

# 122 型铁基超导材料晶体结构探析

麻焕锋<sup>1</sup>, 潘敏<sup>2</sup>

(1. 商丘师范学院 物理与电气信息学院, 河南 商丘 476000;

2. 西南交通大学 超导研究开发中心 材料先进技术教育部重点实验室, 四川 成都 610031)

**摘要:**基于第一性原理的密度泛函理论(DFT),采用全势线性增强平面波结合改进的局域轨道方法(APW+lo)和一般梯度近似(GGA),对 122 型铁基超导体系的  $AeT_2Pn_2$  化合物的结构、能量、磁矩、电子能带和电子态密度进行了计算和分析.研究  $AeT_2Pn_2$  体系的超导温度同晶格中的键长、键角、磁性,电子能带和电子态密度之间的关系,从这类体系的晶格结构层面给出了对提高超导温度有利的几个因素.结果表明,相对于 122 型的其他体系具体而言,  $BaFe_2As_2$  系列材料的超导温度相对较高.

**关键词:**晶格结构;密度泛函理论;铁基超导材料;超导临界温度

**中图分类号:** O469      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1672-9102(2014)02-0109-06

## Study on crystal structure of 122 - type Fe - based superconductor

MA Huan - feng<sup>1</sup>, PAN Min<sup>2</sup>

(1. School of Physics and Electrical Information, Shangqiu Normal University, Shangqiu 476000, China;

2. Key Laboratory of Magnetic Levitation Technologies and Maglev Trains (Ministry of Education of China), Superconductivity R&D Center (SRDC), Southwest Jiaotong University, Chengdu, 610031, China)

**Abstract:** Based on the density functional theory, using full - potential linearized augmented plane wave and improved local orbital and GGA method, the structures, energies, magnetism, electronic bands, and densities of states of the superconductivity 122 type  $AeT_2Pn_2$  compounds were calculated and analyzed. The superconducting transition temperature ( $T_c$ ) of  $AeT_2Pn_2$  was analyzed with the bond lengths, bond angles, magnetism, electronic bands, and densities of states. The favorable factors to heighten  $T_c$  for 122 - type Fe - based superconductor was given. The results showed that  $[Fe_2As_2]$  black series have the strongest spin - polarized magnetism, most stable antiferromagnetic structure, obvious splitting of spin - up and down bands at Fermi level, and canonical tetrahedral  $FeAs_4$ , and the  $T_c$  relatively higher than  $[Ni_2As_2]$  and  $[Fe_2P_2]$  series.

**Key words:** lattice; density functional theory; Fe-based superconductor; superconduction critical temperature

超导电性是低温下物质呈现的一种宏观量子现象.2008 年年年初东京工业大学的 Hideo Hosono 等人首先发现了  $LaFeOAs$  母体通过氟掺杂可使其超导临界温度达到 26 K<sup>[1]</sup>, 这为超导体的研究探索开辟了新的研究方向和提供了新的机遇.随后的研究发现,同铜氧化物超导体均含有  $CuO_2$  超导层的结构相似,铁基超导体均含有  $[T_2Pn_2]$  ( $T = Fe, Co, Ni, Pn = As, P$ ) 超导层<sup>[2]</sup>. 根据母体化合物的

原子组成比和晶体结构,这类新型铁基超导材料可以分为以下 4 大体系:1)“1111”体系,以  $LaOFeAs$  为代表;2)“122”体系,以  $BaFe_2As_2$  为代表;3)“111”体系,以  $LiFeAs$  为代表;4)“011”体系,以  $FeSe$  为代表.已有的研究表明,此类超导材料的超导临界温度往往与晶体结构有着直接关系<sup>[2-3]</sup>. 以往也有众多学者针对  $BaFe_2As_2$  及相关体系进行了基于第一性原理的理论计算,其着脚点往往是其电

收稿日期:2013-06-09

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11247295);中央高校基本科研业务费资助项目(SWJTU12CX019)

通信作者:麻焕锋(1980-),男,河南栾川人,博士,副教授,主要从事铁基超导材料和磁性材料理论计算与模拟研究. E-mail: mahuanfeng@sqnc.edu.cn

子结构等方面的理论分析,但关于这类体系晶格结构与超导转变温度之间的探索却很少提及.本文以“122”型超导材料为代表,通过计算晶体的晶体结构和电子结构,探索了超导温度和晶体结构直接的关联.在“122”型超导材料的体系中,实验发现除了对所谓“1”掺杂外,替换过渡族金属和磷族元素也可以改变其超导温度和超导性质.对于母体  $AeFe_2As_2$ ,  $Ae$  可以是 Ca, Sr 和 Ba, 3d 过渡元素的 Fe 可以被 Mn, Co 和 Ni 替代,磷族元素 As 可以被 P 取代<sup>[4-6]</sup>.

