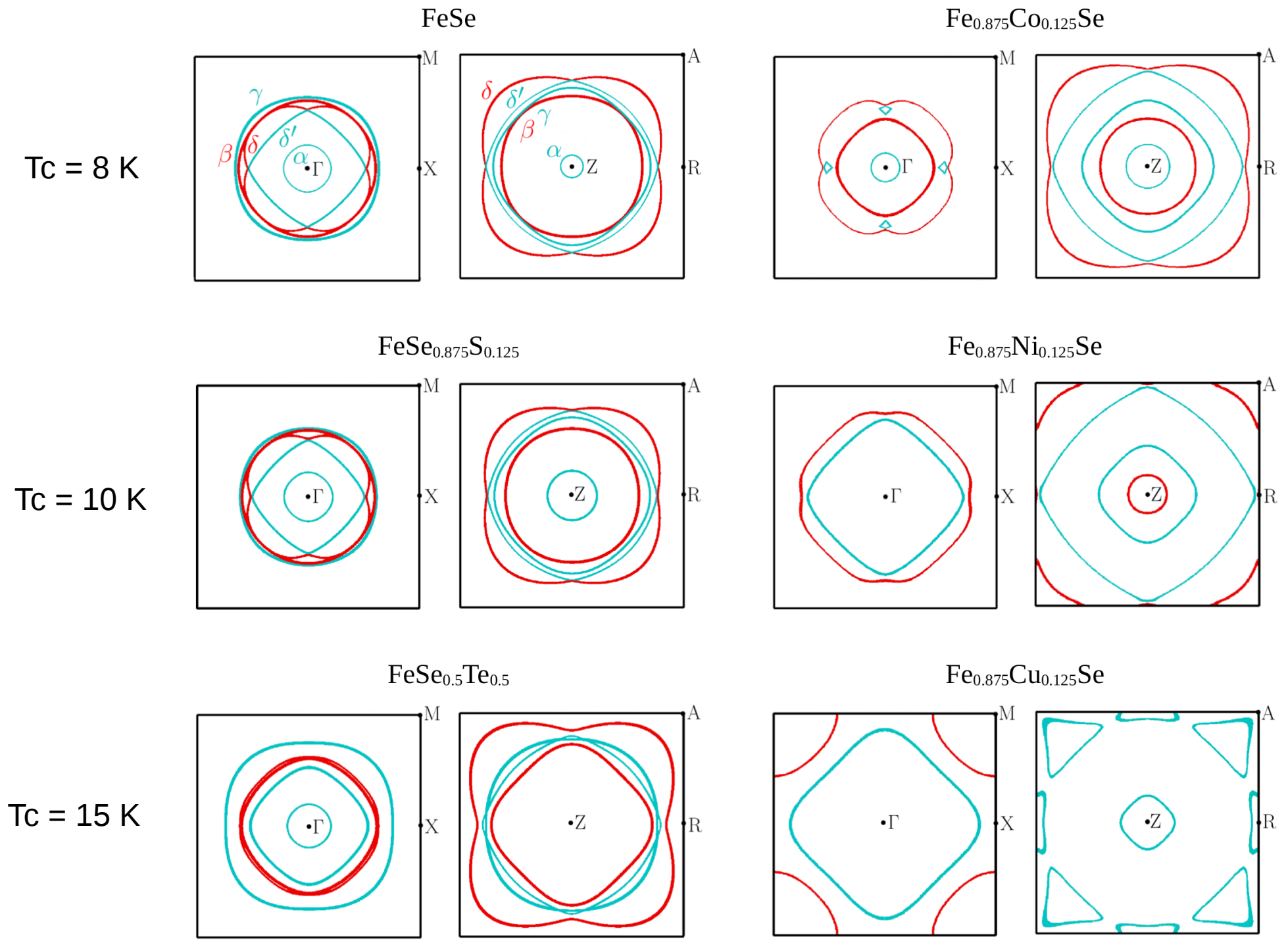
$T_c = 8 \text{ K}$

?

$T_c = 0 \text{ K}$

Nesting (π, π) dla superkomórki.





Dziękuję za uwagę.