

# Спиновое состояние железа — управляющий параметр железосодержащих ВТСП: зависимость энергии основного состояния, энергий фононов и позиций атомов от спинового состояния иона железа в FeTe

Ю.Г. Пашкевич, Т.Н. Шевцова, А.А. Гусев

*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины  
ул. Розы Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина  
E-mail: pashkevi@fti.dn.ua*

В.П. Гнездилов

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина*

P. Lemmens

*Institute for Condensed Matter Physics, TU Braunschweig, D-38106 Braunschweig, Germany*

Статья поступила в редакцию 18 мая 2012 г.

Методом функционала плотности рассчитаны электронная структура, энергия основного состояния, фононные частоты в центре и на границе зоны Бриллюэна, а также распределение магнитного момента по  $d$ -орбиталям железа в магнитоупорядоченной фазе FeTe в зависимости от величины магнитного момента — спинового состояния иона железа. Показано, что минимум энергии основного состояния достигается при определенном распределении магнитного момента по орбиталям и при определенном значении спинового состояния иона железа. Численно исследовано влияние нового вида взаимодействия «спиновое состояние–решетка» на фононную подсистему. Показано, что наиболее значительное изменение при изменении спинового состояния претерпевают фононы высокочастотной части спектра. Для описания свойств базовых соединений железосодержащих ВТСП предложен интегральный параметр — спиновое состояние иона железа.

Методом функціонала щільності розраховано електронну структуру, енергію основного стану, фононні частоти в центрі та на межі зони Брилюэна, а також розподіл магнітного моменту по  $d$ -орбіталях заліза в магнітоупорядкованій фазі FeTe залежно від величини магнітного моменту — спинового стану іона заліза. Показано, що мінімум енергії основного стану досягається при певному розподілі магнітного моменту по орбіталях і при певному значенні спинового стану іона заліза. Чисельно досліджено вплив нового виду взаємодії «спіновий стан–ґратка» на фононну підсистему. Показано, що найбільш значну зміну при зміні спинового стану зазнають фонони високочастотної частини спектра. Для опису властивостей базових сполучень залізівмісних ВТНП запропоновано інтегральний параметр — спіновий стан іона заліза.

PACS: 74.25.Kc Фононы;

74.70.-b Сверхпроводящие материалы, кроме купратов;

63.20.D- Фононные состояния и зоны, нормальные моды и дисперсия фононов.

Ключевые слова: спиновое состояние, энергия основного состояния, электронная структура, фононы, спин-решеточное взаимодействие, переход Мотта.

## Введение

Взаимодействие или сосуществование сверхпроводящего и магнитного параметров порядка является ключевым вопросом исследований высокотемпературной сверхпроводимости как для купратных, так и для железосодержащих ВТСП. Однако, в отличие от купратов, базовые (недопированные) соединения железосодержащих сверхпроводников демонстрируют значительные вариации абсолютной величины магнитного параметра порядка [1]. Так, в FeSe в отсутствие давления магнитный момент на ионах железа и, соответственно, магнитный порядок отсутствует [2]. При антиферромагнитном упорядочении в RFeAsO (R — редкоземельный ион) и MFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> (M = Sr, Ba, Ca) магнитный момент Fe не превышает 1  $\mu_B$  [1]. В соединении Fe<sub>1+ $\delta$</sub> Te величина магнитного момента колеблется в зависимости от величины  $\delta$  вблизи 2  $\mu_B$ , а в недавно открытых M<sub>2</sub>Fe<sub>4</sub>Se<sub>5</sub> (M = K, Cs, Rb) она достигает рекордного значения 3,3  $\mu_B$  [3]. При этом основным структурным элементом всех известных к настоящему времени железосодержащих сверхпроводников является слой ионов железа в тетраэдрическом окружении FeCh<sub>4</sub> (Ch = As, Te, Se). Ясно, что, несмотря на слоистую структуру, подобные вариации магнитного момента находятся далеко за пределами квантовых перенормировок, ожидаемых для квазидвумерных магнетиков, и хорошо известных для базовых соединений купратных ВТСП [4].

