

新型插层铁硒超导材料磁性研究获进展

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所副研究员刘大勇、研究员邹良剑与中国科学技术大学国家同步辐射实验室教授孙喆合作，在新型插层铁硒超导材料 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OHFeSe}$ 磁性研究方面取得新进展，发现这类体系存在局域和巡游共存的磁性，并提出插层磁性可以作为调控超导层中与超导配对相关的自旋涨落的一种新机制。相关成果以Coexistence of localized and itinerant magnetism in intercalated iron-selenide $(\text{Li,Fe})\text{OHFeSe}$ 为题发表在new journal of physics (19, 023028 (2017)) 杂志上。

目前为止，发现的铁基超导材料主要有铁磷族和铁硫族化合物，其中后者的铁硒超导材料由于其较高的超导转变温度备受关注。虽然块体FeSe的超导转变温度只有8K，但是通过调控其晶格结构，超导转变温度可以得到极大的提高。例如，块体FeSe通过加压，超导转变温度可以到

37K，插层铁硒材料 $\text{K}_{1-x}\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 达到30K，特别是生长在 SrTiO_3 衬底上的单层FeSe(Fe/STO)可以达到65 K以上甚至110 K的超导转变温度。目前，理论研究一般认为铁基超导材料的超导机制主要与超导邻近的反铁磁和费米面的空穴/电子型口袋的嵌套相关。最近发现的新型插层铁硒超导材料 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OHFeSe}$ ，其超导转变温度 T_c 高达40 K以上，不仅晶体结构上没有出现类似插层铁硒材料 $\text{K}_{1-x}\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 中的Fe空位

，而且电子结构上具

有空穴型口袋缺失的新颖费米面拓扑结构

。因此新型插层铁硒超导材料 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)$

OHFeSe 已成为铁硒超导材料的重要研究对象，对其进行深入研究有可能澄清铁基超导材料研究中的一些关键争议问题。

为了研究 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)$

OH 层和FeSe层中两类不同Fe的性质，研究人员采用计算和理论模型相结合的方法研究和分析了理想体系 LiOHFeSe 和实际材料 $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$ 的电子结构和磁性质，发现 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)$

OH 层的Fe离子具有+2价态，因此 $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})$

OH 插层相当于为FeSe层提供电子，具有与FeSe/STO非常接近的电子结构。插层基态为绝缘反铁磁(图1)，表现为局域磁性；而FeSe层为巡游的条纹反铁磁坏金属

(图1)；层间则为铁磁耦合， $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})$

OHFeSe 材料的磁结构如图2所示。因此磁插层 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OH}$ 不仅作为空间隔绝层，还可以通过层间耦合调控FeSe层中与超导配对相关的自旋涨落。此外，为了研究材料Fe的自旋间的磁相互作用，研究人员还构建了 $J_1\text{-}J_2\text{-}J_3\text{-}J'_1\text{-}J'_2\text{-}J_c$ Heisenberg模型，并给出了磁耦合常数，可以为以后的中子散射实验和自旋波等相关实验和理论工作提供物理参数。

