

Влияние оптического возбуждения на зонную структуру и спектры рентгеновского поглощения ВТСП на основе BaBiO_3 : расчет из первых принципов

Я. В. Жумагулов^{+*}, А. В. Красавин⁺¹⁾, А. Е. Лукьянов⁺, В. Д. Неверов⁺, А. А. Ярославцев^{+*},
А. П. Менушенков⁺

⁺Национальный Исследовательский Ядерный Университет МИФИ, 115409 Москва, Россия

*Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, 197101 С.-Петербург, Россия

[×]European XFEL (X-ray free electron laser) GmbH, 22869 Schönefeld, Germany

Поступила в редакцию 29 марта 2019 г.

После переработки 27 мая 2019 г.

Принята к публикации 27 мая 2019 г.

Методом теории функционала плотности рассчитаны зонная структура, плотности состояний и спектры рентгеновского поглощения K -края кислорода для перовскитных высокотемпературных сверхпроводников на основе BaBiO_3 для разных уровней допирования калием в основном и оптически возбужденном состояниях. Показано, что в рамках данного подхода учет локальных структурных неоднородностей, обусловленных допированием и воздействием оптического излучения, позволяет корректно описать изменения свойств электронной подсистемы вблизи уровня Ферми. Продемонстрировано появление дырочных носителей при допировании на гибридизированной орбитали $\text{Bi}6s-2p\sigma^*$, что находится в согласии с моделью электронной структуры висмутатных высокотемпературных сверхпроводников на основе пространственно-разделенной ферми-бозе смеси. Для возбужденного состояния недопированного соединения найдено, что зонная структура эквивалентна зонной структуре модели сильной связи для кубической решетки. Результаты важны для предварительного анализа рентгеновских спектров поглощения с временным разрешением на рентгеновском лазере на свободных электронах при фемтосекундном оптическом возбуждении.

DOI: 10.1134/S0370274X19130058

Введение. Несмотря на колоссальное число экспериментальных и теоретических работ, выполненных за более чем 30 лет после открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратах, общепринятый взгляд на происхождение ВТСП до сих пор не выработан. До сих пор неясно, ответственно ли электрон-фононное взаимодействие за спаривание носителей, или оно лишь обеспечивает возможность переноса сверхпроводящего тока уже спаренными носителями, характеризующую жесткостью фазы ρ_s [1]. Поскольку обширные теоретические исследования еще не привели к созданию удовлетворительной всеобъемлющей теории [2], использование новых экспериментальных методов становится решающим для объяснения механизма ВТСП. Исследования неравновесных процессов в *pump-probe* экспериментах, которые можно реализовать с появлением рентгеновских лазеров на свободных электронах,

дают новую уникальную информацию о быстрой динамике электронных и решеточных свойств ВТСП [3–7]. Родственное купратам семейство сверхпроводящих оксидов представлено перовскитоподобными сверхпроводниками на основе BaBiO_3 . Кубические сверхпроводящие оксиды $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ (ВРВО) и $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ (ВКВО) начали широко исследоваться с 1975 [8] и 1988 гг. [9], соответственно. Для объяснения ВТСП в этих соединениях были проведены многочисленные расчеты из первых принципов. Однако большинство необычных свойств соединений семейства BaBiO_3 , описанных в раннем обзоре Uchida et al. [10], все еще остаются необъясненными. В отличие от слоистых купратов, висмутатные соединения кристаллизуются в трехмерную кубическую структуру. В то время как в исходном материале купратов, La_2CuO_4 , реализуются антиферромагнитное упорядочение и состояние с волной спиновой плотности (SDW – *spin density wave*), исходное соединение висмутатов BaBiO_3 характеризуется зарядо-