Отметим, что в базовом (недопированном) составе этих соединений ион железа пребывает в номинально двухвалентном состоянии, являясь, подобно трехвалентному иону кобальта, 3d<sup>6</sup>-ионом. Известно, что в перовскитоподобных кобальтатах энергия Хунда сопоставима с энергией кристаллического поля, из-за чего энергии трех возможных спиновых состояний иона кобальта: низкоспинового (LS, S = 0), среднеспинового (IS, S = 1) и высокоспинового (HS, S = 2) являются практически вырожденными. Наличие нестабильности спинового состояния приводит к достаточно сложной картине поведения физических свойств этих соединений [5,6].

Как следует из вышеприведенных данных, для железосодержащих ВТСП изменения величины магнитного момента, скорее, связаны с изменением спинового состояния иона Fe, которое даже в одном и том же окружении FeSe<sub>4</sub> может меняться от низкоспинового (в FeSe) до высокоспинового (в Rb<sub>2</sub>Fe<sub>4</sub>Se<sub>5</sub>). Изменение спинового состояния влечет за собой перераспределение электронов по d-орбиталям, т.е. оказывает определяющее влияние на проводящие и магнитные свойства, а также на динамику решетки. Таким образом, спиновое состояние иона железа представляет собой дополнительную степень свободы и может служить некоторым интегральным параметром, определяющим физические свойства железосодержащих ВТСП. Суще-

ственным является то, что данный параметр представляет собой величину полного магнитного момента электронов, распределенных по волновым d-функциям иона железа, и, таким образом, может быть определен как для состояния металла, так и для состояния изолятора.

В настоящей работе предложено использовать этот параметр вместо обычно исследуемого параметра «z-координаты — высоты иона пниктида (халькогенида) относительно плоскости ионов Fe» или изменения геометрии FeCh<sub>4</sub> тетраэдра (углов связи Fe–Ch–Fe) [7–11]. В качестве иллюстрации показано, что энергия основного состояния в FeTe как функция магнитного момента железа M(Fe) имеет минимум при значениях момента, наблюдаемых в эксперименте. При этом частоты фононов сильно зависят от величины M(Fe) и, разумеется, z-координата Te также является функцией момента. Более того, плотность электронных состояний на уровне Ферми сильно меняется в сторону уменьшения при увеличении магнитного момента, указывая на существование моттовского перехода металл–диэлектрик по параметру «спиновое состояние иона железа».

Семейство Fe<sub>1+y</sub>Se<sub>x</sub>Te<sub>1-x</sub> занимает особое место среди железосодержащих сверхпроводников. Во-первых, члены этого семейства имеют очень простой состав, их кристаллическая структура состоит из слоев FeSe<sub>x</sub>Te<sub>1-x</sub>. Во-вторых, Fe<sub>1+ $\delta$</sub> Te имеет необычную биколлинеарную антиферромагнитную структуру с магнитным вектором  $k_I = (\pi/a, 0)$  в плоскости слоев, тогда как в RFeAsO наблюдается  $k_0 = (\pi/a, \pi/a)$  [12]. Такое магнитное упорядочение связано с редким явлением (орторомбической) магнитострикции чисто обменной природы [13]. Наконец, замечательной особенностью Fe<sub>1+ $\delta$</sub> Se<sub>x</sub>Te<sub>1-x</sub> является большой магнитный момент, достигающий 2,5  $\mu_B$ /Fe для Fe<sub>1,05</sub>Te [14]. Тот факт, что в FeTe реализуется спиновое состояние ионов Fe, близкое к промежуточному (S = 1), означает, что орбитальные степени свободы ионов Fe играют важную роль в этом соединении [15,16].

