

铁基氟化物超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 声子特性的第一性原理计算研究*

王玮† 尹新国

(淮北师范大学, 物理与电子信息学院, 淮北 235000)

(2013年12月28日收到; 2014年1月29日收到修改稿)

采用基于第一性原理的平面波赝势方法, 计算了铁基氟化物及其钴掺杂超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 在四方非磁态与正交条纹反铁磁态下的声子谱 (声子色散曲线、声子态密度) 及电-声子耦合常数. 计算发现: 条纹反铁磁相互作用下的自旋-声子耦合效应强于电-声子耦合作用使声子谱的宽度减小; 自旋效应使声子的有效质量增加导致条纹反铁磁态下 Fe 原子与 As 原子的耦合振动频率减小. 另外, 掺杂和自旋效应是提高电-声子耦合常数的两个有效方法, 但计算所得超导转变温度远小于实验测量值, 表明铁基超导电性非简单的电-声子耦合配对机理.

关键词: 铁基氟化物, 声子特性, 电-声子耦合, 超导电性

PACS: 74.70.-b, 74.25.Kc, 63.20.kd, 63.20.dk

DOI: 10.7498/aps.63.097401

1 引言

2008年, 铁基氧化物超导体 $\text{LnFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Sm}, \text{Nd}, \text{Pr}, \text{Gd}$)^[1-6] 的发现揭开了研究高温超导体的新一页. 这类超导体的母体虽然是传导性不好的半金属, 不具有超导电性, 且随着温度的降低会出现由反铁磁自旋密度涨落引起的结构相变, 但通过电子或空穴掺杂, 母体的反铁磁序以及结构相变将会受到抑制, 从而产生超导电性. 在探索掺杂元素对铁基超导电性影响的过程中, 研究发现不仅对电荷库 LnO 层进行电子或空穴掺杂可导致超导电性的产生, 而且直接对传导 FeAs 层进行磁性元素 Co/Ni 掺杂同样也可产生超导电性^[7-10], 这与掺杂铜氧化物超导体现象有所不同. 在铜氧化物超导体中, 对电荷库层掺杂后, 载流子转移到 CuO_2 平面导致超导电性的产生^[11], 但若用 Zn/Ni 进行直接替代 Cu 位掺杂对其超导电性的产生却具有抑制作用^[12]. 继铁基氧化物超导体后, 铁基氟化物超导体^[13-15] 的出现也引起了本

小组的关注, 具体有两个方面的原因: 第一, 铁基氟化物母体 SrFeAsF 可以看做是氟原子替代铁基氧化物超导体中的氧原子产生的; 第二, 在 Fe 位进行 Co 掺杂, 即直接在传导层掺杂是获取超导电性的方法, 有利于理解铁基超导机理. 随着 Co 掺杂量的增加, $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ 表现出超导电性, 当掺杂量 $x = 0.125$ 时达到最大超导转变温度 $T_c = 4 \text{ K}$ ^[13]. 实验发现母体 SrFeAsF 在 175 K 出现结构和磁相变, 并伴随着比热、电阻和磁化率的强烈异常^[15]. 经本小组早期的计算^[16] 研究进一步证实: 母体 SrFeAsF 的基态为条纹反铁磁态, 在低温下出现的结构相变为由四方相到正交相.

声子特性研究是理解超导材料超导机理的重要方法^[17-20], 而对于含过渡性金属元素的情况, 考虑材料磁性及磁声子互作用在近期倍受关注. 对于铁基超导材料, 过渡金属掺杂的实验报道^[21,22] 和晶格动力学计算^[23-28] 都证明磁效应对超导电性起到重要作用. 本文计算研究了钴掺杂前后铁基氟化物超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 在四方非磁 (NM) 态和正交条纹反铁磁 (SAF) 态下的声

* 国家自然科学基金青年基金 (批准号: 11104100) 和安徽省高等学校质量工程项目 (批准号: 2011248) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: wangweiphysics@gmail.com