## 1 计算方法和模型

本文基于密度泛函理论(DFT),采用全势线性增强平面波结合改进的局域轨道方法(APW +  $lo$ )和一般梯度近似(GGA),利用 WIEN2K<sup>[7]</sup> 软件程序包完成了对  $AeT_2Pn_2$  体系的结构和电子能带的计算研究.在考虑了自旋极化和反铁磁情形下,系统地研究了近 10 种化合物的四方和正交结构的晶格结构,磁结构,电子能带和态密度的变化规律.计算时,价态电子同内壳层电子的能量截断因子取  $-6.0$  Ryd, Ba 的 muffin-tin 半径取  $2.7$  a. u., Ca, Sr, Fe, Ni, Co, As, P 的 muffin-tin 半径均取  $2.0$  a. u. 平面波扩展取  $R_{MT} \times K_{MAX} = 7$ , 布里渊区的  $k$  点取样数为 300. 自洽场计算的收敛判据为总能量变化小于  $0.1$  mRyd.

## 2 晶体结构

三元砷化物  $AeFe_2As_2$  具有准二维的  $ThCr_2Si_2$  型四方晶格结构,空间群  $I4/mmm$ ,  $Z = 2$ . 该结构的基础特征是  $[Fe_2As_2]$  原子团块层结构与碱土  $Ae$  原子沿  $z$  轴交替堆叠,如图 1(a)所示. 晶格内部各个原子的坐标分别是:  $Ae$  原子  $2a(0,0,0)$ ; Fe 原子  $4d(0.5,0,0.5)$ ; As 原子  $4e(0,0,Z_{As,P})$ , 其中  $Z_{As,P}$  称为晶格结构的内参量.

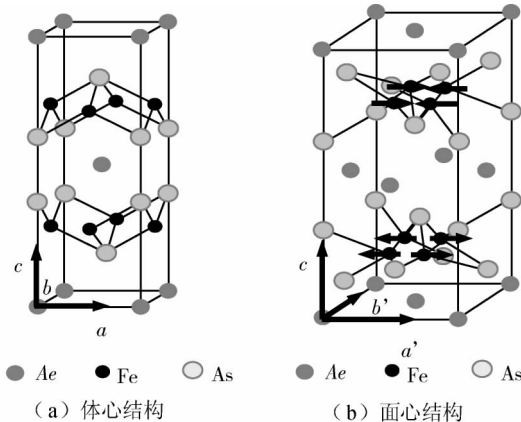


图 1  $AeFe_2As_2$  晶格结构示意图

本文的计算包括 10 种衍生化合物,其中  $Ae =$

Ba, Sr 和 Ca, 过渡金属原子涉及 Fe, Co 和 Ni 原子,磷族原子则涉及 P 原子和 As 原子. 计算所采用的晶胞参数列于表 1.

表 1 (Ba, Sr, Ca)(Fe, Co, Ni)<sub>2</sub>(As, P)<sub>2</sub> 体系的晶胞参数

材料	空间群	$a, b/\text{nm}$	$c/\text{nm}$	$V/\text{nm}^3$	$Z_{-As}$	Ref.
$BaFe_2As_2$	$I4/mmm$	0.396 2	1.301 7	0.204 3	0.354 5	[8]
$SrFe_2As_2$	$I4/mmm$	0.392 4	1.236 4	0.190 4	0.360 0	[9]
$CaFe_2As_2$	$I4/mmm$	0.391 2	1.166 7	0.178 5	0.366 5	[10]
$BaCo_2As_2$	$I4/mmm$	0.395 4	1.265 2	0.197 8	0.351 5	[11]
$BaNi_2As_2$	$I4/mmm$	0.411 2	1.154 0	0.195 1	0.347 6	[9]
$SrNi_2As_2$	$I4/mmm$	0.413 7	1.018 8	0.174 4	0.363 4	[9]
$CaNi_2As_2$	$I4/mmm$	0.406 5	0.994 6	0.164 3	0.369 8	[12]
$BaFe_2P_2$	$I4/mmm$	0.384 0	1.244 2	0.183 5	0.345 6	[12]
$SrFe_2P_2$	$I4/mmm$	0.382 5	1.161 2	0.169 9	0.352 1	[12]
$CaFe_2P_2$	$I4/mmm$	0.385 5	0.998 5	0.148 4	0.364 3	[12]