¹⁾e-mail: avkrasavin@mephi.ru

вым упорядочением и волной зарядовой плотности (CDW – *charge density wave*). Поэтому в висмутатах магнитный механизм исключается из возможных объяснений природы ВТСП. Благодаря существенно большей длине связи Bi–O октаэдрических комплексов в BaBiO_3 (2.4 \AA) по сравнению с длиной связи Cu–O в купратах (1.9 \AA), висмутаты имеют значительные преимущества для изучения локально чувствительными методами, такими, как рентгеновская спектроскопия поглощения EXAFS (*Extended X-ray Absorption Fine Structure*) и XANES (*X-ray Absorption Near Edge Structure*). Наши низкотемпературные EXAFS-исследования соединений ВКВО и ВРВО [11, 12] показали наличие аномальных колебаний решетки, связанных с движением локальных электронных пар. Было обнаружено, что различное электронное заполнение верхней антисвязывающей орбитали $\text{Bi}6s\text{--}2p_{\sigma^*}$ соседних октаэдрических комплексов BiO_6 приводит к образованию двухъямного потенциала колебаний части ионов кислорода. Как показано в [11, 12], большой мягкий октаэдр представляет собой комплекс BiO_6 с электронной парой, а меньший жесткий октаэдр – комплекс BiL_2O_6 с дырочной парой на верхней антисвязывающей орбитали $\text{Bi}6s\text{--}2p_{\sigma^*}$ (здесь L_2 обозначает свободный уровень в антисвязывающей $\text{Bi}6s\text{--}2p_{\sigma^*}$ -орбитали). Двухъямный потенциал колебаний ионов кислорода возникает из-за туннелирования локальной электронной пары между соседними октаэдрами в соответствии с динамическим обменом $\text{BiL}_2\text{O}_6 \leftrightarrow \text{BiO}_6$. Экспериментально BaBiO_3 демонстрирует полупроводниковое поведение с активационной щелью $E_a = 0.24 \text{ эВ}$, что можно объяснить только как двухчастичный перенос с энергией активации $2E_a$ из-за дelokализации связанных локальных пар [12]. Оптическая щель E_g , в соответствии с описанием, предложенным Вармой [13], экспериментально наблюдается в виде пика оптической проводимости при энергии фотонов $h\nu = 1.9 \text{ эВ}$ [10] и связана с разрушением электронной пары: $E_g = E_b + 2E_a = 2E(\text{BiL}_1\text{O}_6) - [E(\text{BiO}_6) + E(\text{BiL}_2\text{O}_6)]$, где E_b – энергия связи пары [12].

Важно отметить, что присутствие локальных неоднородностей в виде колебаний ионов в двухъямном потенциале является общим характерным признаком и других высокотемпературных сверхпроводников, включая купраты [14–17] и ВТСП на основе железа [18, 19].

Недавно в [20] было предложено новое описание локальной электронной структуры в перовскитоподобных висмутатах $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ на основе существования пространственно разделенной ферми-бозе

смеси. Показано, что два типа носителей заряда, локальные электронные пары (бозоны) и свободные электроны, сосуществуют в металлическом ВКВО с $x \geq 0.37$. Бозоны ответственны как за перенос заряда в исходном полупроводнике BaBiO_3 , так и за сверхпроводимость в металлическом ВКВО, а фермионная подсистема отвечает за наблюдаемый фазовый переход металл–диэлектрик и появление фермижидкого состояния при преодолении порога перколяции ($x \geq 0.37$). Бозоны и фермионы занимают различные типы октаэдрических комплексов BiO_6 и всегда разделены в реальном пространстве. Таким образом, основное состояние BaBiO_3 представляет собой новое квантовое состояние волны парной зарядовой плотности PDW (*pair density wave*). Это принципиально отличается от основного состояния BaBiO_3 , традиционно интерпретируемого в литературе как обычная волна зарядовой плотности CDW (см., например, [21] и ссылки в ней). В BaBiO_3 свободных электронов нет, и проводимость может быть обусловлена только движением локальных электронных пар. Эта возможность была впервые качественно сформулирована на биполярном языке Uchida et al. [10], а затем теоретически подтверждена Taraphder et al. [22].

В работе [21] исследована оптическая проводимость BaBiO_3 и Pb-легированных сверхпроводящих оксидов $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ после фемтосекундного лазерного возбуждения. Было отмечено, что характерные времена релаксации во всех образцах имеют порядок нескольких пикосекунд, что соответствует вероятным процессам разрушения и восстановления CDW и электронному возбуждению через CDW щель. Аналогичные оценки характерных времен были получены в *pump-probe* экспериментах в купратных сверхпроводниках [3].