## Методика расчета

Для соединения FeTe в антиферромагнитной магнитоупорядоченной фазе были рассчитаны: электронная структура, фононы в центре и на границе  $k_I = (\pi/a, 0, 0)$  зоны Бриллюэна, зависимость энергии основного состояния, а также зависимости z-координат железа и теллура от величины магнитного момента железа. В качестве стартовых структурных данных взяты данные эксперимента для Fe<sub>1,05</sub>Te при 2 K [14], соответствующие наличию моноклинных искажений и небольшой гофрировке плоскости железа (группа симметрии кристалла P2<sub>1</sub>/m с двумя формульными единицами на ячейку). При этом, магнитная ячейка в наших расчетах представляла собой удвоенную по оси a кристаллографическую моноклинную ячейку. Расчеты проводились

в рамках теории функционала плотности с помощью программы *elk* [17] — полнопотенциального полно-электронного кода, использующего метод присоединенных плоских волн. Для обменно-корреляционного потенциала использовали обобщенное градиентное приближение (GGA) в форме Perdew–Burke–Ernzerhof [18]. Расчет проводили для сетки  $4 \times 8 \times 6$ , что соответствует 100 точкам в неприводимой части зоны Бриллюэна. Для упрощения расчетов сделано предположение, что магнитные моменты на железе параллельны оси  $c$ , причем биколлинейное антиферромагнитное расположение моментов соответствует таковому в реальной магнитной структуре [14]. Мы не учитывали здесь удвоение магнитной ячейки по оси  $c$ .

Расчеты проводили для нескольких фиксированных значений магнитного момента железа в диапазоне от 1,0 до 2,5 магнетонов Бора, но всегда при фиксированной постоянной решетки FeTe. Для каждого значения магнитного момента проводили оптимизацию структуры, т.е. минимизировали силы, действующие на атомы в ячейке. При этом изменялись свободные координаты атомов при фиксированных постоянных решетке. Обычно этого условия достаточно для того, чтобы реализовалось состояние с минимальной энергией. Однако при наличии нестабильности спинового состояния возникает необходимость поиска минимума энергии также и по дополнительной степени свободы — спиновому состоянию железа, т.е. сравнения энергий основного состояния уже оптимизированных структур при различных  $M(\text{Fe})$ .

### Результаты и их обсуждение

Зависимость энергии основного состояния от значения магнитного момента представлена на рис. 1(а). При неизменных значениях постоянных решетки данная зависимость имеет минимум, приблизительно соответствующий величине магнитного момента 2,1  $\mu_B$ , что находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными для  $\text{Fe}_{1+\delta}\text{Te}$  с малым  $\delta$  [19].

В результате оптимизации изменялась  $z$ -координата обоих атомов Fe и Te. Полученные зависимости представлены на вставке к рис. 1(а). Увеличение  $z$ -координаты с ростом магнитного момента носит практически линейный характер как для Fe, так и для Te, но для последнего диапазон изменения координаты почти на порядок больше. Известно, что в  $3d^6$ -ионах в октаэдрическом окружении ионный радиус увеличивается при увеличении спинового состояния. Следовательно, полученное нами увеличение объема тетраэдра при увеличении ионного радиуса железа является ожидаемым результатом. Возникновение отличной от нуля  $z$ -координаты Fe является следствием перехода из тетрагональной в моноклинную фазу и, таким образом, может определять степень моноклинных искажений даже