子色散曲线、声子态密度以及电-声子耦合常数. 非磁态下, 钴掺杂使声子谱宽度增加, 而钴掺杂条纹反铁磁态前后的声子谱宽度减小, 这一相反的结果表明考虑条纹反铁磁相互作用后自旋-声子耦合效应强于电-声子耦合的增加. 同时, 自旋效应不仅增强了 Fe-As 层上原子在 xy 平面上的振动耦合, 还激发了其沿 z 方向的振动活性, 使之与 Sr-F 层原子的层间耦合加强, 导致声子的有效质量增加, 从而使条纹反铁磁态下 Fe 原子与 As 原子的耦合振动频率减小. 另外, 计算所得的电-声子耦合常数和超导转变温度结果一方面证实了掺杂和自旋效应是提高超导转变温度的两个有效方法, 另一方面表明铁基超导电性不是传统的电-声子耦合配对机理. 本文对 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 声子谱中的铁位掺杂和自旋效应的系统计算有利于理解其超导微观机理.

2 计算模型和方法

本文采用 $1 \times 1 \times 1$ 的原胞和 $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ 的超胞分别对非磁和条纹反铁磁态的 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 进行声子特性计算, 其中条纹反铁磁态是指铁原子的自旋沿 x 方向成铁磁排列, 而沿 y 方向成反铁磁排列^[16]. 具体的计算采用基于平面波赝势的 Quantum-Espresso 程序包^[29]. 电子-离子相互作用由超软赝势模拟, 交换关联势采用广义梯度近似 (GGA-PBE)^[30], 非磁态和条纹反铁磁态的波函数截断能分别为 40 和 80Ry, 电荷密度截断能分别为 400 和 800Ry. 对于钴掺杂材料, 采用虚晶近似的方法, 将虚原子 Fe(Co)

看作铁原子和钴原子的平均效应, 其核电荷数为 $Z = (1-x)Z_{\text{Fe}} + xZ_{\text{Co}}$. 根据截断能和 k 点验证能量和频率收敛.

3 计算结果与讨论

本文计算了钴掺杂铁基氟化物超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 在非磁态和条纹反铁磁态下的声子色散曲线及总声子态密度, 计算结果分别表示在图 1 和图 2 中, 其中灰色实线和黑色短线分别表示掺杂前 ($x = 0$) 和掺杂后 ($x = 0.125$) 的计算结果. 对于非磁态的情况, 如图 1 所示, 共有 24 条声子色散曲线, 这与原胞中包含 8 个原子 (两个 SrFeAsF 分子) 相对应. 图中高频区 ($\omega > 225 \text{ cm}^{-1}$) 和低频区 ($\omega < 125 \text{ cm}^{-1}$) 不同声子之间的杂化较强, 即声子间 (声子-声子) 耦合较强, 而中频区 ($125 \text{ cm}^{-1} < \omega < 225 \text{ cm}^{-1}$) 声子间耦合较弱. 另外, 比较掺杂前 ($x = 0$) 和掺杂后 ($x = 0.125$) 的计算结果不难发现: 掺杂后高频区的声子频率发生硬化, 低频区光学支的声子频率发生软化, 而中频区的声子频率变化不大, 即光学支声子在总态密度上体现为频谱在高频区的蓝移和在低频区的红移, 这种频率的变化导致整个声子谱的扩张, 使声子谱的宽度由母体 SrFeAsF 的 360 cm^{-1} 增大到掺杂后 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0.125$) 的 361.5 cm^{-1} . 参照电子掺杂可使电子能带结构增宽、电子态杂化增强的理论依据, 钴掺杂 (电子掺杂) 导致声子谱宽度增大的现象可进行类比理解, 同时也表明钴掺杂增强了电-声子耦合强度, 有利于铁基氟化物超导电性的出现.