Наше понимание процессов возбуждения в оксидах на основе BaBiO_3 сильно отличается от предложенного в работе [21]. С нашей точки зрения, щель PDW отличается от щели CDW из-за существования пространственного разделения локальных пар электронов и дырок на октаэдрах BiO_6 и BiL_2O_6 , соответственно. В [21] возбуждение электрона из валентной зоны в зону проводимости через щель CDW рассматривается как в традиционном полупроводнике. Однако в [10] было показано, что оптическая щель в BaBiO_3 кардинально отличается от запрещенной зоны полупроводников. В измерениях спектров оптической проводимости эта щель наблюдается в виде узкого максимума при $\sim 1.9 \text{ эВ}$. Одновременно в спектрах комбинационного рассеяния наблюдается резонансная мода $\omega \approx 570 \text{ см}^{-1}$ с аномально высо-

кой интенсивностью, превышающей интенсивности других мод более, чем на порядок [10], что указывает на возникновение сильной локальной деформации решетки. Это также противоречит простой модели BaBiO_3 как обычного изолятора с волной зарядовой плотности CDW и говорит в пользу предложенного нами состояния PDW. Поэтому мы предполагаем, что лазерное возбуждение через оптическую щель должно приводить к разрушению локальной пары, когда одиночный электрон с октаэдра BiO_6 переходит на соседний октаэдр BiL_2O_6 . В результате образуется другая электронная структура в виде двух одинаковых октаэдров BiL_1O_6 , что должно привести к сильному локальному искажению решетки. Кроме того, на октаэдрах BiL_1O_6 должен появиться локальный магнитный момент. Важно отметить, что оптическое возбуждение также приводит к разрыву электронной пары и в допированных (сверхпроводящих) составах [23]. Однако, вследствие исчезновения активационной энергии ($E_a = 0$) и деформации решетки, величина щели уменьшается до значения $E_g \approx 0.5$ эВ, совпадающего с энергией связи пары E_b [23]. Экспериментальное подтверждение модели [20] может быть получено методами рентгеновской спектроскопии поглощения с временным разрешением на рентгеновском лазере на свободных электронах при фемтосекундном оптическом возбуждении через PDW щель.

Целью настоящей работы является проведение предварительной оценки динамического локального искажения кристаллической решетки, возникающего при фемтосекундном оптическом возбуждении, на основе расчетов из первых принципов зонной структуры, плотности состояний и XAS (*X-ray Absorption Spectroscopy*) спектров исходной и допированной систем на основе BaBiO_3 . В результате показано, что феноменологическая модель [20], основанная на наблюдении двухъямного потенциала колебаний ионов кислорода и существовании двух различных состояний висмута, дает возможность корректно описать электронные свойства высокотемпературных сверхпроводников на основе BaBiO_3 как в основном, так и в оптически возбужденном состояниях.

Теоретическое описание соединений на основе BaBiO_3 в рамках подходов, основанных на теории функционала плотности DFT (*density functional theory*), является возможным ввиду того, что электроны, занимающие $\text{Bi}6s$ - и $\text{O}2p$ -орбитали в соединении BaBiO_3 , являются слабо коррелированными [10]. Так, в [24] при помощи метода LDA + U в базе функций Ванье была описана нестабильность перовскитной кристаллической структуры BaBiO_3 ; в

[25] предложена поляронная модель, описывающая взаимодействие дырочных носителей, находящихся на ионах Bi^{5+} , а в [26] на основе DFT-расчетов была предложена минимальная модель сильной связи для описания зонной структуры и искажений решетки висмутатных перовскитов.

Метод. Расчеты электронной структуры были проведены в рамках теории функционала плотности с использованием метода полного потенциала линейаризованных присоединенных плоских волн (FP-LAPW – *full-potential linearized augmented plane wave*), реализованного в программном пакете Wien2k [27]; для учета обменного корреляционного потенциала была использована градиентная поправка PBE [28, 29] с разрешением 400 k-точек в первой зоне Бриллюэна.

Кристаллическая структура для основного состояния недопированного соединения была взята из [30] (рис. 1а). Структура характеризуется искажением идеальной кубической перовскитной решетки: октаэдры BiO_6 наклонены на угол 11° и имеют разный размер, определяемый заполнением антисвязывающей орбитали $\text{Bi}6s\text{-O}2p_{\sigma^*}$. Большие (2.29 \AA) и мягкие октаэдры BiO_6 чередуются с жесткими октаэдрами BiL_2O_6 меньшего размера (2.11 \AA) ($\underline{\text{L}}_2$ здесь означает незаполненную антисвязывающую орбиталь), имеющими дырочную пару на антисвязывающей орбитали: $-\text{L}_2 - \text{L}_0 - \text{L}_2 - \text{L}_0 -$.