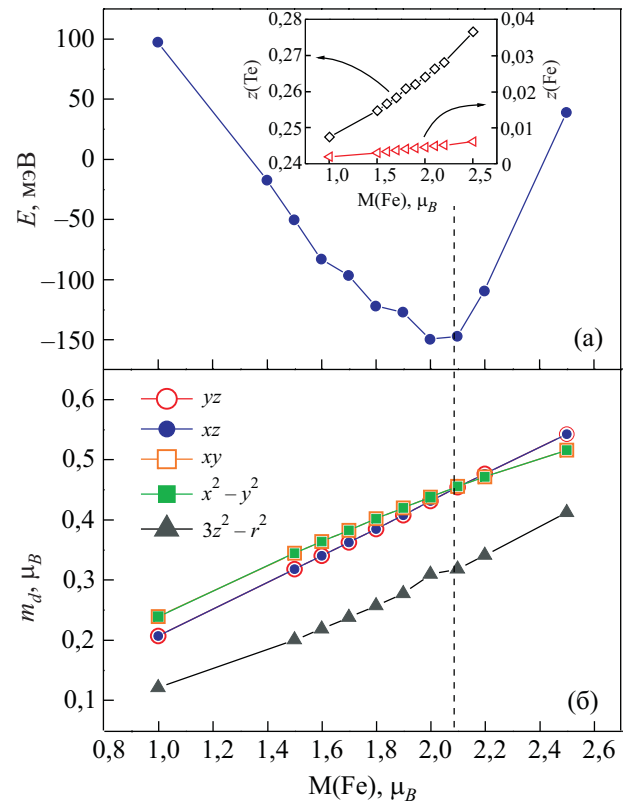


Рис. 1. Зависимость энергии основного состояния от магнитного момента иона Fe, показано существование минимума при значении момента 2,1  $\mu_B$ . (Точки соединены на глаз.) На вставке показаны изменения  $z$ -координаты железа и теллура при изменении величины полного магнитного момента (а). Распределение магнитного момента  $m_d$  по  $d$ -орбиталям при увеличении общего момента. Значения  $m_d$  для разных  $d$ -орбиталей показаны разными символами. Во всем исследуемом диапазоне моменты  $yz$ - и  $xz$ -орбиталей, а также  $xy$ - и  $x^2 - y^2$ -орбиталей совпадают. Вертикальная линия проведена для удобства и соответствует совпадению моментов четырех орбиталей ( $yz$ -,  $xz$ -,  $xy$ - и  $x^2 - y^2$ ) при значении полного момента 2,1  $\mu_B$  (б).

при фиксированных постоянных решетке. Возрастание  $z(\text{Fe})$  с ростом  $M(\text{Fe})$  свидетельствует о магнитной природе перехода из тетрагональной в моноклинную фазу.

Распределение магнитного момента по  $d$ -орбиталям показано на рис. 1(б). Магнитный момент орбитали  $m_d$  определяется по формуле

$$m_d = -\mu_B \int_{-\infty}^{E_F} (\rho_{d\uparrow}(E) - \rho_{d\downarrow}(E)) dE,$$

где  $\rho_{d\uparrow,\downarrow}(E)$  — плотность  $d$ -состояния с энергией  $E$  на атом для спина «вверх» и «вниз» соответственно;  $E_F$  — энергия Ферми. В соответствии с теорией кристаллического поля для  $3d^6$ -ионов в кристаллическом поле тетраэдра  $e$ -орбитали расположены ниже по энер-

гии по сравнению с  $t$ -орбиталями. Меньшее значение момента для  $3z^2 - r^2$ -орбитали свидетельствует о том, что разность между заполнением состояний со спином «вверх» и спином «вниз» мала по сравнению с  $xz$ -,  $xz$ -,  $yz$  —  $t$ -орбиталями, а также с  $x^2 - y^2$  —  $e$ -орбиталью. Несколько неожиданным является то, что орбитали  $xz$ -, и  $x^2 - y^2$ -, лежащие в плоскости  $ab$ , демонстрируют одинаковый магнитный момент, как и две  $t$ -орбитали  $xz$ - и  $yz$ -, выходящие из плоскости. При малом общем моменте железа более заполненными оказываются  $xz$ -, и  $yz$ -орбитали по сравнению с  $xz$ - и  $x^2 - y^2$ -орбиталями. Это несколько анизотропное в пространстве распределение момента исчезает при значении общего магнитного момента  $2,1 \mu_B$  (рис. 1(б)). Таким образом, минимум энергии основного состояния достигается при равенстве магнитных моментов орбиталей  $xz$ -,  $xz$ -,  $yz$ - и  $x^2 - y^2$ -. Вопрос о том, является ли это условие необходимым для достижения минимума энергии, требует отдельного рассмотрения.