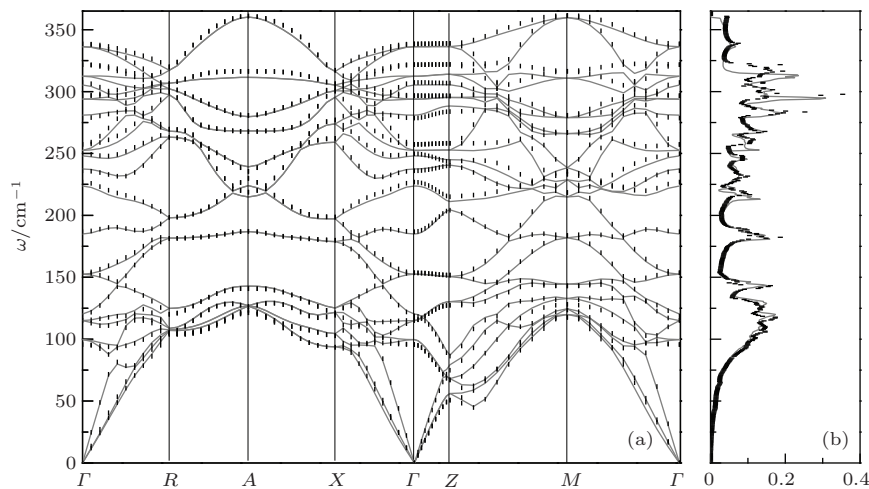


图 1 非磁态下 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 的声子色散曲线 (a) 和总声子态密度 (b). 灰色实线和黑色短线分别表示掺杂前 ($x = 0$) 和掺杂后 ($x = 0.125$) 的计算结果

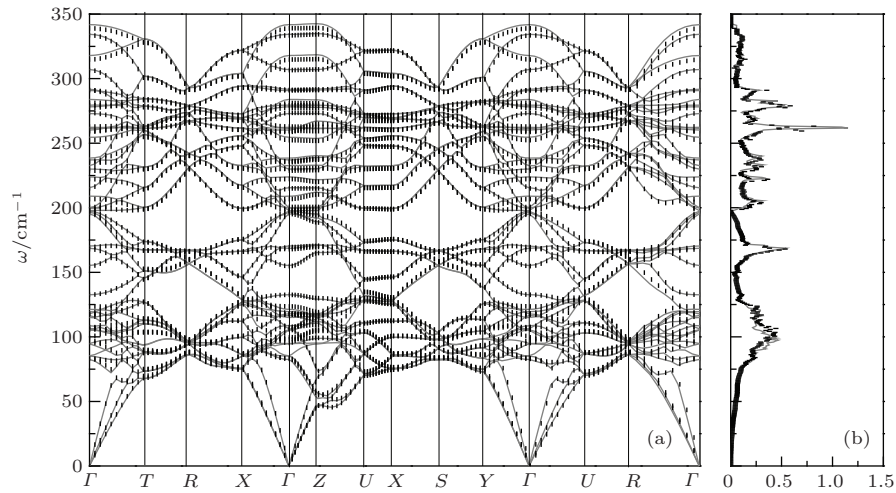


图2 条纹反铁磁态下 SrFe_{1-x}Co_xAsF ($x = 0, 0.125$) 的声子色散曲线 (a) 和总声子态密度 (b). 灰色实线和黑色短线分别表示掺杂前 ($x = 0$) 和掺杂后 ($x = 0.125$) 的计算结果

对于条纹反铁磁态, 如图2所示, 共有48条声子色散曲线, 是非磁态声子条数的2倍, 这与计算采用的超胞原子数 ($\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ 的超胞, 包含16个原子) 相对应. 一方面, 由于条纹反铁磁结构中原子数增多, 声子色散曲线条数增多, 不同声子之间的杂化增强, 声子间耦合得到增强. 在高频区 ($\omega > 225 \text{ cm}^{-1}$) 和低频区 ($\omega < 125 \text{ cm}^{-1}$) 声子-声子耦合依然较强, 在中频区 ($125 \text{ cm}^{-1} < \omega < 225 \text{ cm}^{-1}$) 较弱, 这与非磁态下的情况相同. 而掺杂前后声子频率的变化趋势却与非磁态下的情形相反, 即掺杂后高频区的声子频率发生软化(频谱红移), 低频区光学支的声子频率发生硬化(频谱蓝移), 从而导致整个声子谱在掺杂后发生收缩, 使声子谱的宽度由母体 SrFeAsF 的 342 cm^{-1} 缩小到掺杂后 SrFe_{1-x}Co_xAsF ($x = 0.125$) 的 339 cm^{-1} , 这恰与前面提到的电子掺杂将导致声子谱宽度增大的现象相反. 另一方面, 在考虑自旋效应后, 无论是母体还是掺杂材料, 声子谱的宽度与非磁态下的情况比较都明显地缩小. 综合以上两个方面的计算结果可以发现, 考虑条纹反铁磁相互作用后自旋-声子耦合效应强于电-声子耦合的增加, 最终导致了声子谱与非磁态时相比有明显的收缩; 而在自旋效应下的电子掺杂进一步缩小声子谱宽度, 表明电子掺杂进一步增强了自旋-声子相互作用. 另外, 比较图2与图1, 仔细观察铁基氟化物 SrFe_{1-x}Co_xAsF ($x = 0, 0.125$) 声子色散曲线在考虑自旋效应前后的变化, 对比显示: 在非磁态下钴掺杂仅略微改变了声子频率的大小而整个声子色散曲线的走势没有发生变化, 而在条纹反铁磁态下声子色散曲线的