Допирование системы калием приводит к появлению дополнительных дырочных носителей, что сопровождается постепенным замещением больших октаэдров BiO_6 малыми BiL_2O_6 с ростом концентрации калия x [12], а также уменьшением искажений перовскитной решетки и уменьшением параметра решетки [31]. При концентрациях $x \geq 0.37$ возникает структура, которую интегральные экспериментальные методы (нейтронная дифракция) видят как простую кубическую [31], а EXAFS указывает на наличие двухъямного потенциала там, где соседствуют разные октаэдры BiO_6 и BiL_2O_6 , и гармонического потенциала между одинаковыми октаэдрами BiL_2O_6 [12]. В настоящей работе была выбрана степень допирования $x = 0.5$, исходя из соображений простоты моделирования (элементарная ячейка в этом случае увеличивается всего в два раза), а также для устранения возможных эффектов, связанных с неравномерностью распределения калия и бария в кристаллической решетке. При этой степени допирования решетка имеет регулярную структуру из октаэдров с размером 2.20 \AA , при этом на каждом четвертом октаэдре антисвязывающая орбиталь остается заполненной: $-\text{L}_0\text{-L}_2\text{-L}_2\text{-L}_2\text{-}$ (рис. 1с). Для моделирования

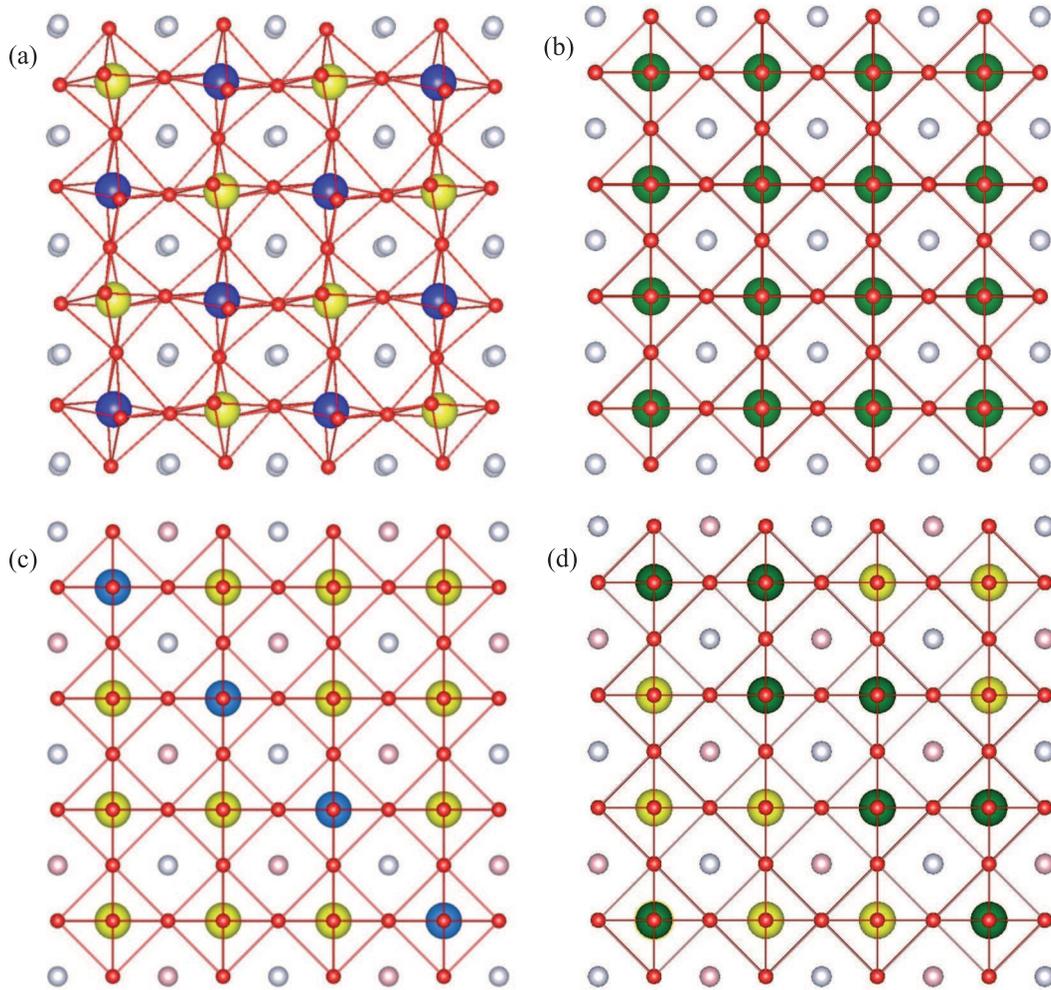


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематичное изображение кристаллической структуры соединения $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ (в проекции на плоскость): (a) – основное состояние, $x = 0$; (b) – возбужденное состояние, $x = 0$; (c) – основное состояние, $x = 0.5$; (d) – возбужденное состояние, $x = 0.5$. Атомы висмута, находящиеся в октаэдрах BiL_2O_6 , показаны желтым, в октаэдрах BiO_6 – голубым, в октаэдрах BiL_1O_6 – зеленым цветом; атомы кислорода и границы октаэдров показаны красным цветом; атомы бария и калия – белым и розовым цветом, соответственно

