

Взаимосвязь сверхпроводимости и магнетизма в соединениях $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$. Эффекты давления

А.С. Панфилов, В.А. Пащенко, Г.Е. Гречнев, В.А. Десненко, А.В. Федорченко,
А.Н. Блудов, С.Л. Гнатченко

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: panfilov@ilt.kharkov.ua*

Д.А. Чареев

Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка, 142432, Россия

Е.С. Митрофанова

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
физический факультет, г. Москва, 119991, Россия*

А.Н. Васильев

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
физический факультет, г. Москва, 119991, Россия;
Уральский федеральный университет, кафедра теоретической физики и прикладной математики
ул. Мира, 19, г. Екатеринбург, 620002, Россия*

Статья поступила в редакцию 16 декабря 2013 г., опубликована онлайн 21 мая 2014 г.

Исследовано влияние всестороннего давления P до 5 кбар на температуру сверхпроводящего перехода T_c системы $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ ($x = 0; 0,85; 0,88$ и $0,90$). Впервые наблюдалась смена знака величины эффекта давления на T_c при переходе от соединения FeSe к сплавам, богатым теллуром, что позволило существенно уточнить вид зависимости барической производной dT_c/dP данной системы от состава. Проведенное сопоставление этой зависимости с результатами расчетов из первых принципов электронной структуры и магнетизма соединений FeSe , FeTe и $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ как функции давления, а также полученными нами ранее экспериментальными данными о влиянии давления на магнитную восприимчивость нормального состояния для FeSe и FeTe свидетельствует о конкурирующем характере взаимосвязи сверхпроводимости и магнетизма в обогащенных теллуром соединениях $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$.

Досліджено вплив всебічного тиску P до 5 кбар на температуру надпровідного переходу T_c системи $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ ($x = 0; 0,85; 0,88$ і $0,90$). Вперше спостерігалась зміна знаку величини ефекту тиску на T_c при переході від сполуки FeSe до сплавів, багатих телуrom, що дозволило суттєво уточнити вигляд залежності баричної похідної dT_c/dP даної системи від складу. Проведене зіставлення цієї залежності з результатами розрахунків з перших принципів електронної структури й магнетизму сполук FeSe , FeTe і $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ як функції тиску, а також отриманими нами раніше експериментальними даними про ефекти тиску на магнітну сприйнятливості нормального стану для FeSe і FeTe свідчить про конкуруючий характер взаємозв'язку надпровідності й магнетизму в збагачених телуrom сполуках $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$.

PACS: 74.62.-с Вариации температуры перехода, фазовые диаграммы;
 74.62.Fj Эффекты давления;
 74.70.Xa Пниктиды и халькогениды;
 75.10.Lp Зонная модель и модель делокализованных электронов.

Ключевые слова: железосодержащие сверхпроводники, $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$, электронная структура, магнитная восприимчивость, эффекты давления.

1. Введение

Для большинства систем недавно открытого класса железосодержащих высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) характерна корреляция между возникновением сверхпроводимости в системе и подавлением магнитоупорядоченного состояния при легировании или воздействии всестороннего давления [1–4]. В связи с этим широко бытует мнение, что в образовании куперовских пар важную роль играют спиновые флуктуации [5–7]. Тем не менее, как показано, например, в работе [8], для многих соединений этого ряда экспериментальные значения температуры сверхпроводящего перехода удовлетворительно описываются в рамках электрон-фононного механизма спаривания. Тесная взаимосвязь магнетизма и сверхпроводимости определяет актуальность дальнейшего изучения магнитных и сверхпроводящих свойств и их эволюции при варьировании состава, давления и т.п. для понимания механизма ВТСП в рассматриваемом новом классе соединений. Один из представителей этого класса — система халькогенидов железа $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ — обладает наиболее простой кристаллической структурой, что благоприятствует экспериментальному и теоретическому изучению ее свойств.

Сверхпроводящие свойства $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ характеризуются немонотонной зависимостью температуры перехода T_c от состава: заметным ростом от $T_c = 8$ К для $x = 0$ до максимального значения ~ 15 К при $x \sim 0,5$ с последующим падением до 0 К вблизи $x \sim 0,9$ (см., например, обзор [9] и ссылки в нем). Кроме того, в соединении FeSe имеет место существенный рост T_c до 35–37 К при давлениях $P \sim 70$ –80 кбар [10,11]. Аналогичное поведение T_c под давлением наблюдалось и в соединении $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ [12,13]. С дальнейшим ростом x в системе $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ положительная величина эффекта давления обнаруживает тенденцию к уменьшению и, по-видимому, даже меняет свой знак, как это наблюдается в богатом теллуром родственном сплаве $\text{FeS}_{0,2}\text{Te}_{0,8}$ [9]. Эта предполагаемая смена знака эффекта давления на T_c с ростом содержания теллура, вероятно, и объясняет причину неудачных попыток наблюдения сверхпроводимости в FeTe под давлением вплоть до 190 кбар [14,15].