低温(100 K)时,  $AeFe_2As_2$  会出现反铁磁相, 温度进一步下降到  $\sim 38$  K 以下, 反铁磁相转变为超导相. 近邻铁原子之间相互作用的各向异性将导致图 1(a)所示的体心四方结构转变为图 1(b)所示低温反铁磁相的面心正交结构<sup>[13]</sup>, 正交结构的空问群为  $Fmmm$ . 图 2 为  $AeFe_2As_2$  晶格沿  $c$  轴方向的俯视图, 其中  $a$  和  $b$  为四方结构的晶格参数,  $a'$  (和  $b'$  为正交结构的晶格参数, 分别列于表 2.

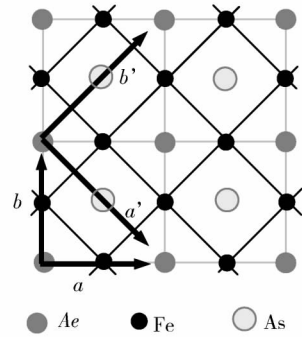


图 2  $AeFe_2As_2$  结构俯视图

计算所用的正交  $AeFe_2As_2$  晶格结构列于表 2.

## 3 磁性质

采用自旋极化和反铁磁 2 种方法分别计算了晶体的能量和磁矩, 列于表 3.

可以看出, 体系的中间层为 FeAs 结构时, 系统反铁磁能量比自旋极化方法计算的能量要低一些, 这与实验中发现这些体系在低温下会发生反铁磁相变符合. 中间层为 CoAs 时反铁磁能量比自旋极化方法计算的能量高, 中间层为 NiAs 和 FeP 时反铁磁能量与自旋极化计算的能量几乎一样与已有的实验中没有在低温条件下发现这些化合物出现反铁磁相变的实际符合.  $AeFe_2As_2$  化合物具有相对

较大的磁矩(3.81 ~ 4.40  $\mu_B$ ), 且主要由强磁性原子 Fe(1.82 ~ 2.15  $\mu_B$ ) 贡献. CoFe 化合物的磁矩相

对较小(0.87  $\mu_B$ ), 而 NiAs 和 FeP 化合物的磁矩几乎可以忽略不计.

表 2 (Ba, Sr, Ca)Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 体系的高温和低温晶格参数

材料	结构	空间群	a/nm	b/nm	c/nm	V/nm <sup>3</sup>	Z <sub>-As</sub>	Ref.
BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	高温相	I4/mmm	0.396 2		1.301 7	0.204 3	0.354 5	[13]
	低温相	Fmmm	0.557 4	0.561 5	1.294 5	0.202 6	0.353 8	
SrFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	高温相	I4/mmm	0.392 4		1.236 4	0.190 4	0.360 0	[14]
	低温相	Fmmm	0.551 8	0.557 8	1.229 4	0.189 2	0.361 2	
CaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	高温相	I4/mmm	0.391 2		1.166 7	0.178 5	0.366 5	[15]
	低温相	Fmmm	0.545 8	0.553 1	1.168 3	0.176 3	0.368 9	

表 3 (Ba, Sr, Ca)(Fe, Co, Ni)<sub>2</sub>(As, P)<sub>2</sub> 的 2 种方法计算的能量, 居域磁矩和总磁矩 M / ( $\mu_B$ /f. u.)