上述研究成果得到了国家自然科学基金面上项目和重点项目的资助。

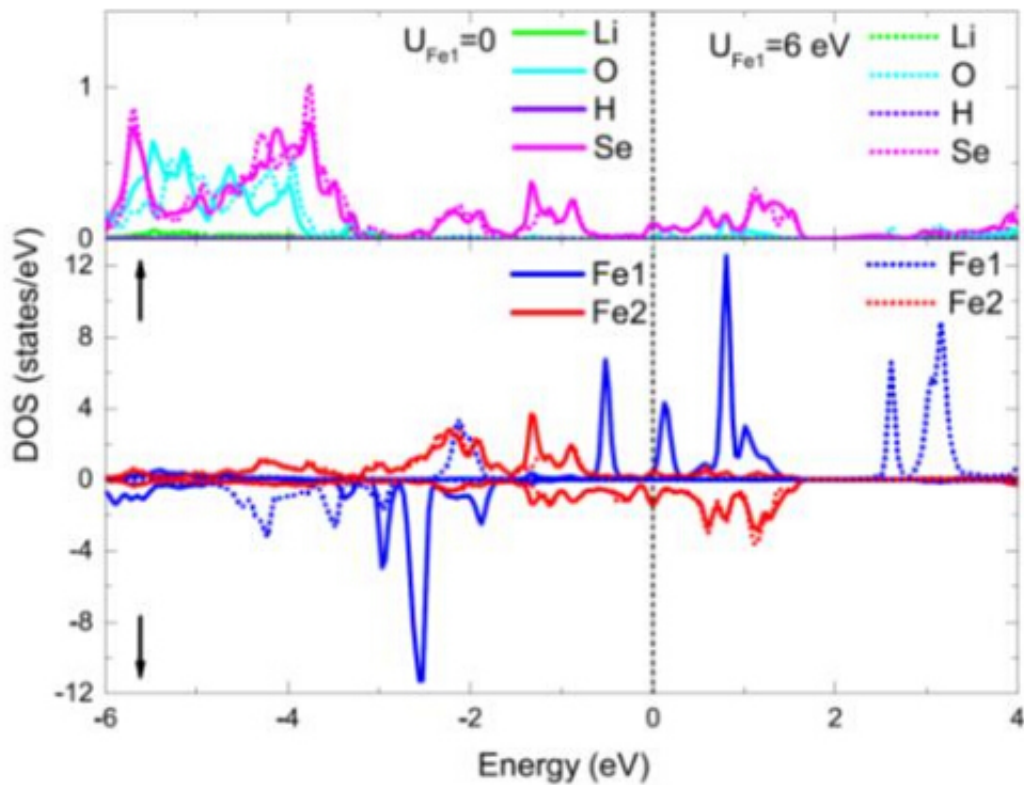


图1. $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$ 磁基态原子分辨的态密度

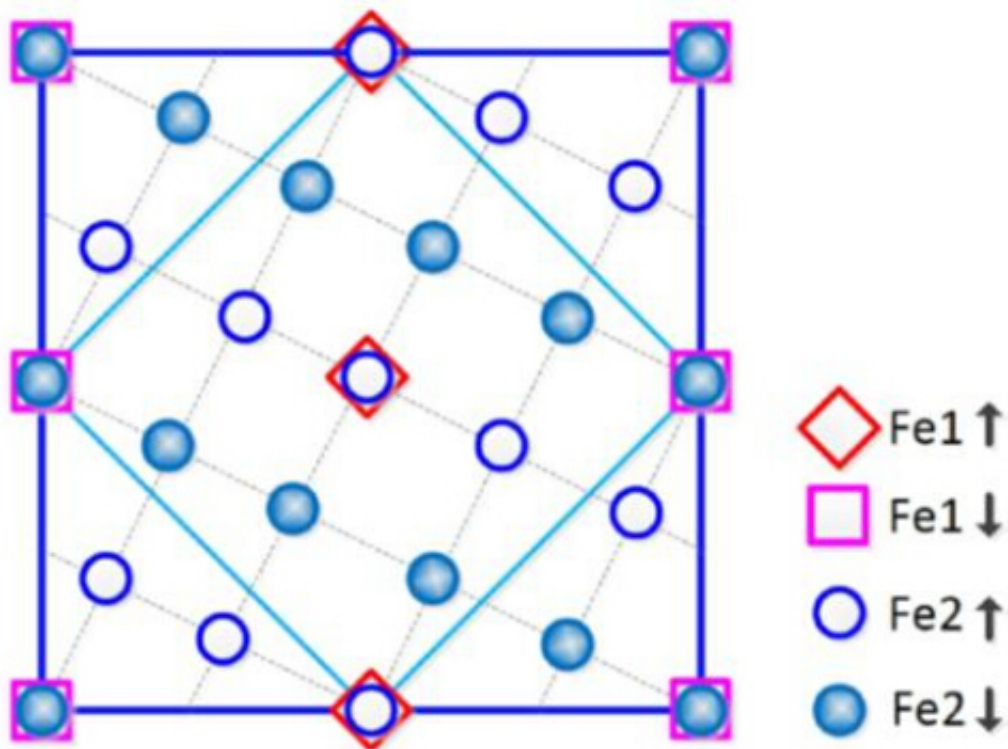


图2. $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$ 磁结构示意图

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/107895.html>