Магнитные свойства системы $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ исследовались во многих работах [16–24], однако данные о магнитной восприимчивости нормального состояния остаются неполными и количественно противоречи-

выми. Последнее обусловлено не только различным качеством используемых образцов, но и наличием в них примесей железа и его вторичных магнитных фаз, которые заметно маскируют собственную магнитную восприимчивость и требуют тщательного учета [22]. Наиболее адекватные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что по мере замещения Se на Te восприимчивость соединений монотонно увеличивается и ее значение в FeTe примерно на порядок выше, чем в FeSe. Более того, соединение FeTe становится магнитно-неустойчивым и в нем наблюдается антиферромагнитное упорядочение при температуре примерно 70 К (см., например, [17]).

Следует отметить, что наибольший рост магнитной восприимчивости нормального состояния, $\chi(x)$, с увеличением x наблюдается в соединениях, богатых теллуром, где, в свою очередь, зависимость $T_c(x)$ круто падает, и соединение FeTe уже не является сверхпроводником при нормальных условиях. Этот факт позволяет предположить, что взаимосвязь магнетизма и сверхпроводимости, по крайней мере для этой области составов, носит конкурирующий характер. Для дальнейшего изучения этой взаимосвязи в семействе $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ представляет несомненный интерес рассмотреть корреляцию сверхпроводимости и магнетизма в условиях высоких давлений. С этой целью в данной работе проведено исследование влияния гидростатического давления на температуру сверхпроводящего перехода в богатых теллуром соединениях. Полученные экспериментальные результаты сопоставляются с данными о поведении под давлением магнитной восприимчивости базовых соединений FeSe [25] и FeTe [14,26], дополненными расчетной зависимостью от давления электронной структуры и магнитной восприимчивости соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$.

2. Детали эксперимента и результаты

Монокристаллические образцы сверхпроводника $\text{FeSe}_{0,96}$ (в дальнейшем FeSe) выращивались в течение 50 суток описанным в работе [27] методом в вакуумированных ампулах из кварцевого стекла, заполненных расплавом смеси солей AlCl_3/KCl , в условиях постоянного температурного градиента. Температура горячего конца ампулы, содержащего шихту исходного состава, составляла 427 °С, а более холодный ее конец, где росли кристаллы, поддерживался при температуре примерно 380 °С. Аналогичным способом была синтези-

рована серия обогащенных теллуром сверхпроводящих монокристаллов $\text{Fe}_{1+\delta}\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x$ ($\delta \sim 0,05$, $x = 0,85$; $0,88$ и $0,90$). При этом использовалась смесь солей KCl/NaCl , а температуры горячего и холодного концов ампулы составляли 750 и примерно 700 °C соответственно. Синтез продолжался 20 – 25 суток. Выращенные пластинчатоподобные монокристаллы имели типичные размеры $(1-3) \times (1-3) \times (0,2-0,3)$ мм. Тетрагональная кристаллическая структура образцов $P4/nmm$ определялась при комнатной температуре методом рентгеновской дифракции, а их состав тестировался с помощью рентгенофлуоресцентного микроанализа (Cameca SX-100) с точностью определения отношения компонент не хуже 2% (детали аттестации образцов см. в [24,27]).

Магнитные свойства исследовались с помощью SQUID-магнитометра (MPMS-XL5 Quantum Design), снабженного миниатюрной камерой высокого давления типа цилиндр–поршень (аналогичной использованной в работе [28]), изготовленной из немагнитного сплава CuBe и имеющей внутренний и внешний диаметры $1,6$ и 5 мм соответственно. В качестве передающей давление среды применялась полиэтилсилоксановая жидкость марки ПЭС-3 (температура застывания 164 К). Величина давления при низких температурах определялась по известной зависимости от давления температуры сверхпроводящего перехода образца из чистого олова [29], расположенного внутри камеры вблизи измеряемого образца. Соответствующая погрешность не превышала $0,2$ кбар.

На рис. 1 приведены температурные зависимости магнитного момента $M(T)$ для FeSe при различных значениях давления, измеренные в режиме охлаждения образца в нулевом магнитном поле (ZFC) с последующим его нагреванием в поле $H = 10$ Э. Вытекающая из них зависимость от давления температуры сверхпро-

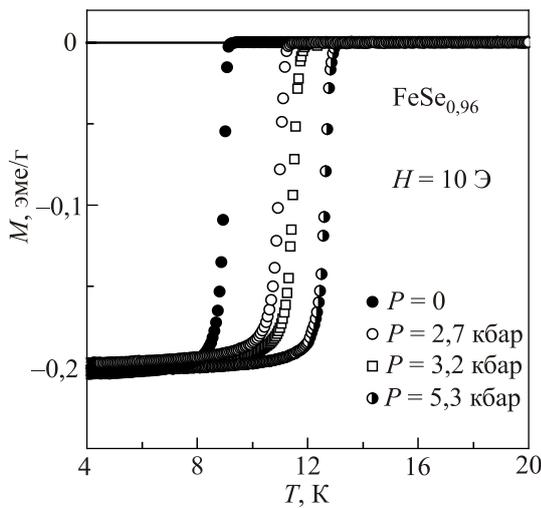


Рис. 1. Температурные зависимости магнитного момента соединения FeSe , измеренные в магнитном поле $H = 10$ Э при разных давлениях.

