

合肥研究院等在新型含氢铁基超导体电子性质研究中取得进展

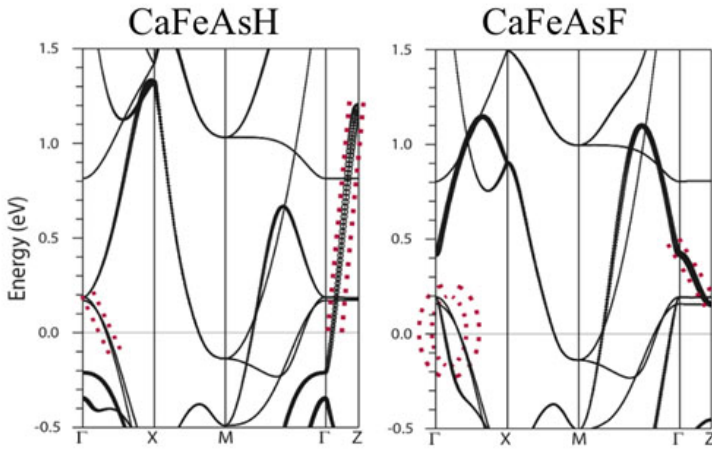


图1. As-4p_z轨道的特征能带图

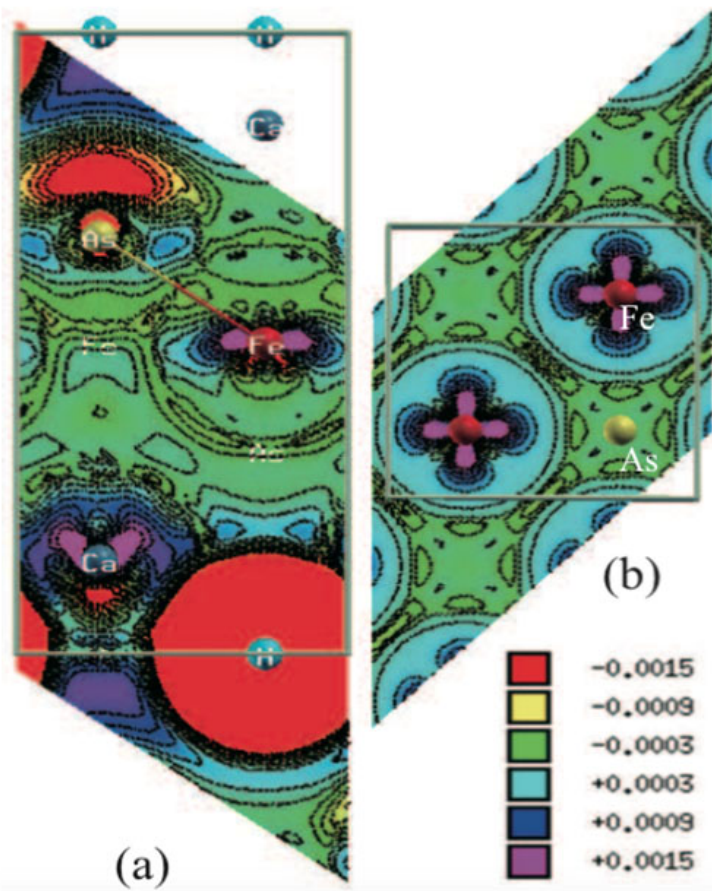


图2. 相同晶格参数下电荷密度差值 $\rho(\text{CaFeAsH}) - \rho(\text{CaFeAsF})$

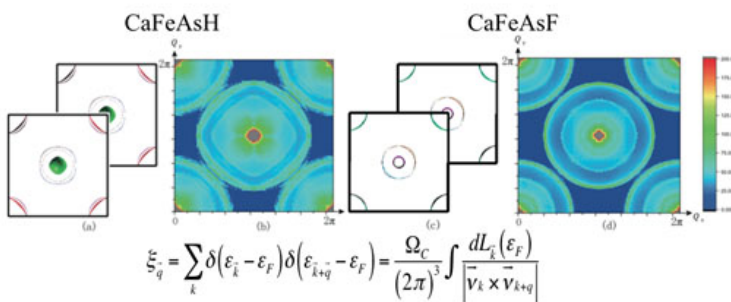


图3. 费米面嵌套和嵌套函数

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所物质计算科学研究所研究员邹良剑与美国加州大学戴维斯分校教授Warren Pickett合作，在新型含氢铁基超导体电子性质方面的研究取得新进展，发现掺氢使体系出现一个非常规的能带色散，导致在费米能级以下的特殊的范霍夫奇异性（van Hove singularity），可能有利于体系形成高的超导转变温度。相关成果发表在Phys. Rev. B 93, 195148 (2016)上。

目前发现的铁基超导材料主要有四大类，虽然这些化合物基本结构单元非常类似，但是不同化合物的超导转变温度差别却非常大；同时，通过对比研究不同体系的电子性质，可为澄清铁基超导材料的超导关键机制提供一种非常有效的手段。最近发现的新型La掺杂的含氢铁基超导体钙铁砷氢（CaFeAsH），其超导转变温度高达47 K，成为新型铁基高温超导体电子性质的重要研究对象，有可能对高温超导体非常规超导机制的研究带来新的启示。

为了研究H 和F 等价离子掺杂的不同影响，研究人员计算了CaFeAsH中H被F替代前后，以及不同替代量的能带（图1）、态密度、费米面以及电荷密度差（图2）等电子结构性质，发现掺氢使体系形成一条非常规的具有强色散的能带，如图1所示，在费米能级下出现一个特殊的范霍夫奇异性，导致CaFeAsH的三维特征费米面不同于钙铁砷氟（CaFeAsF）。这种独特的电子结构特征可能会对提高超导电性具有非常重要的影响。同时，研究人员通过进一步计算CaFeAsH的磁基态和对费米面嵌套分析，如图3所示，证明其基态为条纹反铁磁相；针对实验上的掺杂浓度，研究表明La或Co掺杂会明显抑制CaFeAsH的费米面嵌套，破坏了母相的磁有序态，从而导致体系出现超导。

上述研究成果得到了国家自然科学基金面上项目和美国国家科学基金的资助。

论文信息：Y. N. Huang, D. Y. Liu, L. J. Zou*, Warren E. Pickett*, Role of Hydrogen in the Electronic Properties of CaFeAsH-based Superconductors, Physical Review B 93, 195148 (2016).

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/96026.html>