этой структуры в регулярную кристаллическую решетку были внесены локальные изменения заряда Δ на атомах висмута, повлекшие за собой необходимое перераспределение электронной плотности; значение $\Delta = 0.43$ было выбрано в соответствии с изменением заполнения орбитали $Bi6s$, рассчитанном в [24].

Возбужденное состояние недопированной системы образуется под воздействием лазерного излучения с энергией кванта около 2 эВ: дырочная пара на октаэдре BiL_2O_6 разрывается, и вместо разных октаэдров BiL_2O_6 и BiO_6 образуются два одинаковых октаэдра BiL_1O_6 , при этом их размер в первом приближении оказывается равным полусумме размеров исходных октаэдров, а искажения кубической решетки исчезают: $-L_1-L_1-L_1-L_1-$ (рис. 1b). Воздействие ла-

зерного излучения на допированную систему происходит аналогичным образом, однако в данном случае дырочных пар на антисвязывающей орбитали вдвое меньше, и возникает структура типа $-L_1-L_1-L_0-L_0-$ (рис. 1d), моделирование которой было осуществлено внесением дополнительного заряда $\Delta/2$ на атомы висмута в октаэдрах L_1 .

Спектры рентгеновского поглощения (XAS-спектры) были рассчитаны при помощи “метода остовой дырки” (*core-hole technique*, [32]) с использованием суперячейки $[2 \times 2 \times 2]$ для минимизации взаимодействия возбуждаемого атома с его периодическими изображениями.

Результаты. Результаты расчетов зонной структуры и парциальных плотностей состояний ато-