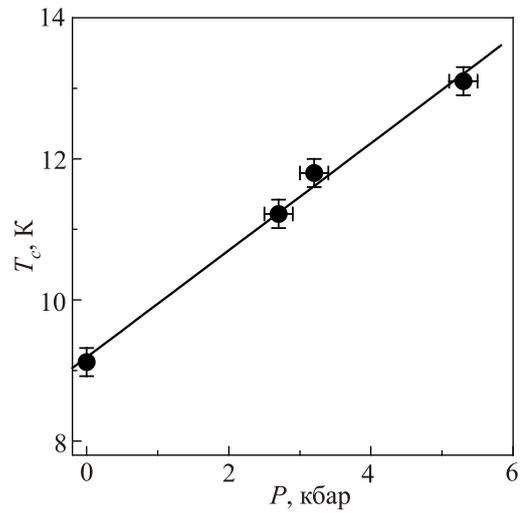


Рис. 2. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода соединения FeSe от давления.

водящего перехода T_c , определяемой здесь и в дальнейшем по его началу, представлена на рис. 2. В пределах экспериментальных погрешностей и используемого в работе интервала давлений эта зависимость оказывается близкой к линейной и позволяет определить барическую производную dT_c/dP .

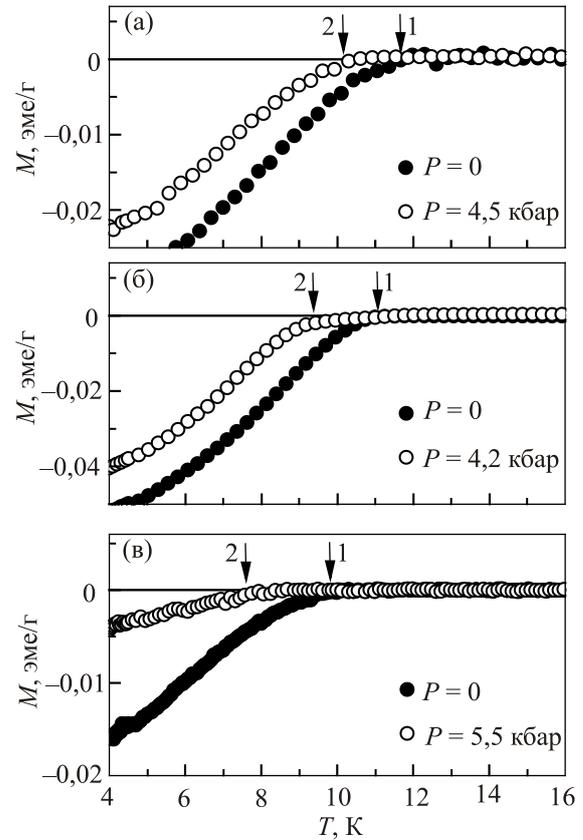


Рис. 3. Температурные зависимости магнитного момента в поле $H = 10$ Э при двух давлениях для соединений $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$: $x = 0,85$ (а), $0,88$ (б), $0,9$ (в). Стрелками 1 и 2 отмечены T_c при нулевом и конечном давлениях соответственно.

На рис. 3 показаны зависимости $M(T)$, измеренные в ZFC режиме при разных давлениях, для обогащенных теллуром соединений $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$, которые демонстрируют явно выраженный отрицательный эффект давления на температуру сверхпроводящего перехода. Экспериментальные значения T_c и ее производной по давлению для всех исследованных сплавов представлены в табл. 1. Как видно из приведенных данных, масштаб эффекта давления в обогащенных теллуром сплавах $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ сопоставим с таковым для FeSe , однако имеет противоположный ему знак.

Таблица 1. Температура сверхпроводящего перехода T_c и ее производная dT_c/dP для сплавов $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$

Состав	T_c , К	dT_c/dP , К/кбар
$x = 0$	9,12	$0,78 \pm 0,05$
$x = 0,85$	11,62	$-0,31 \pm 0,05$
$x = 0,88$	11,05	$-0,40 \pm 0,05$
$x = 0,90$	9,71	$-0,40 \pm 0,1$

3. Расчет электронной структуры и парамагнитной восприимчивости соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$

Для расчета электронной структуры соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ использован метод LMTO с полным потенциалом (FP-LMTO, реализация RSPT [30,31]). Обменно-корреляционный потенциал учитывался в рамках приближения локальной электронной плотности (LDA) [32] теории функционала плотности (DFT). Расчеты проводились для сверхъячейки $2 \times 2 \times 1$, построенной путем двукратных трансляций элементарной ячейки упорядоченной тетрагональной фазы соединений FeSe и FeTe вдоль кристаллографических направлений [100] и [010], с использованием экспериментальных значений параметров кристаллической решетки $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ (см. [33–35]). На рис. 4 представлена рассчитанная плотность электронных состояний $N(E)$ соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ в парамагнитной фазе. Ее характерная особенность — расположение уровня Ферми E_F на участке кривой $N(E)$, близком по виду к локальному плато и определяемом преимущественно d -состояниями железа. Такая специфика положения E_F предполагает слабую зависимость спиновой восприимчивости в $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ от температуры, что согласуется с имеющимися экспериментальными данными для этого соединения [16,22,23].