Изменение спинового состояния связано с перераспределением заполнения орбитальных степеней свободы в общем, а также с изменением геометрии  $FeCh_4$  тетраэдра в частности, поэтому можно ожидать нового явления — взаимодействия «спиновое состояние–решетка» в отличие от известного «спин-решеточного» взаимодействия. Из-за участия большого числа задействованных орбитальных и спиновых степеней свободы запись такого взаимодействия в аналитическом виде была бы чрезвычайно громоздкой. В настоящей работе это явление исследуется численно. На рис. 2 показаны результаты расчета зависимости частот фононов в  $\Gamma$ -точке зоны Бриллюэна от магнитного момента железа.

На рис. 2 видно, что при изменении спинового состояния железа существенным образом меняется высокочастотная часть спектра и слабо меняется низкочастотная. Отметим, что высокочастотная часть спектра в  $FeTe$  сформирована преимущественно колебаниями  $Fe$ , как более легкого элемента в сравнении с  $Te$ . Полученный значительный и избирательный эффект не может быть описан стандартной перенормировкой «спин-решеточным» взаимодействием при изменении модуля магнитного момента. Так,  $A_g$ -мода ( $B_{1g}$ -мода в тетрагональной парамагнитной фазе, сформированная только колебаниями  $Fe$ , на рис. 2 показана символом  $\circ$ ) при изменении магнитного момента железа от  $1,0$  до  $2,5 \mu_B$  изменяет частоту с  $252 \text{ см}^{-1}$  до  $206,5 \text{ см}^{-1}$  т.е. смягчается приблизительно на 20%. Действие этого механизма проявляется и в расщеплении двукратно вырожденных фононных частот парамагнитной тетрагональной фазы при переходе в моноклинную антиферромагнитную фазу. Однако даже в моноклинной фазе расщепление почти отсутствует при значении момента  $1 \mu_B$ , но достигает аномально больших значений при  $2,5 \mu_B$ . Эффект аномально большого расщепления двукрат-

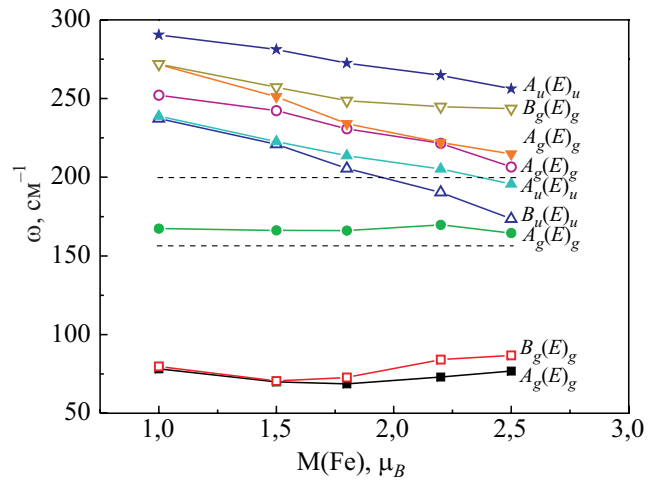


Рис. 2. Зависимость энергий фононов в центре зоны Бриллюэна от величины магнитного момента иона  $Fe$  в моноклинной магнитоупорядоченной фазе  $FeTe$ . Приведена симметричная классификация частот в моноклинной фазе. В скобках указан тип симметрии, которую данная мода имела в тетрагональной фазе. Символы одинаковой формы принадлежат модам, которые были двукратно вырожденными в тетрагональной фазе. Горизонтальными линиями обозначены частоты фононов, наблюдавшиеся в эксперименте по рассеянию света в  $Fe_{1,05}Te$  при  $20 \text{ K}$  [13].

но вырожденных фононных частот при магнитном упорядочении наблюдался в  $Ba(Fe_xCo_{1-x}As)_2$ , родственном для  $FeTe$  соединении [20].

