



科研进展

SHMFF用户对钽氧化物Mott相变晶格-轨道耦合调控研究方面取得新进展

文章来源：张蕾 发布时间：2017-11-09

南京大学吴小山教授研究组的彭劲博士，借助稳态强磁场实验装置变温X射线衍射仪（XRD），对锰掺杂双层钽氧化物Ca₃Ru₂O₇中的Mott相变的晶格-轨道调控机制进行了研究，并取得了新进展。该研究成果以“Mott transition controlled by lattice-orbital coupling in 3d-metal-doped double-layer ruthenates”为题，发表在国际期刊《物理评论B》上【Physical Review B 96, 205105 (2017)】。

在强关联电子体系中，电荷、轨道、晶格、自旋自由度之间的复杂相互作用被认为是各种新奇现象的根源。而通过化学掺杂、压力、磁场等外部条件的调控，可以有效的调节不同自由度之间的竞争和平衡，从而对体系的磁相图和电子相图进行调控，典型的例子有铜基高温超导体系和巨磁阻锰氧化物体系。Ruddlesden-Popper (RP)类型的层状钽氧化物（化学式为A_{n+1}Ru_nO_{3n+1}, n = 1, 2, 3, …, ∞）是一种具有丰富物理性质的强关联电子体系，例如Sr₂RuO₄ (n=1) 中的自旋三重态和超导电性，Sr₃Ru₂O₇ (n=2) 中磁场调制电子相列相，SrRuO₃ (n=∞) 中的巡游铁磁性，Ca₂RuO₄ (n=1) 中的反铁磁Mott绝缘态，CaRuO₃ (n=∞) 中的顺磁金属性等。在钽氧化物中，钽离子的4d电子具有比3d电子更大的空间延伸性，这使得钽的4d电子具有更弱的电子关联作用和更强的轨道-晶格耦合作用。因此，钽基材料对外部参量的调控更为敏感。从而，化学掺杂、磁场、压力等均能有效的调控体系的性质和基态。

前期的研究表明，某些和Ru⁴⁺离子具有相近的离子半径的3d离子，能够很容易的调节这一体系的晶体结构和物理性质。例如，少量的Ti或者Mn离子掺杂于Ru位，就可以把体系的基态从顺磁或者铁磁态调制为反铁磁绝缘态。相反，另外一些具有3d电子的离子掺杂，如Cr, Co, Fe等，会保护体系的金属相，并导致铁磁有序态。

在钽基化合物中，双层Ca₃Ru₂O₇ (n=2) 是一类具有丰富物性和相图的体系。Ca₃Ru₂O₇在奈尔温度TN~56K以下转变为反铁磁 (AFM)。其反铁磁的构型是自旋在RuO₂面内形成沿着a方向的铁磁，而沿着c方向的层与层之间形成反铁磁。在温度为48K时发生另一个金属-绝缘转变，同时RuO₂面内的铁磁由a方向转变为沿着b方向。这两个磁转变被称作AFM-a和AFM-b。在本工作中，南京大学的彭劲博士，借助稳态强磁场实验装置变温X射线衍射仪，对Ca₃Ru₂O₇中由少量3d电子化学掺杂引起的Mott相变进行了深入的研究。研究表明，轻度Mn (4%) 掺杂会使该体系中的准二维金属态转变为具有G型反铁磁有序的Mott绝缘态，但是Fe掺杂却不能导致这种转变。变温XRD结果，显示了随温度的晶格变化在这一相变中起至关重要的作用。晶格变化的实验结果和第一性原理计算比较，揭示了晶格-轨道耦合是Mott相变的关键机制。研究发现，Mott相变的相变温度，已经预先由奈尔相变温度TN以上的结构参数所确定。研究结果证明，Mott相变是由于3d离子掺杂所造成的强散射中心造成的。这一图像解释了在钽氧化物中3d离子的掺杂效应。这一结果推进了人们对于4d关联电子体系中，由电荷、自旋、晶格、轨道自由度的复杂相互作用所支配的奇异的物理性质的认识。