В данной работе были также проведены расчеты электронной структуры $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ в парамагнитной фазе во внешнем магнитном поле \mathbf{B} . При этом влияние поля учитывалось самосогласованным образом [31] в рамках локального приближения спиновой плотности LSDA путем включения в гамильтониан FP-LMTO оператора Зеемана:

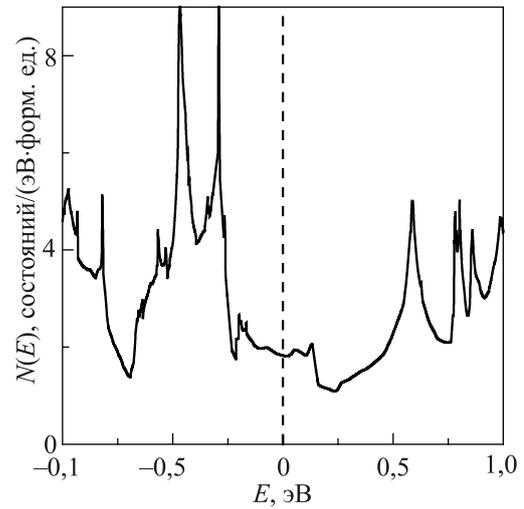


Рис. 4. Плотность электронных состояний $N(E)$ соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ в окрестностях уровня Ферми ($E = 0$), отмеченного вертикальной линией.

$$\mathcal{H}_Z = \mu_B \mathbf{B} \cdot (2\hat{\mathbf{s}} + \hat{\mathbf{l}}), \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{s}}$ — оператор спина, $\hat{\mathbf{l}}$ — оператор орбитального углового момента. Вычисленные во внешнем поле $B = 10$ Тл индуцированные спиновый и орбитальный магнитные моменты позволили получить соответствующие компоненты тензора магнитной восприимчивости, χ_{spin} и χ_{orb} , путем дифференцирования по полю индуцированных намагниченностей.

Согласно результатам проведенных расчетов электронной структуры и магнитной восприимчивости, доминирующим вкладом в восприимчивость соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ является обменно-усиленный спиновый парамагнетизм χ_{spin} . В рамках модели Стонера этот вклад можно представить в виде $\chi_{\text{spin}} = S \mu_B^2 N(E_F)$, где S — фактор Стонера, $N(E_F)$ — плотность состояний на уровне Ферми, μ_B — магнетон Бора. Используя расчетные значения спиновой магнитной восприимчивости $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ по данным индуцированного магнитным полем спинового момента, $\chi_{\text{spin}} \approx 0,6 \cdot 10^{-3}$ эме/моль, и плотности состояний на уровне Ферми, $N(E_F) \approx 1,85$ эВ $^{-1}$, получаем оценку фактора Стонера: $S \approx 10$. Отметим, что приведенное выше расчетное значение χ_{spin} удовлетворительно согласуется с экспериментальной магнитной восприимчивостью $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ в нормальном состоянии [16,23]. Это подтверждает доминирующую роль спинового вклада в магнетизме рассматриваемого соединения, что, по-видимому, характерно для всего семейства $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ в целом [23,25,26].

С использованием экспериментальных данных [35] об изменении параметров решетки $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ под воздействием всестороннего сжатия в настоящей работе рассчитано поведение под давлением плотности электронных состояний на уровне Ферми. Для области

малых давлений (0–10 кбар) нами установлен рост $N(E_F)$ со значением барической производной $d \ln N(E_F)/dP \approx 1 \text{ Мбар}^{-1}$. Отметим, что такое поведение $N(E_F)$ коррелирует с возрастанием под давлением температуры сверхпроводящего перехода в $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ [12,13].

В рамках рассмотренного выше метода расчета магнитной восприимчивости нами исследована также ее зависимость от всестороннего давления в системе $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$. Путем прямого вычисления индуцированного внешним полем магнитного момента получено значение барической производной магнитной восприимчивости, $d \ln \chi/dP \approx 13 \text{ Мбар}^{-1}$, близкое к аналогичным значениям в FeSe и FeTe (см. табл. 2).