材料	空间群	计算方法	能量	M <sub>tot</sub>	M <sub>(Ba, Sr, Ca)</sub>	M <sub>(Fe, Co, Ni)</sub>	M <sub>(As, P)</sub>
BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-30 414.473 6	3.81	0.01	1.92	-0.06
	Fmmm	自旋极化	-30 414.474 4	3.56	0.01	1.82	-0.07
	Fmmm	反铁磁	-30 414.482 5	0.00	0.00	0.00	0.00
SrFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-20 495.411 0	3.85	0.01	1.93	-0.06
	Fmmm	自旋极化	-20 495.412 2	3.82	0.01	1.90	-0.05
	Fmmm	反铁磁	-20 495.417 9	0.00	0.00	0.00	0.00
CaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-15 496.496 6	4.24	0.02	2.08	-0.04
	Fmmm	自旋极化	-15 496.498 6	4.40	0.02	2.15	-0.03
	Fmmm	反铁磁	-15 496.500 1	0.00	0.00	0.00	0.00
BaCo <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-30 897.206 1	0.87	0.01	0.42	-0.01
	I4/mmm	反铁磁	-30 897.204 6	0.00	0.00	0.00	0.00
BaNi <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-31 406.642 9	0.00	0.00	0.00	0.00
	I4/mmm	反铁磁	-31 406.643 0	0.00	0.00	0.00	0.00
SrNi <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-21 487.586 7	0.00	0.00	0.00	0.00
	I4/mmm	反铁磁	-21 487.586 9	0.00	0.00	0.00	0.00
CaNi <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-16 488.681 8	0.00	0.00	0.00	0.00
	I4/mmm	反铁磁	-16 488.681 9	0.00	0.00	0.00	0.00
BaFe <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-22 738.645 0	0.06	0.00	0.03	0.00
	I4/mmm	反铁磁	-22 738.645 1	0.00	0.00	0.00	0.00
SrFe <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-12 819.590 7	0.07	0.00	0.03	0.00
	I4/mmm	反铁磁	-12 819.590 7	0.00	0.00	0.00	0.00
CaFe <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	I4/mmm	自旋极化	-7 820.694 0	0.03	0.00	0.02	0.00
	I4/mmm	反铁磁	-7 820.694 1	0.00	0.00	0.00	0.00

### 4 电子结构

限于篇幅的原因, 这里只给出了 CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, CaNi<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 和 CaFe<sub>2</sub>P<sub>2</sub> 等化合物自旋向上和自旋向下的能带结构. 可以看出在费米面附近 CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 自旋向下能带的能量比自旋向上的能量高 2.5 eV. 而 CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 和 CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 自旋向上与向下的能带结构基本相同.

图 4 给出了 CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, CaNi<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 和 CaFe<sub>2</sub>P<sub>2</sub> 这 3 个体系的总态密度以及各个原子的分态密度. 这 3 种化合物在费米面附近的态密度主要由 Fe 原子和 Ni 原子贡献, Ca 原子对费米面附近态密度的贡

献很小, 而 As 及 P 原子对态密度贡献主要在费米面以下 12 eV 和 6 eV 附近. CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 的自旋向上与自旋向下态密度的形状差异较大, 而 CaNi<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 和 CaFe<sub>2</sub>P<sub>2</sub> 的自旋向上与自旋向下态密度的形状非常相似, 且费米面处的自旋态密度均较低. 电子能带结构和态密度的特点与计算得到 FeAs 化合物具有较大磁矩, 而 NiAs 和 FeP 化合物的磁矩几乎可以忽略不计的结果相对应. CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 的费米面处, 不高但是较宽的自旋向上态密度峰横跨费米面, 峰的边沿陡峭且右边沿的能量仅比费米面略高; 虽窄但是较高的自旋向下态密度峰能量比费米面略高, 其陡峭的左边沿正好位于费米面处. 这样

的态密度分布具有不稳定的特点,掺杂以及温度压力等外部环境的变化有可能导致费米面处态密度

较大的变化,这个特点与文献中 FeAs 类化合物磁性性质不稳定的描述符合.

