

# 电子掺杂铁硒超导材料电子关联研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3863.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！**

电子掺杂铁硒超导材料电子关联研究获进展。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、南开大学副教授卢峰和教授王维华合作，在插层铁硒超导材料 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OHFeSe}$ 电子关联方面取得新进展，发现这类体系的电子结构存在电子关联驱动的Lifshitz转变机制，并提出电子掺杂的 $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$ 体系具有完全不同于纯FeSe材料的超导电子态。相关成果以Correlation-driven Lifshitz transition in electron-doped iron selenides  $(\text{Li,Fe})\text{OHFeSe}$  为题发表在Phys. Rev. B (Phys. Rev. B 98, 195137 (2018))杂志上。

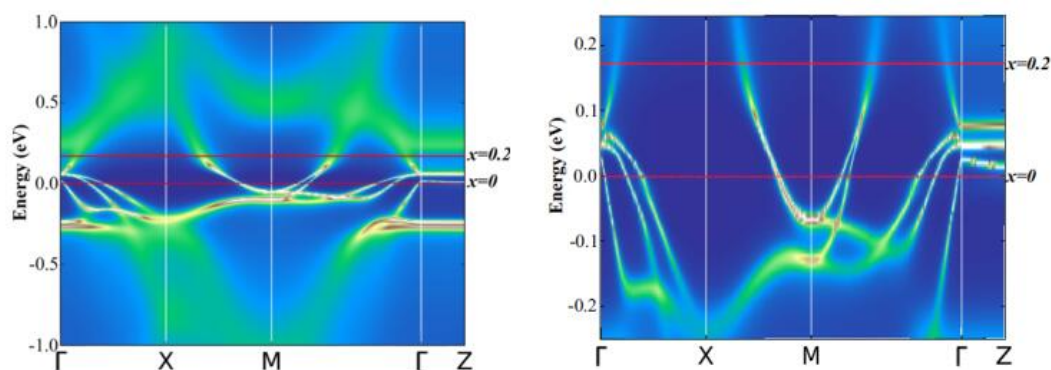
高温超导体(主要包括铜基和铁基超导体)由于其诱人的应用前景一直都是凝聚态物理研究的前沿领域。近年来，铁基超导材料中的铁硒基化合物也因其较高的超导转变温度( $T_c$ )引起人们极大的兴趣。然而，尽管铁硒基超导体在实验和理论上已经被广泛研究，其高温超导机制却仍处于争论当中。特别是铁基超导体普遍具有的多轨道特征和关联金属行为，不同于常规金属和掺杂Mott绝缘体，阻碍了对其超导机制的理解。探索影响其高超导转变温度关键因素的第一步就是关联电子结构的研究。铁硒超导材料 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OHFeSe}$ 由于其特殊的仅具有电子费米口袋(空穴费米口袋缺失)的电子结构成为铁基超导材料的重要研究对象，其研究对理解铁基超导体体系的超导配对和高 $T_c$ 机制具有重要意义。

铁硒化合物 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OHFeSe}$  ( $x \sim 0.2$ )具有约40K以上的较高超导转变温度，远远高于 $T_c \sim 8\text{K}$ 的纯FeSe体系。同时，理论和实验工作发现该材料 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OH}$ 层有助于FeSe层的电子掺杂，因此可以作为研究重电子掺杂铁硒衍生超导体体系的参考材料。然而，目前不同的实验和理论计算仍存在不符之处。其中一个令人困惑的问题就是在 $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$ 角分辨光电子能谱(ARPES)和扫描隧道显微镜(STM)实验中观察到布里渊区的  $\Gamma$  点附近有一个微小的电子费米口袋，但在密度泛函理论(DFT)计算中却是两个较大的空穴费米口袋。此外，由于费米面嵌套在理解超导配对机制中起着重要作用，进一步的研究需要确定 $(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{OHFeSe}$ 体系考虑电子关联情况下的费米面拓扑结构。

针对电子掺杂铁硒体系 $(\text{Li,Fe})\text{OHFeSe}$ 中ARPES、STM实验与DFT计算的电子结构不一致问题，在前期工作(New J. Phys.19, 023028 (2017))的基础上，研究人员采用能精确处理电子关联的DFT结合动力学平均场(DMFT)的DFT+DMFT计算方法，利用连续时间量子蒙特卡洛(CT-QMC)杂质求解器，研究了体系电子关联和自旋轨道耦合对体系电子结构的影响。结果发现，在电子掺杂的 $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$ 体系中，电子关联基本上改变了费米面的拓扑性，导致在布里渊区中心  $\Gamma$  点和边角M点附近分别出现一个非常小的和两个大的电子费米口袋(图(右))。而且自旋轨道耦合也会对费米能级附近的低能电子结构产生一定的影响，特别是  $\Gamma$  点附近的狄拉克(Dirac)色散处打开一个很小的能隙(图(左))。结果表明，从纯FeSe到电子掺杂的 $(\text{Li}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{OHFeSe}$ 体系，费米面拓扑性

的变化是电子关联驱动的Lifshitz转变，并导致体系的磁波矢从 $(\pi, 0)$  转变到 $(\pi, 0.5 \pm \delta)$ ，同时伴随着 $dx_y$ 和 $dx_z/dy_z$ 轨道之间的轨道重构。以上结果与ARPES等实验非常符合，同时也表明了体系关联情况下的多体特征，例如多体的自能、相干谱权重，以及有效质量的重整化等。最后，进一步的计算也得到了与实验趋势一致的光电导行为。综上所述，这些结果解决了DFT计算和实验结果之间的矛盾，表明电子掺杂的铁硒体系具有电子关联驱动的电子结构和布里渊区中心空穴费米口袋缺失的奇异费米面拓扑性，有助于理解铁基超导材料的超导电性。

上述研究成果得到国家自然科学基金面上项目和中科院重点研究项目的资助。数值计算在中科院合肥物质科学研究院计算中心以及中科院超级计算网络完成。



图：(Li<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>)OHFeSe动量分辨的谱函数(DFT + DMFT结果)，左(右)图结果不包括(包括)自旋-轨道耦合

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](http://www.iikx.com)转发