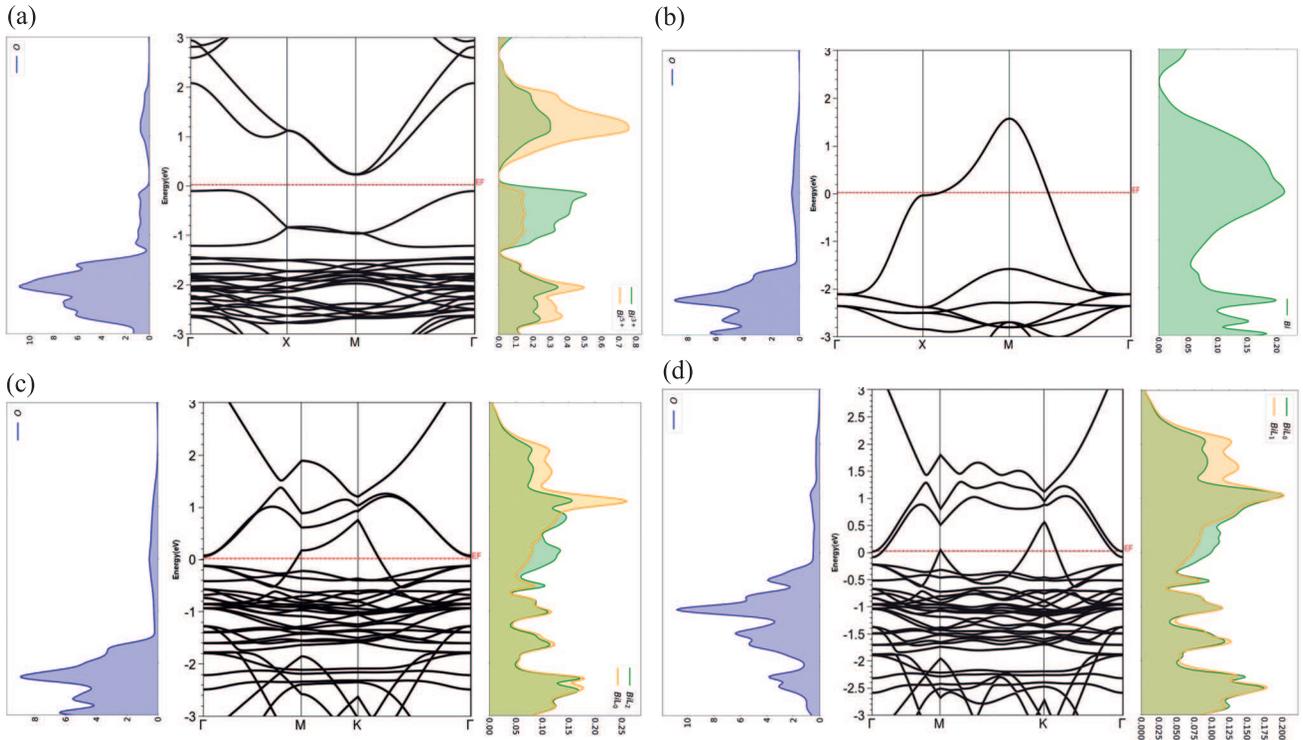


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зонная структура (в центре) и парциальные плотности состояний кислорода (слева) и висмута (справа) вблизи уровня Ферми для соединения $Ba_{1-x}K_xVIO_3$: (a) – основное состояние, $x = 0$; (b) – возбужденное состояние, $x = 0.5$; (c) – основное состояние, $x = 0.5$; (d) – возбужденное состояние, $x = 0.5$. Для рисунков (a), (c), (d) показаны различные вклады в плотность состояний атомов висмута, находящиеся в октаэдрах различного типа. При вычислении плотности состояний параметр гауссова размытия был взят равным 0.03

мов, вносящих основной вклад в зонную структуру вблизи уровня Ферми, показаны на рис. 2. Основное состояние недопированного соединения является изолятором с величиной транспортной щели около 0.3 эВ, что находится в хорошем согласии с результатом $E_a = 0.24$ эВ, полученном в [10]. При возбуждении недопированной системы возникает кристаллическая структура, в которой атомы каждого типа образуют простую кубическую решетку, и наблюдается фазовый переход изолятор (зонный изолятор)–металл. Ввиду того, что главный вклад в плотность состояний вблизи уровня Ферми определяется атомами кислорода, также образующими простую кубическую решетку, зонная структура в районе уровня Ферми становится эквивалентной зонной структуре модели сильной связи на кубической решетке с перескоками на ближайших соседей (рис. 2b). Возбуждение допированной системы также существенно меняет зонную картину в районе уровня Ферми, при этом парциальные плотности состояний висмута и кислорода остаются практически неизменными (рис. 2c, d); система при этом остается в металлическом состоянии.

На рисунке 3 представлены XAS-спектры K -края кислорода для всех рассматриваемых систем. Главным результатом является эволюция спектров для основного состояния с изменением степени допирования (рис. 3a). При допировании системы происходит лишь некоторое перераспределение интенсивности – левый пик смещается в сторону более низких энергий и металлического поведения системы, а интенсивность двух главных пиков практически не изменяется. Данное поведение находится в полном согласии с результатами прецизионных измерений, проведенных в [33], и свидетельствует о том, что дырочные носители при допировании появляются именно на гибридной орбитали $Vi6s-O2p_{\sigma^*}$, а не на отдельной орбитали $O2p$, так как в противном случае на спектре ВКВО на рис. 3a либо возник дополнительный префикс, либо амплитуда первого пика ВКВО была бы существенно больше амплитуды первого пика $BaVIO_3$.

В рамках теории функционала плотности невозможно получить корректные XAS-спектры N -края висмута, так как f -электроны являются сильно коррелированными, и для корректного учета корреля-

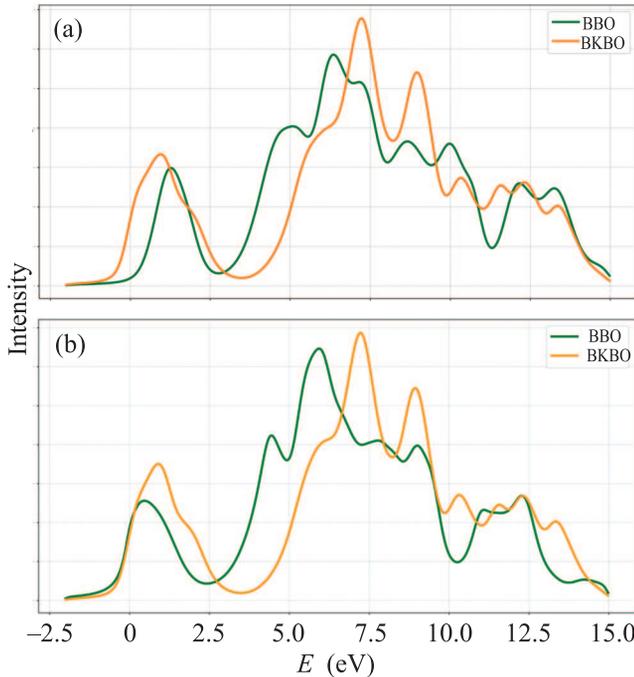


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры рентгеновского поглощения K -края кислорода для основного (а) и возбужденного (б) состояний для недопированного и допированного соединений