Таблица 2. Производная магнитной восприимчивости по давлению, $d \ln \chi/dP$, для соединений семейства $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ (в скобках приведена температура эксперимента, результаты расчета соответствуют $T = 0 \text{ К}$). Данные для FeTe относятся к парамагнитному состоянию

Соединение	$d \ln \chi/dP$, Мбар^{-1}	
	Эксперимент	Теория
FeSe	$10 \pm 3 (78 \text{ К})^a$ $\sim 9 (20 \text{ К})^b$	$\approx 8^a$
$\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$	–	≈ 13
FeTe	$23 \pm 1,5 (78 \text{ К})^c$ $\approx 21 (78 \text{ К})^d$	$\approx 20^c$

Примечание: ^a из работы [25], ^b по данным ЯМР (сдвиг Найта) из работы [39], ^c из работы [26], ^d по данным измерений намагниченности из работы [14].

Для выяснения механизма сильного увеличения магнитной восприимчивости $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ под давлением проведен анализ влияния на восприимчивость объема элементарной ячейки V и внутреннего структурного параметра Z , определяющего относительную высоту атомов халькогена над плоскостью атомов железа. Соответствующий эффект давления на χ может быть представлен в виде

$$\frac{d \ln \chi}{dP} = \frac{\partial \ln \chi}{\partial \ln V} \frac{d \ln V}{dP} + \frac{\partial \ln \chi}{\partial Z} \frac{dZ}{dP}. \quad (2)$$

Путем небольших вариаций объема ячейки V и структурного параметра Z вблизи их экспериментальных значений вычислены следующие частные производные парамагнитной восприимчивости $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$: $\partial \ln \chi/\partial \ln V \approx 10$ и $\partial \ln \chi/\partial Z \approx 90$. Эти значения вместе с экспериментальными значениями сжимаемости, $d \ln V/dP \approx -3,1 \text{ Мбар}^{-1}$, и производной по давлению параметра Z , $d \ln Z/dP \approx 49 \text{ Мбар}^{-1}$, вытекающими из данных работы [35], определяют, согласно (2), величину соответствующих вкладов в полный эффект давления: $(\partial \ln \chi/\partial \ln V)(d \ln V/dP) \approx -31 \text{ Мбар}^{-1}$ и $(\partial \ln \chi/\partial Z)(dZ/dP) \approx +44 \text{ Мбар}^{-1}$. Полученные оценки

свидетельствуют о том, что рассчитанный в данной работе большой положительный эффект давления на восприимчивость $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ определяется доминирующим положительным вкладом, обусловленным сильной чувствительностью восприимчивости к значению внутреннего структурного параметра Z и характером его изменения под давлением.

4. Обсуждение результатов

Экспериментальные значения температуры сверхпроводящего перехода для исследованных в работе соединений разумно согласуются с известными литературными данными (см. рис. 5(a)).

Наиболее изученная область составов ($x \geq 0,4$) характеризуется резким уменьшением T_c с ростом x при $x \geq 0,7$ и полным исчезновением сверхпроводимости для $x \rightarrow 1$. В этой же области составов наблюдается сильный рост магнитной восприимчивости нормального состояния (рис. 5(б)). Наблюдаемые строго противоположные тенденции поведения сверхпроводимости и магнетизма в зависимости от состава системы $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ позволяют предполагать, что взаимосвязь этих явлений имеет конкурирующий характер, по крайней мере в обогащенных теллуром соединениях.

Рассмотрим эволюцию сверхпроводящих и магнитных свойств семейства соединений $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ в условиях всестороннего давления. На рис. 6(a) приведены

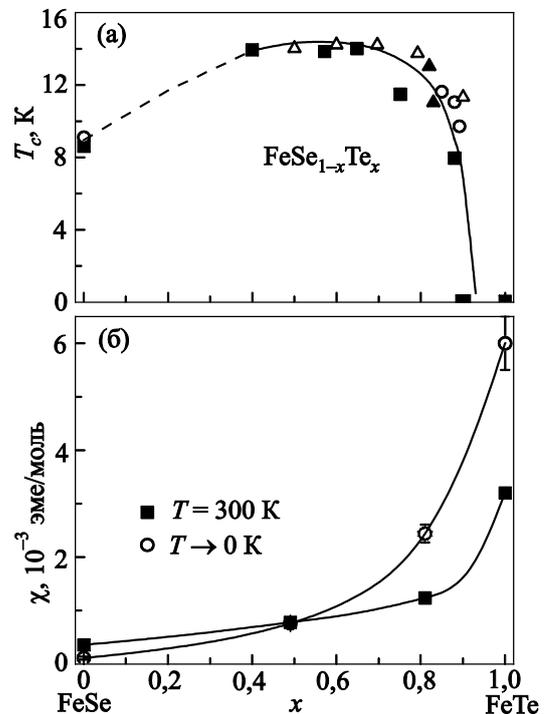


Рис. 5. Зависимости от содержания Te в соединениях $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ (а) температуры сверхпроводящего перехода (из работ: ■ — [9], △ — [20], ▲ — [36], ○ — данная работа) и (б) магнитной восприимчивости нормального состояния при $T \rightarrow 0 \text{ К}$ и $T = 300 \text{ К}$ из работы [23].