走势在掺杂后却发生了微弱变化, 例如 100 cm^{-1} 附近, 这可能是由于钴掺杂材料 SrFe_{1-x}Co_xAsF ($x = 0.125$) 中存在自旋涨落导致的^[16].

图3为钴掺杂前后铁基氟化物超导体 SrFe_{1-x}Co_xAsF ($x = 0, 0.125$) 在非磁态和条纹反铁磁态下的原子分声子态密度, 其中主要的态密度峰(或峰区)已用数字标出. 对于非磁态的情况, 由图3(a)中可以看出, 除频率处于 $\omega > 325 \text{ cm}^{-1}$ 以上的8峰峰区声子态密度源于单独的F原子振动的贡献, 其他各态密度峰均为两种或多种原子耦合振动的结果, 其中原子振动耦合较强的声子处于 $\omega < 138 \text{ cm}^{-1}$ 以下的1峰峰区、 $138 \text{ cm}^{-1} < \omega < 150 \text{ cm}^{-1}$ 的2峰峰区和 $275 \text{ cm}^{-1} < \omega < 325 \text{ cm}^{-1}$ 的7峰峰区. 而3, 4, 5, 6峰区由于不同原子间的振动耦合较弱, 相应频率区的声子态密度可以依次看做是 Sr, As, Fe 和 F 原子单独振动的结果, 这与原子序数依次减小而振动频率相应增大的常规频率分布规则相符合. 比较图3(a)中非磁态下钴掺杂前后的声子分态密度可以看出, 除态密度分布的频率宽度略微增宽外, 不同原子的分态密度分布均没有发生变化. 在考虑反铁磁自旋相互作用后, 如图3(b)所示, 频率处于 200 cm^{-1} 以上的态密度峰(4—8峰)发生了明显的红移, 其中主要为 As 原子振动贡献的态密度4峰恰好红移到3峰峰区处, 使原子间振动耦合加强; 而态密度1峰中的 Sr 原子贡献部分仍处于原频率范围, 表明自旋对 Sr 原子振动的影响较小, 对 Fe-As 层上的原子振动影响较大, 而 F 原子由于质量较轻易受到周围势场的影响发生频率的变化.