ций необходимы другие методы, например, методы, основанные на решении модели сильной связи для соединения $Ba_{1-x}K_xBiO_3$, такие, как вариационное кластерное приближение [34, 35] или динамическая теория среднего поля [36].

Заметим также, что безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия для соединения $BaBiO_3$ $\lambda \approx 0.89$, вычисленная в [26] в рамках минимальной модели сильной связи для висмутатных перовскитов, принимает намного более высокое значение $\lambda = \frac{2g^2}{\hbar\omega_0 W} \approx 4.15$ (здесь g – константа электрон-фононного взаимодействия; W – ширина зоны на уровне Ферми (рис. 1b); $\omega_0 = 180$ К – частота туннелирования атомов кислорода в двухъямном потенциале, ограниченная частотой коллективной вращательной моды) при учете колебаний атомов кислорода в двухъямном потенциале в соответствии с результатами работы [12]. В этой области параметров использование теории Мигдала–Элиашберга для $BaBiO_3$ не является корректным, с одной стороны, из-за неприменимости теории для соответствующей модели Холстейна [37], в рамках которой может быть описана зонная структура $BaBiO_3$ вблизи уровня Ферми [26], и, с другой стороны, из-за наличия биполяронных фаз [10, 25]. Следовательно, для корректного описания сверхпроводящего состояния

требуются методы за пределами стандартной теории Мигдала–Элиашберга [38], учитывающие сильное электрон-фононное взаимодействие (см., например, [39–41]), а также ангармонические эффекты.

Заклучение. При помощи расчетов из первых принципов получены плотности состояний, зонная структура и спектры рентгеновского поглощения для перовскитных ВТСП на основе $BaBiO_3$ в основном и оптически возбужденном состояниях. Рассмотрены случаи с различной степенью допирования $x = 0$ и $x = 0.5$. Соответствующие изменения свойств электронной подсистемы вблизи уровня Ферми в рамках данного подхода удалось корректно описать посредством учета локальных структурных неоднородностей кристаллической решетки. Показано, что дырочные носители при допировании появляются на гибридизированной орбитали $Bi6s-O2p\sigma^*$, что находится в согласии с феноменологической моделью электронной структуры висмутатных ВТСП на основе пространственно-разделенной ферми-бозе смеси [20]. Результаты важны для предварительной оценки динамического локального искажения кристаллической решетки при фемтосекундном оптическом возбуждении методами рентгеновской спектроскопии поглощения с временным разрешением на рентгеновском лазере на свободных электронах. Учитывая, что проявление локальных структурных неоднородностей в виде колебаний ионной в двухъямном потенциале является общим свойством высокотемпературных сверхпроводников, включая купраты и ВТСП на основе железа, предложенный подход может быть полезен для описания основного возбужденного состояния и в высокотемпературных сверхпроводниках других типов.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект # 18-02-40001).

1. J. Orenstein and A. J. Mills, *Science* **288**, 468 (2000).
2. D. M. Newns and C. C. Tsuei, *Nature Physics* **3**, 184 (2007).
3. R. Mankowsky, M. Fechner, M. Forst, A. von Hoegen, J. Porras, T. Loew, G. L. Dakovski, M. Seaberg, S. Möller, G. Coslovich, B. Keimer, S. S. Dhesi, and A. Cavalleri, *Structural Dynamics* **4**, 044007 (2017).
4. S. Rajasekaran, J. Okamoto, L. Mathey, M. Fechner, V. Thampy, G. D. Gu, and A. Cavalleri, *Science* **359**, 575 (2018).
5. J. Okamoto, W. Hu, A. Cavalleri, and L. Mathey, *Phys. Rev. B* **96**, 144505 (2017).
6. F. Schlawin, A. S. D. Dietrich, M. Kiffner, A. Cavalleri, and D. Jaksch, *Phys. Rev. B* **96**, 064526 (2017).