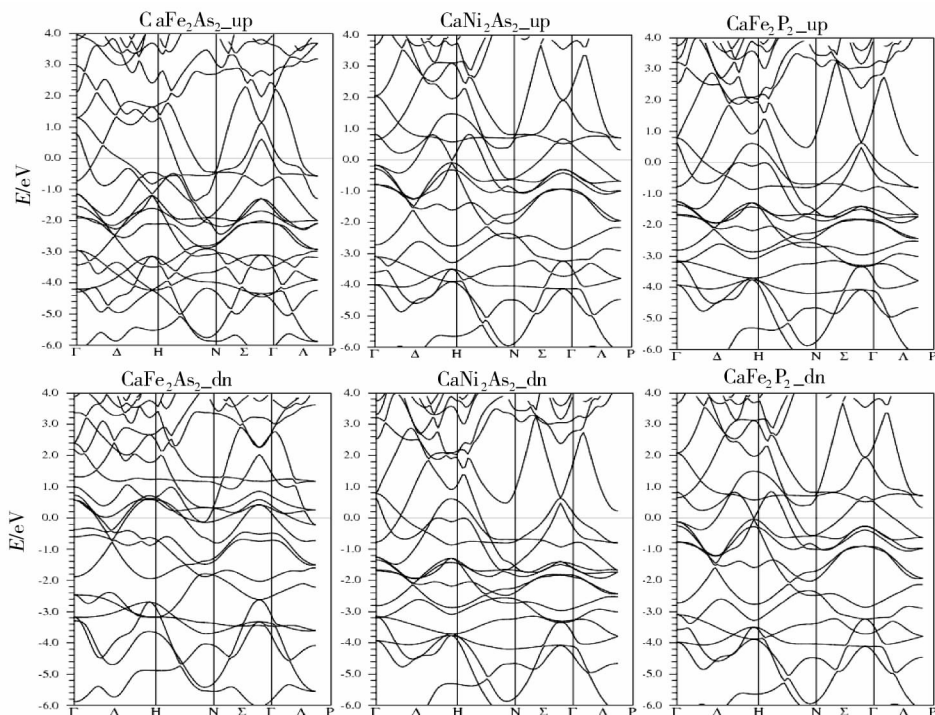


图3  $\text{Ca}(\text{Fe},\text{Ni})_2(\text{As},\text{P})_2$  的电子能带图

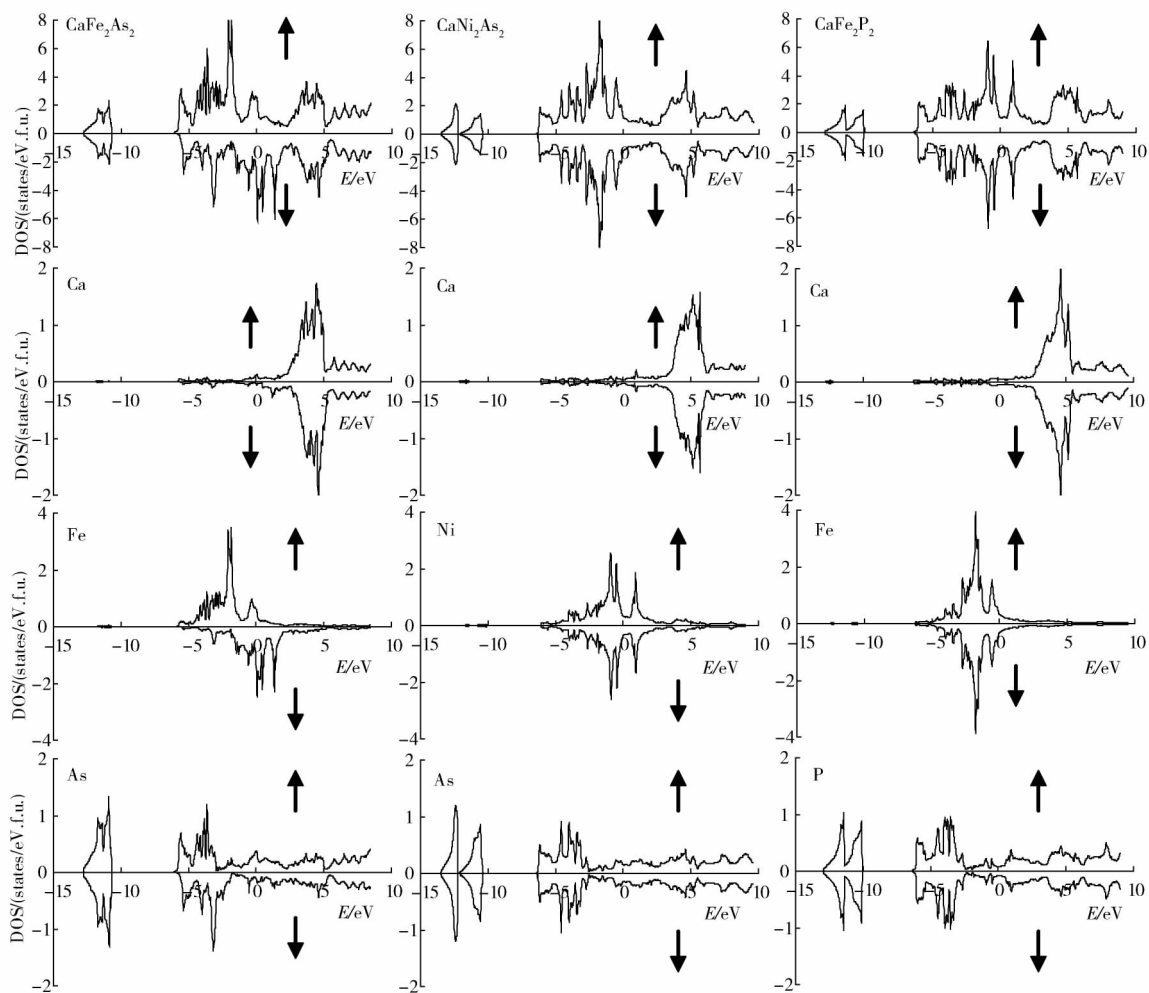


图4  $\text{CaFe}_2\text{As}_2$ ,  $\text{CaNi}_2\text{As}_2$  和  $\text{CaFe}_2\text{P}_2$  的总态密度以及各个原子的分态密度

### 5 晶格内结构与超导性质

图5为Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>层内部的FeAs<sub>4</sub>四面体结构。每一个FeAs<sub>4</sub>结构包含6个As-Fe-As键角,其中2个等价角的角平面垂直于[001]平面,记为α角;另外4个等价角斜交于[001]平面,记为β角。

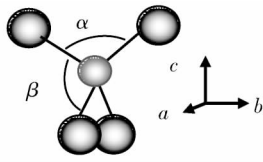


图5 FeAs<sub>4</sub>四面体结构中的键角

表4分别列出了四方(tetragonal)和正交(orthorhombic)晶格结构与Fe,As及其取代原子有关的键长和键角。中的Pn-Pn键长是指晶格参数c轴方向最近邻的磷族原子(As或P)的间距,表征了AeT<sub>2</sub>Pn<sub>2</sub>晶体中2个T<sub>2</sub>Pn<sub>2</sub>块层之间的距离,通常与夹在其中的碱土元素Ae的原子半径直接相关。比如,Ba的原子半径(r<sub>Ba</sub>=0.278 nm)大于Sr(r<sub>Sr</sub>=0.245 nm)和Ca的原子半径(r<sub>Ca</sub>=0.223 nm),BaT<sub>2</sub>Pn<sub>2</sub>中的Pn-Pn间的键长大于(Ca,Sr)T<sub>2</sub>Pn<sub>2</sub>的Pn-Pn键长。通常键长应当随着原子序数的增大而增大。但是因为这里的过渡金属原子T的半径(r<sub>Fe</sub>=0.172 nm,r<sub>Co</sub>=0.167 nm,

