合肥研究院等在4d关联电子体系中的自旋-轨道耦合效应研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/7781.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！

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室博士张国仁与德国于利希研究中心(Forschungszentrum
Ju · lich)教授Pavarini合作在4d关联金属Sr_2RhO_4的光电导、费米面及自旋-轨道耦合研究方面取得新进展。他们采用精确的局域密度近似+动力学平均场方法(LDA+DMFT)确认了该体系中自旋-轨道耦合的库仑增强效应，阐明了中红外区光电导峰的起源。相关结果发表在*Physical Review B*上。

由于强的自旋-轨道耦合，4d、5d电子体系展现出与3d电子体系迥异的物理现象，如自旋-轨道诱导的金属-绝缘体转变、强磁各向异性导致的自旋液体行为、磁希格斯模激发及潜在的本征拓扑超导等。然而，由于实验现象的复杂性和理论计算技术的限制，人们对这类体系中一些非常基本的物理机制还不清楚，特别是自旋-
轨道耦合与电子间的库仑相互作用之间是如何相互影响方面。

因为结构简单，Sr_2RhO_4
是研究4d电子体系中基本相互作用的较好载体。尽管如此，关于这个材料的基本性质从其被制备出来后就一直争议不断：基于局域密度近似(LDA)的第一性原理计算所得的费米面和实验确定的费米面相差甚远；尽管Hartree-Fock类型的平均场预测的关联增强的自旋-轨道耦合可以使得理论与实验费米面相符，但是却被认为是非物理的；中红外区光电导峰的起源也有两种截然不同的解释(自旋-轨道耦合或电子间的关联)。

针对这些问题，研究人员采用自己开发的、能够同时精确处理真实晶体结构、晶体场劈裂、自旋-轨道耦合和全部库仑顶角的LDA+SO+DMFT方法，在前期工作的基础上，详细研究了晶体场、库仑作用及自旋-轨道耦合对Sr_2RhO_4
费米面拓扑结构的影响。基于精确的LDA+SO+DMFT计算结果，他们进而用线性响应理论详细研究了各种因素对光电导的贡献。结果表明，库仑增强的自旋-轨道耦合确实对费米面有重要影响，但是之前的平均场计算夸大了这种效应。并且与平均场结果不同的是，库仑相互作用对晶体场的增益几乎可以忽略，甚至可能是负值。而对于光电导，只考虑关联作用就可以得到中红外区域的峰，说明自旋-轨道耦合不是其起源。但是自旋-轨道耦合增加了它的强度。有意思的是，对光电导的详细分解表明光电导中主要的成分既不是来自于带间也不是来自于带内的贡献，而是来自于速度矩阵和格林函数矩阵的非对角部分。这种多带效应说明基于单带近似的经验光电导公式并不适用于Sr_2RhO_4。

该项工作得到国家自然科学基金的资助，相关的LDA+SO+DMFT计算是在德国于利希研究中心超级计算机系统JURECA BOOSTER上完成的。

文章链接

图1.不同近似下的Sr_2RhO_4的费米面：(a) LDA；(b) LDA+自旋轨道耦合；(c) LDA+动力学平均场；(d) LDA+自旋轨道耦合+动力学平均场。

图2. 在ab平面内(左)和面外(右)的光电导。灰线：实验所测的光电导；实线：考虑自旋-轨道耦合的结果；空点：不考虑自旋-轨道耦合的结果。

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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