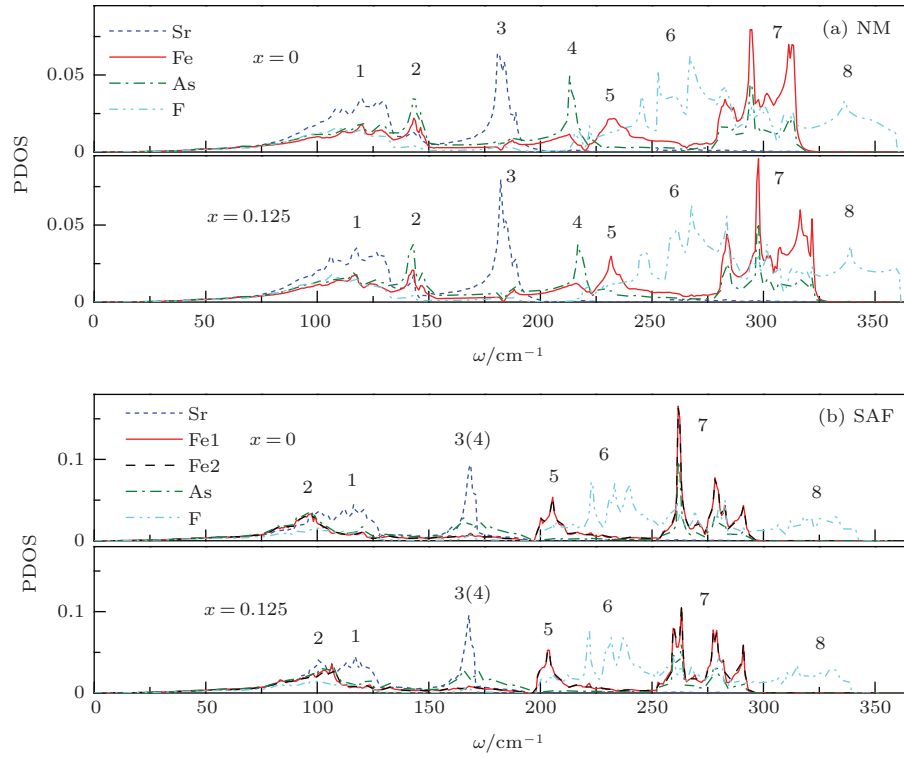


图3 (网刊彩色) 非磁态 (a) 和条纹反铁磁态 (b) 下 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 的原子分子声子态密度

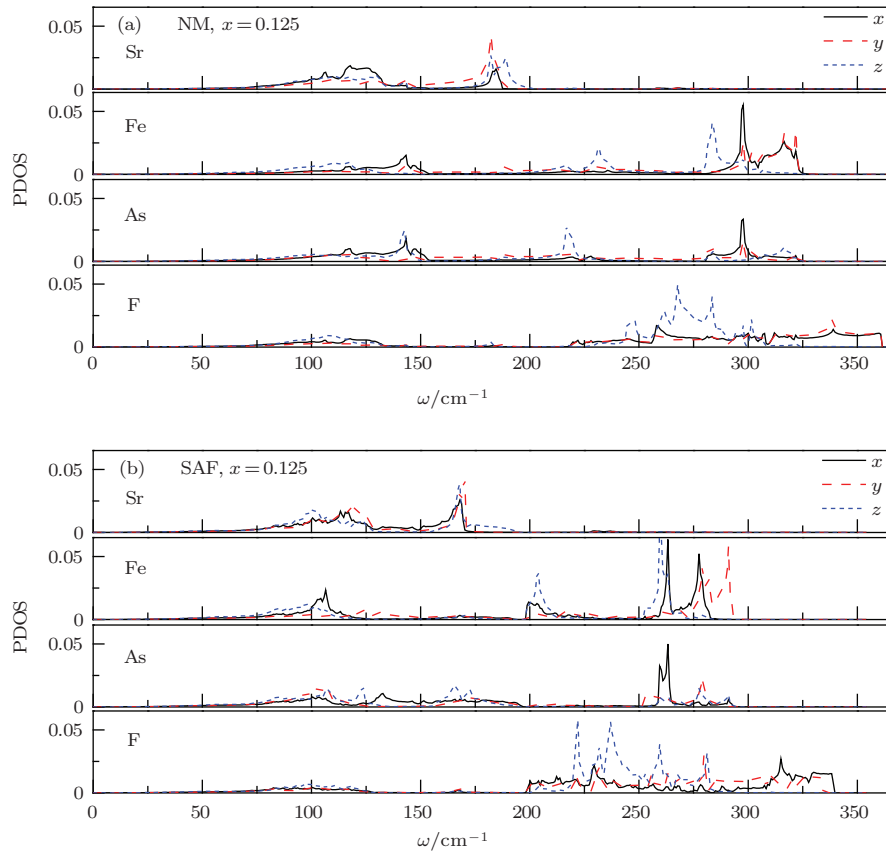


图4 (网刊彩色) 非磁态 (a) 和条纹反铁磁态 (b) 下掺杂氟化物超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0.125$) 的原子极化声子态密度