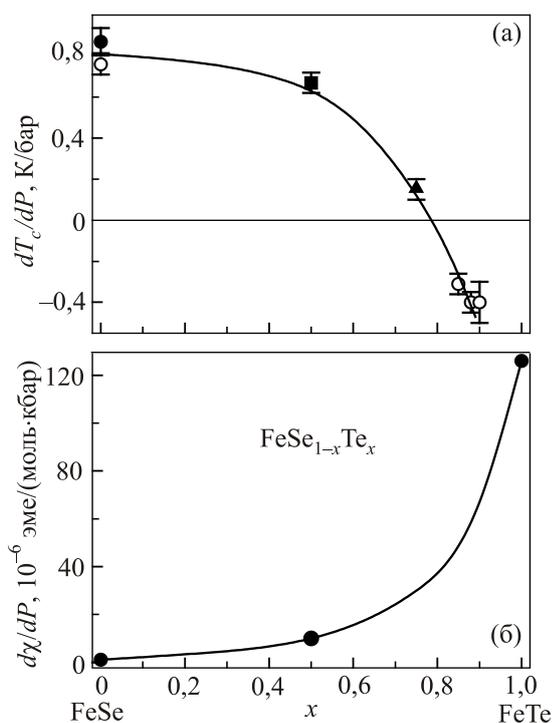


Рис. 6. (а) Величина производной dT_c/dP в зависимости от состава для соединений $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ (○ — данная работа; ● — [37]; ■ — [13]; ▲ — [38]). (б) Зависимость от состава производной по давлению для магнитной восприимчивости нормального состояния (см. детали в тексте).

экспериментальные значения производной температуры сверхпроводящего перехода по давлению, которые включают известные литературные данные и полученные нами результаты. Как видно, имеющаяся совокупность данных описывает монотонное уменьшение величины эффекта давления на T_c по мере замещения селена теллуrom и смену его знака при $x \sim 0,8$. С такой зависимостью практически согласуется и значение $dT_c/dP \approx -0,25$ К/кбар для родственного соединения $\text{FeS}_{0,2}\text{Te}_{0,8}$ [9].

В отличие от знакопеременного характера величины эффекта давления на T_c как функции состава (рис. 6(а)) магнитная восприимчивость нормального состояния семейства $\text{FeSe}(\text{Te})$ характеризуется существенным ростом под давлением для всей системы в целом. Такое заключение вытекает из имеющихся экспериментальных данных и теоретических оценок для базовых соединений FeSe [25] и FeTe [14,26], дополненных результатами проведенных в данной работе расчетов зависимости от давления магнитной восприимчивости соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$.

Как видно из приведенных в табл. 2 значений барической производной восприимчивости $d\chi/dP$ для рассматриваемой системы $\text{FeSe}(\text{Te})$, величина эффекта не только на порядок превышает ее типичное значение в обменно-усиленных зонных парамагнетиках [31], но и имеет противоположный *положительный* знак.

Это предполагает необычную возможность перехода металлической системы в ферромагнитное состояние под действием давления, причем при экспериментально достижимых его значениях. В первую очередь это относится к соединению FeTe , где величина эффекта наиболее высока. В работе [26] из анализа температурной зависимости восприимчивости FeTe в парамагнитной области в рамках закона Кюри–Вейсса получены значения парамагнитной температуры Кюри и ее барической производной, $\Theta \approx -240$ К и $d\Theta/dP \sim 7$ К/кбар. Соответствующая им грубая оценка критического давления, при котором возникает ферромагнетизм, составляет примерно 35 кбар. Это разумно согласуется с результатами работы [40], в которой впервые наблюдалось ферромагнитное состояние в FeTe при давлениях $P \geq 20$ кбар.

Для наглядности сопоставления наблюдаемых эффектов давления на температуру сверхпроводящего перехода (рис. 6(а)) с аналогичными эффектами на магнитную восприимчивость, на рис. 6(б) темными кружками представлены значения барической производной восприимчивости $d\chi/dP \equiv \chi d \ln \chi / dP$ для FeSe , $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ и FeTe . Для их оценок использованы соответствующие значения $\chi(T \rightarrow 0$ К) из работы [23] (рис. 5(б)) и усредненные значения $d \ln \chi / dP$ из табл. 2. Как видно на рис. 6, приведенные на нем зависимости величины эффекта давления на магнитные и сверхпроводящие свойства системы $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ от состава имеют строго противоположный вид. Этот факт, наряду с аналогичными тенденциями в поведении магнитной восприимчивости и T_c как функции состава при нормальном давлении (рис. 5), указывает на антагонистический характер взаимосвязи магнетизма и сверхпроводимости в этой системе, который наиболее ярко выражен в обогащенной теллуrom области.

5. Заключение

В работе впервые наблюдался отрицательный эффект давления на температуру сверхпроводящего перехода для обогащенных теллуrom соединений семейства $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$. Полученные данные позволили определить общую картину поведения величины эффекта давления на T_c в зависимости от состава, которая монотонно уменьшается с ростом x и меняет знак при $x \sim 0,8$.