В исследованном интервале магнитных моментов  $FeTe$  оставался в металлическом состоянии. Однако в проведенных нами расчетах плотность электронных состояний на уровне Ферми систематически уменьшается с ростом величины магнитного момента. Такое поведение указывает на возможность перехода Мотта в состояние изолятора по параметру «спиновое состояние железа» даже при условии фиксации постоянных решетки. Как показывают расчеты, недавно обнаруженный сверхпроводник  $Rb_{0,8+x}Fe_{1,6+y}Se_2$ , для которого присущи антиферромагнетизм и сверхпроводимость, по своему стехиометрическому составу  $Rb_2Fe_4Se_5$  является антиферромагнитным изолятором с магнитным моментом железа  $2,9 \mu_B$  [21]. Отсюда можно сделать вывод, что предельный случай «высокоспинового состояния железа» в базовых соединениях железосодержащих ВТСП соответствует моттовскому изолятору.

Очевидно, что незначительное изменение постоянных решетки (например, тепловое расширение) в условиях спиновой нестабильности может приводить к температурному изменению спинового состояния. В этой связи представляют интерес результаты работы [22], в которой был обнаружен аномально большой рост эффективного спина при нагревании в  $Fe_{1,1}Te$ . С этой же точки зрения можно объяснить результаты

большого количества работ, в которых фиксируются температурные аномалии магнитной восприимчивости в форме отклонений от закона Кюри–Вейсса в парамагнитной фазе базовых соединений железосодержащих ВТСП (смотри, например, [23]).

### Выводы

Для описания базовых соединений железосодержащих ВТСП предложен интегральный параметр — спиновое состояние иона железа. Изменение спинового состояния сопровождается перераспределением магнитного момента по  $d$ -орбиталям таким, что при некоторых реализациях распределения при данных значениях постоянной решетки достигается минимум энергии основного состояния. Впервые на примере соединения FeTe численно исследовано действие нового механизма взаимодействия магнитной и решеточной подсистем, так называемое взаимодействие «спиновое состояние–решетка». Установлено, что для систем с железом в тетрагональном окружении наиболее значительное изменение при изменении спинового состояния претерпевают фононы высокочастотной части спектра. Увеличение общего магнитного момента железа приводит к аномально большому смягчению частоты фононов. Как и ожидалось, увеличение магнитного момента железа приводит к увеличению расстояния между железом и теллуром (росту  $z$ -координаты Te), увеличению объема тетраэдра. Показано, что спиновое состояние железа может служить управляющим параметром моттовского перехода металл–изолятор, при котором «низкоспиновое» состояние соответствует моттовскому металлу, а «высокоспиновое» — моттовскому изолятору.

Авторы признательны академику В.В. Еременко за постоянный интерес к их работе и поздравляют его с юбилеем.

Работа выполнена при поддержке грантов НАНУ-РФФИ № 27-02-12 и № 01-02-12, а также при поддержке Государственной программы внедрения и использования грид-технологий, грант — № 232. Расчеты проведены на грид-кластере ДонФТИ НАНУ.

1. M.D. Lumsden and A.D. Christianson *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 203203 (2010).
2. 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).
3. F. Ye, S. Chi, Wei Bao, X.F. Wang, J.J. Ying, X.H. Chen, H.D. Wang, C.H. Dong, and Minghu Fang, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 137003 (2011).
4. I.Ya. Korenblit, A. Aharony, and O. Entin-Wohlman, *Phys. Rev. B* **75**, 174420 (2007).
5. Н.Б. Иванова, С.Г. Овчинников, М.М. Коршунов, И.Е. Еремин, Н.В. Казак, *УФН* **179**, 837 (2009).