本文根据非磁态和条纹反铁磁态下掺杂氟化物超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0.125$) 中不同原子沿 x, y, z 三个方向的极化声子态密度 (如图 4 所示) 理解系统中原子的层内耦合与层间耦合. 从图 4(a) 中可以看出, 在非磁态下原子间的耦合振动主要为 Fe 原子与 As 原子在 $130\text{--}150\text{ cm}^{-1}$ 频区和 300 cm^{-1} 附近的振动, 其中前者为 Fe, As 原子沿 x 方向振动的耦合, 后者为 Fe, As 原子在 xy 平面上振动的耦合. 而 Sr 原子与 F 原子间的振动以及 Fe-As 层与 Sr-F 层的层间振动几乎没有相互耦合, 均可近似看作是独立的振动. 所以, 在非磁态下原子间的振动耦合主要体现为 Fe-As 层原子在 xy 平面上的层内耦合, 而与 Sr-F 层原子的层间耦合几乎为零. 在条纹反铁磁态下, 如图 4(b) 所示, Fe 原子与 As 原子间的耦合振动峰红移至 100 cm^{-1} 和 260 cm^{-1} 附近, 与非磁态相比, 除 Fe, As 原子沿 x 方向 (或 xy 平面上) 振动的耦合外, 还存在 z 方向的振动耦合, 表明 Fe 原子自旋极化激发了其沿 z 方向的振动活性, 使之与 Sr-F 层原子的层间耦合加强. 因此, 层间耦合加强使声子的有效质量增加是导致条纹反铁磁态下 Fe 原子与 As 原子的耦合振动频率减小的根本原因.

最后, 本文还计算了非磁态和条纹反铁磁态下 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 的对数声子频率 ω_{ln} 、电-声子耦合常数 λ_{ep} 和超导转变温度 T_c 的值, 计算结果如表 1 所示. 从表中可以看出钴掺杂增强了电-声子耦合: 非磁态和条纹反铁磁态下的电-声子耦合常数从母体的 $\lambda_{\text{ep}} = 0.1594$ 和 $\lambda_{\text{ep}} = 0.1876$ 分别提高到掺杂后的 $\lambda_{\text{ep}} = 0.1628$ 和 $\lambda_{\text{ep}} = 0.2188$. 同时, 对于母体和掺杂超导体, 自旋效应也同样的增强了电-声子耦合. 另外, 根据修正的麦克米兰方程

$$T_c = \frac{\omega_{\text{ln}}}{1.2} \exp \left[- \frac{1.04(1 + \lambda_{\text{ep}})}{\lambda_{\text{ep}} - \mu^*(1 + 0.62\lambda_{\text{ep}})} \right],$$

电-声子耦合的增强可导致超导转变温度升高. 从非磁态下的母体到掺杂超导体, 再到条纹反铁磁态下的这两种材料, 计算所得超导转变温度从 $T_c = 0.0795\text{ K}$ 依次提高到 $T_c = 0.1222\text{ K}$, $T_c = 0.2264\text{ K}$ 和 $T_c = 0.5402\text{ K}$. 因此, 本文的结果进一步定量地证实了掺杂和自旋效应是提高超导转变温度的两个重要方面. 但是, 计算得到的 T_c 值远小于实验结果 ($T_c = 4\text{ K}$)^[13], 表明铁基超导电性不是传统的电-声子耦合配对机理, 或者说其超导配对不是由单一的电-声子耦合引起的, 还受其

他相互作用的影响, 比如自旋-声子耦合和自旋涨落等等, 这还需要我们今后给出进一步的定量计算结果.