Другая особенность рассматриваемой системы — аномально большой положительный эффект давления на магнитную восприимчивость нормального состояния для всей области составов, величина которого растет по мере замещения селена теллуrom. Как следует из проведенного в работе расчета величины эффекта для соединения $\text{FeSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ и выполненных ранее аналогичных расчетов для FeSe и FeTe , большая положительная величина эффекта давления на восприимчивость $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ определяется домини-

рующим положительным вкладом, обусловленным сильной чувствительностью восприимчивости к значению внутреннего структурного параметра Z и его изменением под давлением. Отметим, что наибольшая величина эффекта соответствует соединению FeTe , что является источником наблюдаемого в нем при высоком давлении ферромагнитного состояния [40].

Наконец, представленные в работе противоположные тенденции в поведении температуры сверхпроводящего перехода и магнитной восприимчивости нормального состояния в зависимости от состава и давления свидетельствуют об антагонистическом характере взаимосвязи сверхпроводимости и магнетизма в рассматриваемых халькогенидах железа $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$. Этот факт представляется важным и должен быть принят во внимание при дальнейшем исследовании возможных вкладов магнитных возбуждений в механизм сверхпроводимости данной системы.

Работа посвящена 100-летию со дня рождения академика А.А. Галкина — основателя Донецкого физико-технического института НАН Украины и донецкой научной школы физики высоких давлений и спектроскопии твердых тел.

Работа выполнена при поддержке российско-украинского гранта НАНУ-РФФИ 01-02-12.

Авторы выражают глубокую признательность профессору Г.Г. Левченко за любезное предоставление камеры высокого давления для проведения измерений и полезные советы по ее эксплуатации.

1. M.D. Lumsden and A.D. Christianson, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 203203 (2010).
2. C.W. Chu and B. Lorenz, *Physica C* **469**, 385 (2009).
3. J. Paglione and R.L. Greene, *Nature Phys.* **6**, 645 (2010).
4. J. Wen, G. Xu, G. Gu, J.M. Tranquada, and R.J. Birgeneau, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 124503 (2011).
5. I.I. Mazin, *Nature* **464**, 183 (2010).
6. P.J. Hirschfeld, M.M. Korshunov, and I.I. Mazin, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 124508 (2011).
7. Y. Kohama, Y. Kamihara, M. Hirano, H. Kawaji, T. Atake, and H. Hosono, *Phys. Rev. B* **78**, 020512(R) (2008).
8. M.V. Sadovskii, E.Z. Kuchinskii, and I.A. Nekrasov, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3481 (2012).
9. Y. Mizuguchi and Y. Takano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 102001 (2010).
10. D. Braithwaite, B. Salce, G. Lapertot, F. Bourdarot, C. Marin, D. Aoki, and M. Hanfland, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 232202 (2009).
11. S. Medvedev, T.M. McQueen, I.A. Troyan, T. Palasyuk, M.I. Erements, R.J. Cava, S. Naghavi, F. Casper, V. Ksenofontov, G. Wortmann, and C. Felser, *Nature Mater.* **8**, 630 (2009).
12. K. Horigane, N. Takeshita, C.-H. Lee, H. Hiraka, and K. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 063705 (2009).
13. J. Pietosa, D.J. Gawryluk, R. Puzniak, A. Wisniewski, J. Fink-Finowicki, M. Kozlowski, and M. Berkowski, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 265701 (2012).
14. H. Okada, H. Takahashi, Y. Mizuguchi, Y. Takano, and H. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 083709 (2009).
15. H. Takahashi, H. Okada, H. Takahashi, Y. Mizuguchi, and Y. Takano, *J. Phys.: Conf. Series* **200**, 012196 (2010).
16. B.C. Sales, A.S. Sefat, M.A. McGuire, R.Y. Jin, D. Mandrus, and Y. Mozharivskiy, *Phys. Rev. B* **79**, 094521 (2009).
17. G.F. Chen, Z.G. Chen, J. Dong, W.Z. Hu, G. Li, X.D. Zhang, P. Zheng, J.L. Luo, and N.L. Wang, *Phys. Rev. B* **79**, 140509 (2009).
18. R. Viennois, E. Giannini, D. van der Marel, and R. Černý, *J. Solid State Chem.* **183**, 769 (2010).
19. J. Yang, M. Matsui, M. Kawa, H. Ohta, C. Michioka, C. Dong, H. Wang, H. Yuan, M. Fang, and K. Yoshimura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 074704 (2010).
20. T. Noji, T. Suzuki, H. Abe, T. Adachi, M. Kato, and Y. Koike, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 084711 (2010).
21. Y. Liu, R.K. Kremer, and C.T. Lin, *Supercond. Sci. Technol.* **24**, 035012 (2011).
22. A.V. Fedorchenko, G.E. Grechnev, V.A. Desnenko, A.S. Panfilov, S.L. Gnatchenko, V.V. Tsurkan, J. Deisenhofer, H.-A. Krug von Nidda, A. Loidl, D.A. Chareev, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *Fiz. Nizk. Temp.* **37**, 100 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 83 (2011)].
23. G.E. Grechnev, A.S. Panfilov, A.V. Fedorchenko, V.A. Desnenko, S.L. Gnatchenko, V. Tsurkan, J. Deisenhofer, A. Loidl, D.A. Chareev, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3460 (2012).
24. Y.A. Ovchenkov, D.A. Chareev, E.S. Kozlyakova, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *Physica C* **489**, 32 (2013).
25. G.E. Grechnev, A.S. Panfilov, V.A. Desnenko, A.V. Fedorchenko, S.L. Gnatchenko, D.A. Chareev, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 046004 (2013).
26. A.V. Fedorchenko, G.E. Grechnev, V.A. Desnenko, A.S. Panfilov, S.L. Gnatchenko, V. Tsurkan, J. Deisenhofer, A. Loidl, O.S. Volkova, and A.N. Vasiliev, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 325701 (2011).
27. D. Chareev, E. Osadchii, T. Kuzmicheva, J.-Y. Lin, S. Kuzmichev, O. Volkova, and A. Vasiliev, *Cryst. Eng. Comm.* **15**, 1989 (2013).
28. M. Baran, V. Dyakonov, L. Gladczuk, G. Levchenko, S. Piechota, and H. Szymczak, *Physica C: Superconductivity* **241**, 383 (1995).
29. L.D. Jennings and C.A. Swenson, *Phys. Rev.* **112**, 31 (1958).
30. J.M. Wills, M. Alouani, P. Andersson, A. Delin, O. Eriksson, and A. Grechnev, *Full-Potential Electronic Structure Method. Energy and Force Calculations with Density Functional and Dynamical Mean Field Theory*, Springer Series in Solid-State Sciences, Springer Verlag, Berlin, Vol. 167 (2010), p. 200.
31. G.E. Grechnev, *Fiz. Nizk. Temp.* **35**, 812 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 638 (2009)].