和r<sub>Ni</sub>=0.162 nm)随原子序数减小,所以[Co<sub>2</sub>As<sub>2</sub>]中Co-Co的键长与[Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>]中的Fe-Fe键长(0.28 nm)差不多,[Ni<sub>2</sub>As<sub>2</sub>]中的Ni-Ni键长(0.29 nm)却要大些。P的非金属性比As强,原子间较强的共价相互作用会使[FePn<sub>4</sub>]四面体的体积收缩,因此[Fe<sub>2</sub>P<sub>2</sub>]中四面体体积密切相关的Fe-Fe键长(0.27 nm)比[Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>]中的小。[T<sub>2</sub>Pn<sub>2</sub>]中的T-Pn键长一般随着T和Pn的原子序数的增大而增加,其中[Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>]中的Fe-As键长最长,为大约0.24 nm。在四面体场中,Fe原子的3d轨道分裂为t<sub>2</sub>和e<sub>2</sub>2组,其中能量较高的3个t<sub>2</sub>轨道可以与4s轨道形成包含4个电子具有四面体取向的sd<sup>3</sup>杂化,电子数大于sd<sup>3</sup>杂化轨道数将使TPn<sub>4</sub>偏离四面体结构。因此FeAs化合物的FeAs<sub>4</sub>结构最接近于正四面体,其As-Fe-As键角α和β均近似于109°28′。CoAs和NiAs化合物中的TAs<sub>4</sub>结构均偏离正四面体,其中NiAs<sub>4</sub>结构偏离的程度大于CoAs<sub>4</sub>。较强的P原子间相互作用,也使FeP<sub>4</sub>结构因收缩的各向异性而偏离正四面体。对称的FeP<sub>4</sub>四面体结构使Fe原子得以保持较强的磁矩。CoAs<sub>4</sub>和NiAs<sub>4</sub>结构中电子数增加将使能带能量降低,因此Co和Ni原子磁矩为零。FeP<sub>4</sub>结构中的Fe原子磁矩则因四面体结构的收缩使电子更趋于配对而趋于消失。