表 1 非磁态和条纹反铁磁态下 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 的 ω_{ln} , λ_{ep} 和 T_c 值

	NM		SAF	
	$x = 0$	$x = 0.125$	$x = 0$	$x = 0.125$
$\omega_{\text{ln}}/\text{K}$	184.085	246.844	196.489	212.647
λ_{ep}	0.1594	0.1628	0.1876	0.2188
T_c/K	0.0795	0.1222	0.2264	0.5402

4 结 论

本文采用第一性原理方法分别计算了钴掺杂前后铁基氟化物超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) 在非磁态和条纹反铁磁态下的声子色散曲线、声子态密度 (包括总声子态密度、原子分声子态密度、原子极化声子态密度) 以及电-声子耦合常数, 得到以下结论: 1) 在非磁态下, 钴掺杂使高频区声子发生硬化、低频区光学支声子发生软化, 增加了声子谱的宽度, 表明钴掺杂在一定程度上增强了电-声子耦合强度, 有利于超导电性的出现. 2) 在条纹反铁磁态下, 掺杂后高频区声子频率则发生软化, 而低频区光学支声子频率却发生硬化, 使得声子谱宽度减小, 导致情况与非磁态下完全相反, 表明考虑条纹反铁磁相互作用后自旋-声子耦合效应强于电-声子耦合的增加. 3) 由原子分声子态密度以及原子极化声子态密度可知, 反铁磁自旋效应不仅增强了 Fe-As 层上原子在 xy 平面上的振动耦合, 还激发了其沿 z 方向的振动活性, 使之与 Sr-F 层原子的层间耦合加强. 因此, 层间耦合加强被认为是使声子的有效质量增加从而导致条纹反铁磁态下 Fe 原子与 As 原子的耦合振动频率减小的根本原因. 4) 从非磁态下的母体到掺杂超导体, 再到条纹反铁磁态下的这两种材料, 计算得到的电-声子耦合常数和超导转变温度分别为 $\lambda_{\text{ep}} = 0.1594$, $T_c = 0.0795\text{ K}$; $\lambda_{\text{ep}} = 0.1876$, $T_c = 0.1222\text{ K}$; $\lambda_{\text{ep}} = 0.1628$, $T_c = 0.2264\text{ K}$; $\lambda_{\text{ep}} = 0.2188$, $T_c = 0.5402\text{ K}$. 该结果一方面定量地证实了掺杂和自旋效应是提高超导转变温度的两个有效方法, 另一方面也表明铁基超导电性不是传统的电-声子耦合配对机理, 或者说其超导配对不是由单一的电-声子耦合引起的, 还受其他相互作用的影响.

