

中国科大等在新型量子功能材料研制中取得进展

近日，由中国科学技术大学教授陆亚林领导的量子功能材料和先进光子技术研究团队在量子功能材料研究方面取得重要进展。该团队副研究员翟晓芳、副教授傅正平等人，与美国劳伦兹伯克利国家实验室博士Jinghua Guo、中国科大教授赵瑾、湖南大学教授马超等合作，在研究新型高温、高对称性铁磁绝缘体过程中，把高质量氧化物薄膜制备与同步辐射先进光电学探测、第一性原理计算等相结合，成功发现了高于液氮温度（77K）的高对称性铁磁绝缘体，并解释了产生高温铁磁转变现象的新机制。相关研究成果发表在《美国国家科学院院刊》上。

通常磁性材料可分为铁磁性和反铁磁性，而在真实材料中，铁磁材料通常是导电的，反铁磁材料通常是绝缘的。随着量子科技的发展，对量子功能材料的性能逐渐有了更多的需求，例如在量子拓扑器件中需要绝缘的铁磁材料（铁磁绝缘体），同时需要该铁磁绝缘体要具有高晶格对称性，以利于与其他材料外延生长成未来量子器件；需要具有尽可能高的铁磁转变温度，以利于更接近于器件的现实工作环境等。

以往研究中发现的铁磁绝缘体大多是通过两个磁性原子占据位不同以促使其轨道占据不同，这种铁磁绝缘体中最著名的是 $Y_3Fe_5O_{12}$ （YIG）。但是该类型的铁磁绝缘体具有复杂的、低对称性的点阵结构，同一种原子能够容易地占据不同晶格格点，使得高质量铁磁绝缘体的制备非常困难，并且严重影响到其铁磁绝缘体的性能。更为严重的是，这些复杂结构的铁磁绝缘体在被应用到磁性量子器件或隧穿器件中时，很难与其他高对称性的材料进行外延生长，造成未来器件制备与集成的困难。同时，目前已知的、具有高对称性非掺杂铁磁绝缘体的铁磁转变温度都非常低，大部分都位于16K之下，远未达到最低要求的液氮温度。这样表现出来的低温铁磁绝缘性可能是由于4f轨道太窄，以及氧之间超交换作用太弱所致。通常量子功能材料的罕见性都是受制于基本客观物理规律，因此要取得突破就必须从深层物理机制着手，设计和研制能够产生新型性能的新量子材料，这对物理机制研究和材料制备都提出了极高的要求。

为了获得能在高温下工作的、具有另外延生长能力的、高对称性结构的铁磁绝缘体，该团队进行了充分的材料筛选，认为 $LaCoO_3$ 薄膜是可能成为一个高对称性铁磁绝缘体的研究对象。但关于 $LaCoO_3$ 薄膜铁磁性的来源前期却充满了争议，由于对制备要求很高，薄膜中经常会出现大量缺陷，因而前期很多人认为是这些缺陷导致了铁磁性，导致了性能的不稳定及不可控。在该研究中，团队基于高质量单晶薄膜制备优势，研制了高质量、近似无缺陷的 $LaCoO_3$ 薄膜并深入研究了其铁磁性的来源，发现 $LaCoO_3$ 薄膜确实是一个罕见的高温铁磁绝缘体，其铁磁转变温度可以高达85K，是以往研究过材料的5倍，并高于液氮温度。通过制备不同氧含量、不同应力、不同厚度的 $LaCoO_3$ 薄膜，发现了氧缺陷的浓度增加会引起铁磁性的削弱，且在氧缺陷导致的 Co^{2+} 含量达到10%左右时，铁磁性会完全消失；通过第一性原理计算，发现了与实验基本一致的结论，当氧缺陷被引入到拉应力下的 $LaCoO_3$ 薄膜中时，产生的 Co^{2+} 高自旋态（ $t_{2g} 3e_g 2$ ）与邻近的 Co^{3+} 高自旋态或 Co^{2+} 高自旋态形成局域的反铁磁相互作用，削弱了铁磁性。并且当 Co^{2+} 的浓度达到12.5%时，反铁磁相互作用取代了铁磁相互作用并成为新的长程序，铁磁性因而完全消失。该研究充分解释并证明了 $LaCoO_3$ 薄膜铁磁绝缘机制，为未来研制高质量磁性量子器件等应用需求提供了一个亟需的新材料。

中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心博士研究生孟德超、郭宏礼为共同第一作者，翟晓芳、陆亚林为通讯作者。该研究得到了科技部、国家自然科学基金委、中科院和教育部的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/121782.html>