表4 AeT<sub>2</sub>Pn<sub>2</sub>晶体中的键长和键角

材料	键长 Pn-Pn/nm		键长 T-T/nm		键长 T-Pn/nm		α/(°)		β/(°)	
BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	0.378 8	0.378 5	0.280 2	0.280 7 0.278 7	0.240 3	0.239 1	111.06	111.62	108.68	108.71
SrFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	0.346 2	0.341 4	0.277 5	0.278 9 0.275 9	0.239 1	0.238 7	110.24	110.54	108.94	109.54
CaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	0.311 5	0.306 3	0.276 6	0.272 9 0.276 6	0.238 8	0.238 2	108.86	110.41	109.00	190.24
BaCo <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	0.375 8		0.279 6		0.235 8		113.99		107.26	
BaNi <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	0.351 7		0.290 8		0.234 4		122.57		103.35	
SrNi <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	0.278 4		0.292 6		0.236 9		121.64		103.75	
CaNi <sub>2</sub> As <sub>2</sub>	0.259 0		0.287 4		0.235 6		119.24		104.82	
BaFe <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	0.384 2		0.271 5		0.225 9		116.44		106.10	
SrFe <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	0.343 5		0.270 5		0.225 0		116.41		106.12	
CaFe <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	0.271 0		0.272 6		0.224 0		118.74		105.05	

图6为(Ba,Sr,Ca)(Fe,Ni)<sub>2</sub>(As,P)<sub>2</sub>体系的超导转变温度。其中BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>通过空穴掺杂可以获得最高的超导转变温度(~38 K),而CaNi<sub>2</sub>As<sub>2</sub>的超导转变温度只有0.62 K。可以看出,AeT<sub>2</sub>Pn<sub>2</sub>化合物中的原子序数大且原子半径小的碱土金属元素Ae对超导有利,其超导临界转变温度T<sub>c</sub>依次为Ba>Sr>Ca。具有较高超导临界转变温度的

FeAs类化合物,具有更接近于对称四面体的FeAs<sub>4</sub>结构,其费米面附近电子能带和态密度分布使其具有较强但是不稳定的磁性和反铁磁性的特点。掺杂以及温度压力等外部环境的变化对FeAs类化合物的电子能带,态密度分布以及磁结构的影响和机理,及其与超导性质的关系值得关注。