参考文献

- [1] Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, Hosono H 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296
- [2] Chen G F, Li Z, Wu D, Li G, Hu W Z, Dong J, Zheng P, Luo J L, Wang N L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 247002
- [3] Chen X H, Wu T, Wu G, Liu R H, Chen H, Fang D F 2008 *Nature* **453** 761
- [4] Ren Z A, Yang J, Lu W, Yi W, Shen X L, Li Z C, Che G C, Dong X L, Sun L L, Zhou F, Zhao Z X 2008 *EPL* **82** 57002
- [5] Matano K, Ren Z A, Dong X L, Sun L L, Zhao Z X, Zheng G Q 2008 *EPL* **83** 57001
- [6] Wang C, Li L J, Chi S, Zhu Z W, Ren Z, Li Y K, Wang Y T, Lin X, Luo Y K, Jiang S, Xu X F, Cao G H, Xu Z A 2008 *EPL* **83** 67006
- [7] Sefat A S, Huq A, McGuire M A, Jin R Y, Sales B C, Mandrus D, Cranswick L M D, Stephens P W, Stone K H 2008 *Phys. Rev. B* **78** 104505
- [8] Wang C, Li Y K, Zhu Z W, Jiang S, Lin X, Luo Y K, Chi S, Li L J, Ren Z, He M, Chen H, Wang Y T, Tao Q, Cao G H, Xu Z A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 054521
- [9] Cao G H, Jiang S, Lin X, Wang C, Li Y K, Ren Z, Tao Q, Feng C, Dai J H, Xu Z A, Zhang F C 2009 *Phys. Rev. B* **79** 174505
- [10] Xiao Y, Su Y, Mittal R, Chatterji T, Hansen T, Kumar C M N, Matsuishi S, Hosono H, Brueckel Th 2009 *Phys. Rev. B* **79** 060504
- [11] Cava R J 2000 *J. Am. Ceram. Soc.* **83** 5
- [12] Kandyel E, Sekkina M A 2002 *J. Phys. Chem. Solids* **63** 1815
- [13] Matsuishi S, Inoue Y, Numura T, Hirano M, Hosono H 2009 *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** 113709
- [14] Han F, Zhu X Y, Mu G, Cheng P, Wen H H 2008 *Phys. Rev. B* **78** 180503
- [15] Tegel M, Johansson S, Weiss V, Tegel M, Johansson S, Weiss V, Schellenberg I, Hermes W, Pöttinger R, Johrendt D 2008 *EPL* **84** 67007
- [16] Wang W, Li B, Liu S, Liu M, Xing Z W 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 123906
- [17] Zhang X J, Chen C L, Feng F L 2013 *Chin. Phys. B* **22** 096301
- [18] Zhang A M, Zhang Q M 2013 *Chin. Phys. B* **22** 087103
- [19] Dai Y M, Xu B, Shen B, Xiao H, Lobo R. M P S, Qiu X G 2012 *Chin. Phys. B* **21** 077403
- [20] Sun J F, Wang W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 137402 (in Chinese)[孙家法, 王玮 2012 物理学报 **61** 137402]
- [21] Satoru M, Yasunori I, Takatoshi N, Youichi K, Masahiro H, Hideo H 2009 *New Journal of Physics* **11** 025012
- [22] Xia T L, Zhao T S 2011 *Supercond. Sci. Technol.* **24** 095006
- [23] Zbiri M, Mittal R, Rols S, Su Y, Xiao Y, Schober H, Chaplot S L, Johnson M R, Chatterji T, Inoue Y, Matsuishi S, Hosono H, Brueckel T 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 315701
- [24] Egami T, Fine B V, Parshall D, Subedi A, Singh D J 2010 *Adv. Condens. Matter Phys.* **2010** 164916
- [25] Wang W, Sun J F, Li S W 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 082504
- [26] Wang W, Sun J F, Li S W, Lu H Y 2012 *Physica C* **472** 29
- [27] Liu S, Li B, Wang W, Wang J, Liu M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4245 (in Chinese)[刘魁, 李斌, 王玮, 汪军, 刘楣 2010 物理学报 **59** 4245]
- [28] Li B, Xing Z W, Liu M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 077402 (in Chinese)[李斌, 邢钟文, 刘楣 2011 物理学报 **60** 077402]
- [29] Baroni S, Corso A Dal, Gironcoli S de, Giannozzi P, Cavazzoni C, Ballabio G, Scandolo S, Chiarotti G, Focher P, Pasquarello A, Laasonen K, Trave A, Car R, Marzari N, and Kokalj A, [http://www. quantum-espresso. org](http://www.quantum-espresso.org).
- [30] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

First-principles study on phonon properties of iron-based fluoride superconductors $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$)*

Wang Wei[†] Yin Xin-Guo

(School of Physics and Electronic Information, Huaibei Normal University, Huaibei 235000, China)

(Received 28 December 2013; revised manuscript received 29 January 2014)

Abstract

Using plane-wave pseudopotential method based on first-principles, we calculate the phonon spectra (including phonon dispersion curves and phonon density of states) and electron-phonon coupling constants of $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ ($x = 0, 0.125$) in tetragonal nonmagnetic (NM) and orthorhombic striped antiferromagnetic (SAF) states. Results show that under striped antiferromagnetic interaction the spin-phonon coupling is stronger than the electron-phonon coupling, leading to the decrease of phonon spectra width; and the increased effective phonon quality due to spin effects makes the frequencies of coupling vibration between Fe and As atoms reduced. In addition, doping and spin effects are two effective methods to enhance the electron-phonon coupling, however, the calculated superconducting transition temperature is far lower than the experimental measurement, which rules out the simple electron-coupling superconducting pairing mechanism in $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$.

Keywords: iron-based fluoride, phonon property, electron-phonon coupling, superconductivity

PACS: 74.70.-b, 74.25.Kc, 63.20.kd, 63.20.dk

DOI: [10.7498/aps.63.097401](https://doi.org/10.7498/aps.63.097401)

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11104100), and the Quality Project of Higher Education of Anhui Province, China (Grant No. 2011248).

[†] Corresponding author. E-mail: wangweiphysics@gmail.com