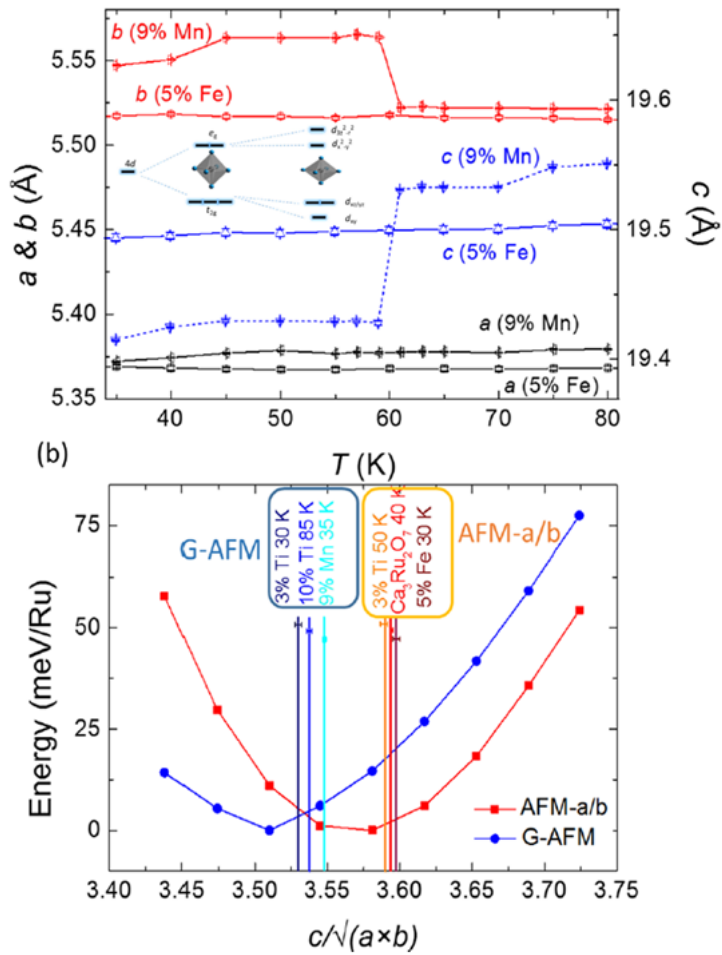
文章链接：<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.96.205105>

科学岛报



科学岛视讯





(a) 由变温XRD谱获得的 $\text{Ca}_3(\text{Ru}_{0.91}\text{Mn}_{0.09})_2\text{O}_7$ 和 $\text{Ca}_3(\text{Ru}_{0.95}\text{Fe}_{0.05})_2\text{O}_7$ 晶格常数随温度的变化；(b) AFM-a/b和G-AFM总能量随晶格参数的变化

子站

[内部信息](#) | [院长办公室](#) | [监督与审计处](#) | [人事处](#) | [财务处](#) | [资产处](#) | [科研处](#) | [高技术处](#) | [国际合作处](#) | [科发处](#) | [科学中心处](#) | [研究生处](#) | [安全保密处](#) | [离退休](#) | [基建管理](#) | [质量管理](#) | [后勤服务](#) | [信息中心](#) | [河南中心](#) | [健康管理中心](#) | [科院附中](#) | [供应商竞价平台](#) | [职能部门](#) |

友情链接



[版权保护](#) | [隐私与安全](#) | [网站地图](#) | [常见问题](#) | [联系我们](#)

Copyright © 2016 hfcas.ac.cn All Rights Reserved 中国科学院合肥物质科学研究院 版权所有 皖ICP备 050001008

地址：安徽省合肥市蜀山湖路350号 邮编：230031 电话：0551-65591245 电邮：yzxx@hfcas.ac.cn