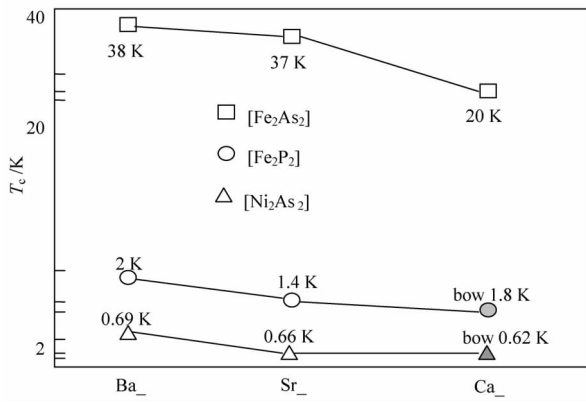


图6  $AeT_2Pn_2$  体系的超导转变温度

## 6 结论

基于第一性原理的密度泛函理论(DFT),采用全势线性增强平面波结合改进的局域轨道方法(APW+lo)和一般梯度近似(GGA),对新型超导体系的 $AeT_2Pn_2$ 化合物的结构,能量,磁矩,电子能带和电子态密度进行了计算和分析.研究 $AeT_2Pn_2$ 体系的超导温度同晶格中的键长,键角,磁性,电子能带和电子态密度之间的关系.结果表明,对提高超导温度有利的因素有:1)较大的 $[T_2Pn_2]$ 层间距;2)强的自旋极化磁性;3)反铁磁计算的能量低于自旋极化计算的能量,使反铁磁结构比自旋极化的铁磁结构稳定;4)费米面附近,自旋向上的能带的能量比自旋向下能带的能量高;5)更为规范的正四面体 $TPn_4$ .具体而言,Ba的原子序数大且原子半径小,所以具有Ba原子的系列其超导温度相对较高. $[Fe_2As_2]$ 系列具有强的自旋极化磁性和反铁磁结构,反铁磁结构比自旋极化的铁磁结构稳定,拥有较为对称的正四面体 $FeAs_4$ 结构.所以 $[Fe_2As_2]$ 系列材料的超导温度也相对较高.

## 参考文献:

[1] Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, et al. Iron-based layered superconductor  $La[O_{1-x}F_x]FeAs$  ( $x = 0.05 - 0.12$ ) with  $T_c = 26K$  [J]. *Journal of American Chemical Society*, 2008, 130(11): 3296 - 3297.

[2] Stewart G R. Superconductivity in iron compounds [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2011, 83(4): 1589 - 1609.

[3] Rotter M, Tegel M, Johrendt D, et al. Spin-density-wave anomaly at 140 K in the ternary iron arsenide  $BaFe_2As_2$  [J]. *Physical Review B*, 2008, 78(2): 020503(R) - 020505(R).

[4] Dai Y M, Xu B, Shen B, et al. Hidden  $T$  - linear scattering rate in  $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$  revealed by optical spectroscopy [J]. *Physical Review Letters*, 2013, 111(11): 111007 - 111008.

[5] Walmsley P, Putzke C, Malone L, et al. Quasiparticle mass enhancement close to the quantum critical point in  $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$  [J]. *Physical Review Letters*, 2013, 110(25): 257002 - 257003.

[6] Jiang S, Xing H, Xuan G F, et al. Superconductivity up to 30 K in the vicinity of the quantum critical point in  $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$  [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, 21(38): 382203 - 382203.

[7] Blaha P, Schwarz K, Madsen G K H, et al. WIEN2k, an augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties [R]. *Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria*, 2001.

[8] Rotter M, Tegel M, Johrendt D, et al. Superconductivity at 38 K in the iron arsenide  $(Ba_{1-x}K_x)Fe_2As_2$  [J]. *Physical Review Letters*, 2008, 101(10): 107006 - 107007.

[9] Chen G F, Li Z, Li G, et al. Superconductivity in hole-doped  $(Sr_{1-x}K_x)Fe_2As_2$  [J]. *Chinese Physics Letters*, 2008, 25(6): 3403 - 3405.

[10] Ni N, Bud'ko S L, Kreyssig A, et al. Anisotropic thermodynamic and transport properties of single crystalline  $(Ba_{1-x}K_x)Fe_2As_2$  ( $x = 0$  and  $0.45$ ) [J]. *Physical Review B*, 2008, 78(1): 014507 - 014508.

[11] Sefat A S, Jin R Y, McGuire M A, et al. Superconductivity at 22 K in Co-doped  $BaFe_2As_2$  crystals [J]. *Physical Review Letters*, 2008, 101: 117004 - 117005.

[12] Ronning F, Kurita N, Bauer E D, et al. The first order phase transition and superconductivity in  $BaNi_2As_2$  single crystals [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, 20(34): 342203 - 342207.

[13] Hoffmann R, Zheng C. Making and breaking bonds in the solid state: the thorium chromium silicide  $(ThCr_2Si_2)$  structure [J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 1985, 89(20): 4175 - 4181.

[14] Johrendt D, Pöttgen R. Superconductivity, magnetism and crystal chemistry of  $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$  [J]. *Physica C: Superconductivity*, 2009, 469(9-12): 332 - 339.

[15] Li H, Tian W, Zarestky J L, et al. Magnetic and lattice coupling in single-crystal  $SrFe_2As_2$ : a neutron scattering study [J]. *Physical Review B*, 2009, 80(5): 054407 - 054408.