6. H. Luetkens, M. Stingaciu, Yu.G. Pashkevich, K. Conder, E. Pomjakushina, A.A. Gusev, K.V. Lamonova, P. Lemmens, and H.-H. Klauss, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 017601 (2008).
7. A. Subedi, L. Zhang, D.J. Singh, and M.-H. Du, *Phys. Rev. B* **78**, 134514 (2008).
8. L. Zhang, D.J. Singh, and M.-H. Du, *Phys. Rev. B* **79**, 012506 (2009).
9. F. Ma, W. Ji, J. Hu, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 177003 (2009).
10. M.-J. Han and S.Y. Savrasov, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 067001 (2009).
11. 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, *ФHT* **37**, 100 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 83 (2011)].
12. Y. Mizuguchi and Y. Tokano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 102001 (2010).
13. V. Gnezdilov, Yu. Pashkevich, P. Lemmens, A. Gusev, K. Lamonova, T. Shevtsova, I. Vitebskiy, O. Afanasiev, S. Gnatchenko, V. Tsurkan, J. Deisenhofer, and A. Loidl, *Phys. Rev. B* **83**, 245127 (2011).
14. A. Martinelli, A. Palenzona, M. Tropeano, M. Putti, M.R. Cimberle, T.D. Nguyen, M. Affronte, and C. Ritter, *Phys. Rev. B* **81**, 094115 (2010).
15. C.-C. Lee, W.-G. Yin, and W. Ku, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 267001 (2009).
16. F. Krüger, S. Kumar, J. Zaanen, and J. van den Brink, *Phys. Rev. B* **79**, 054504 (2009).
17. <http://elk.sourceforge.net>.
18. J.P. Perdew, S. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
19. T.J. Liu, J. Hu, B. Qian, D. Fobes, Z.Q. Mao, W. Bao, M. Reehuis, S.A.J. Kimber, K. Prokes, S. Matas, D.N. Argyriou, A. Hiess, A. Rotaru, H. Pham, L. Spinu, Y. Qiu, V. Thampy, A.T. Savici, J.A. Rodriguez, and C. Broholm, *Nature Mater.* **9**, 718 (2010).
20. L. Chauvière, Y. Gallais, M. Cazayous, A. Sacuto, M.A. Méasson, D. Colson, and A. Forget, *Phys. Rev. B* **80**, 094504 (2009).
21. V. Gnezdilov, P. Lemmens, Yu. Pashkevich, A. Gusev, T. Shevtsova, K. Lamonova, D. Wulferding E. Pomjakushina, and K. Conder, *Separation of Iron Spin States in Chalcogenide Superconductors, Report TT 23.1 at 76-th Annual Meeting of the German Physical Society Berlin, Germany* (2012).
22. A. Zaliznyak, Z. Xu, J.M. Tranquada, G. Gu, A.M. Tsvetlik, and M.B. Stone, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 216403 (2011).
23. R. Klingeler, N. Leps, I. Hellmann, A. Popa, U. Stockert, C. Hess, V. Kataev, H.-J. Grafe, F. Hammerath, G. Lang, S. Wurmehl, G. Behr, L. Harnagea, S. Singh, and B. Büchner, *Phys. Rev. B* **81**, 024506 (2010).

Spin state of iron — controlling parameter of iron containing HTSC: dependence of ground state energy, phonon energies and positions of atoms on spin state of iron ion in FeTe

Yu.G. Pashkevich, T.N. Shevtsova, A.A. Gusev, V.P. Gnezdilov, and P. Lemmens

The density functional theory is used to calculate electronic structure, ground state energy, phonon frequencies at the center and at the boundary of the Brillouin zone, and distribution of magnetic moment over *d*-orbitals of iron are calculated as a function of magnetic moment — spin state of iron in the magnetically ordered phase of FeTe by using the density functional theory. It is shown that a ground state energy minimum is achieved at a certain *d*-orbital distribution of magnetic moment and at a certain spin state of an iron

ion. The impact of a new type of interaction (“the spin state–lattice” one) on the phonon subsystem is studied numerically. It is found that a high-frequency part of the phonon spectra undergoes the most significant changes with changing the spin state. To describe the properties of the HTSC iron-containing compounds, an integral parameter (spin state of iron ion) is suggested.

PACS: 74.25.Kc Phonons;

**74.70.-b** Superconducting materials, other than cuprates;

63.20.D- Phonon states and bands, normal modes, and phonon dispersion.

Keywords: spin state, the ground state energy, electronic structure, phonons, spin-lattice interaction, the Mott transition.