32. U. von Barth and L. Hedin, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, 1629 (1972).
33. G. Tsoi, A.K. Stemshorn, Y.K. Vohra, P.M. Wu, F.C. Hsu, Y.L. Huang, M.K. Wu, K.W. Yeh, and S.T. Weir, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 232201 (2009).
34. V. Tsurkan, J. Deisenhofer, A. Günther, Ch. Kant, M. Klemm, H.-A. Krug von Nidda, F. Schrettle, and A. Loidl, *Eur. Phys. J. B* **79**, 289 (2011).
35. P.S. Malavi, S. Karmakar, N.N. Patel, and S.M. Sharma, *arXiv:1308.3367* [cond-mat.mtrl-sci] (2013).
36. Y. Koshika, T. Usui, S. Adachi, T. Watanabe, K. Sakano, S. Simayi, and M. Yoshizawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 023703 (2013).
37. M. Bendele, A. Ichsanow, Yu. Pashkevich, L. Keller, Th. Strässle, A. Gusev, E. Pomjakushina, K. Conder, R. Khasanov, and H. Keller, *Phys. Rev. B* **85**, 064517 (2012).
38. Y. Mizuguchi, F. Tomioka, K. Deguchi, S. Tsuda, T. Yamaguchi, and Y. Takano, *Physica C* **470**, S353 (2010).
39. T. Imai, K. Ahilan, F.L. Ning, T.M. McQueen, and R.J. Cava, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 177005 (2009).
40. M. Bendele, A. Maisuradze, B. Roessli, S.N. Gvasaliya, E. Pomjakushina, S. Weyeneth, K. Conder, H. Keller, and R. Khasanov, *Phys. Rev. B* **87**, 060409 (2013).

Interplay of superconductivity and magnetism in FeSe_{1-x}Te_x compounds. Pressure effects

A.S. Panfilov, V.A. Pashchenko, G.E. Grechnev, V.A. Desnenko, A.V. Fedorchenko, A.N. Bludov, S.L. Gnatchenko, D.A. Chareev, E.S. Mitrofanova, and A.N. Vasiliev

The influence of uniform pressures P up to 5 kbar on the superconducting transition temperature T_c was studied for the FeSe_{1-x}Te_x ($x = 0, 0.85, 0.88, \text{ and } 0.90$) system. For the first time, we observed a change in sign of the pressure effect on T_c when going from FeSe to tellurium rich alloys. This has allowed to specify the pressure derivative dT_c/dP for the system as a function of composition. The observed dependence was compared with results of the *ab initio* calculations of electronic structure and magnetism of FeSe, FeTe and FeSe_{0.5}Te_{0.5}, and also with our recent experimental data on pressure effects on magnetic susceptibilities of FeSe and FeTe compounds in the normal state. This comparison demonstrates a competing interplay between superconductivity and magnetism in tellurium rich FeSe_{1-x}Te_x compounds.

PACS: **74.62.-c** Transition temperature variations, phase diagrams;
 74.62.Fj Effects of pressure;
 74.70.Xa Pnictides and chalcogenides;
 75.10.Lp Band and itinerant models.

Keywords: iron superconductors, FeSe_{1-x}Te_x, electronic structure, magnetic susceptibility, pressure effects.