7. A. Cavalleri, *Contem. Phys.* **59**, 31 (2018).
8. A. W. Sleight, J. L. Gillson, and P. E. Bierstedt, *Solid State Commun.* **17**, 27 (1975).
9. L. F. Mattheiss, E. M. Gyogry, and D. W. Jr. Jonson, *Phys. Rev. B* **37**, 3745 (1988).
10. S. Ushida, K. Kitazawa, and S. Tanaka, *Phase Transitions* **8**, 95 (1987).
11. А. П. Менушенков, К. В. Клементьев, П. В. Кошарев, А. А. Мешков, *Письма в ЖЭТФ* **67**, 977 (1998).
12. A. P. Menushenkov and K. V. Klementev, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 3767 (2000).
13. C. M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2713 (1988).
14. A. R. Bishop, D. Mihailovic, and J. Mustre de Leon, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, L169 (2003).
15. J. Mustre de Leon, M. Acosta-Alejandro, S. D. Conradson, and A. R. Bishop, *J. Synchrotron Rad.* **12**, 193 (2005).
16. A. P. Menushenkov, A. V. Kuznetsov, R. V. Chernikov, A. A. Ivanov, V. V. Sidorov, and K. V. Klementev, *Zeitschrift fur Kristallographie* **225**, 487 (2010).
17. A. P. Menushenkov, A. V. Kuznetsov, R. V. Chernikov, A. A. Ivanov, V. V. Sidorov, and K. V. Klementiev, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **27**, 925 (2014).
18. V. G. Ivanov, A. A. Ivanov, A. P. Menushenkov, B. Joseph, and A. Bianconi, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **29**, 3035 (2016).
19. A. Bianconi, A. P. Menushenkov, V. G. Ivanov, A. A. Ivanov, and B. Joseph, *J. of Phys.: Conf. Ser.* **941**, 012058 (2017).
20. A. P. Menushenkov, A. V. Kuznetsov, K. V. Klementiev, and M. Yu. Kagan, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **29**, 701 (2016).
21. D. Nicoletti, E. Casandruc, D. Fu, P. Giraldo-Gallo, I. R. Fisher, and A. Cavalleri, *PNAS* **114**, 9020 (2017).
22. A. Taraphder, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and N. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. B* **52**, 1368 (1995).
23. А. П. Менушенков, М. И. Еремец, И. А. Троян, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 620 (2003).
24. Dm. Korotin, V. Kukolev, A. V. Kozhevnikov, D. Novoselov, and V. I. Anisimov, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 415603 (2012).
25. C. Francini, G. Kresse, and R. Podlucky, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 256402 (2009).
26. A. Khazraie, K. Foyevtsova, I. Efimov, and G. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **97**, 075103 (2018).
27. P. Blaha, G. Schwarz, D. Madsen, K. Kvasnika, and J. Luitz, *Wien2k*, Technical University Wien, Austria (2001).
28. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
29. J. P. Perdew, K. Burke, and Y. Wang, *Phys. Rev. B* **54**, 16533 (1996).
30. B. J. Kennedy, C. J. Howard, K. S. Knight, Z. Zhang, and Q. Zhou, *Acta Crystallogr. B* **62**, 537 (2006).
31. Sh. Pei, J. D. Jorgensen, B. Dabrowski, D. G. Hinks, D. R. Richards, A. W. Mitchell, J. M. Newsam, S. K. Sinha, D. Vaknin, and A. J. Jacobson, *Phys. Rev. B* **41**, 4126 (1990).
32. C. Hébert, *Micron* **38**, 12 (2007).
33. M. Qvarford, V. G. Nazin, A. A. Zakharov et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **54**, 6700 (1996).
34. M. Potthoff, *Eur. Phys. J. B* **32**, 429 (2003).
35. Я. В. Жумагулов, В. А. Кашурников, А. В. Красавин, А. Е. Лукьянов, В. Д. Неверов, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 48 (2019).
36. A. O. Shorikov, M. A. Korotin, S. V. Streltsov, S. L. Skornyakov, Dm. M. Korotin, and V. I. Anisimov, *JETP* **108**, 121 (2009).
37. I. Esterlis, B. Nosarzewski, E. W. Huang, B. Moritz, T. P. Devereaux, D. J. Scalapino, and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **97**, 140501(R) (2018).
38. P. B. Allen and B. Mitrovic, *Solid State Phys.* **37**, 1 (1982).
39. P. Werner and A. J. Millis, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146404 (2007).
40. A. Payeur and D. Senechal, *Phys. Rev. B* **83**, 033104 (2011).
41. В. А. Кашурников, А. В. Красавин, *ЖЭТФ* **132**, 81 (2007).