# 镍基高温超导材料磁性研究获重要进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/32513.html

*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

**镍基高温超导材料磁性研究获重要进展**。中山大学物理学院副教授曹坤团队同合作者，在国家自然科学基金等项目的资助下，在常温常压下双层镍基超导材料La3Ni2O7-δ的磁性研究方面取得重要进展。近日，相关成果发表于《npj量子材料》（npj Quantum Materials）。

研究团队通过密度泛函理论计算与蒙特卡洛模拟，首次揭示了氧空位对材料磁基态及相变温度（TSDW）的调控机制，为理解镍氧化物高温超导与磁性的内在联系提供了全新视角。

自高压下La3Ni2O7-δ在80K实现高温超导的报道问世以来，该材料成为超导物理领域的热点。然而，其常压下的磁性机制仍充满争议。实验表明，常压下该材料可能存在自旋密度波相，但其基态磁构型尚未明确。此外，氧空位对磁性的影响尚未阐明，而这对揭示磁性与超导的关联至关重要。

曹坤团队系统研究了La3Ni2O7-δ的磁性行为。研究发现，在无氧空位情况下，材料的磁基态为double spin stripe（DSS）。基于经典Heisenberg模型分析发现，层间反铁磁相互作用被确认为主导磁交换作用，与实验观测一致。进一步计算发现内顶点氧空位最为稳定，其会导致相邻Ni原子磁矩消失，形成电荷位点。随着氧空位增加，磁基态逐渐向spin-charge stripe（SCS）转变。当氧空位浓度升至δ = 0.5时，材料演化为短程有序的类自旋玻璃态。

研究发现氧空位引入后，Ni的dz2轨道能量显著降低，导致其电子构型变为低自旋态Ni2+（t2g6dz22），是导致磁矩消失的原因，并进一步破坏了层间超交换作用。氧空位通过调控Ni的电子构型和层间相互作用，显著影响La3Ni2O7-δ的磁性、电荷和轨道有序，揭示了其复杂的电子关联行为，为理解镍氧化物的物理性质提供了重要理论支持。同时，氧空位通过稀释主导磁交换作用，显著降低TSDW，使自旋波激发谱更加符合实验测量结果。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41535-025-00740-z

作者：曹坤等 来源：《npj量子材料》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发