科研进展

国际联合团队在Sr2IrO4关键电子性质研究方面取得新进展

文章来源： 朱大梅 发布时间： 2022-07-05

近期，中科院合肥研究院固体所计算物理与量子材料研究部张国仁博士参与的由来自中国、加拿大、德国、美国、意大利、韩国的科学家组成的国际联合团队在Sr_2IrO_4关键电子性质研究方面取得新进展。结合当前最先进的实验手段和详尽的多体理论计算，该团队证实了被广泛接受的赝自旋1/2模型不足以完整描述Sr_2IrO_4的低能性质。相关结果发表在Phys. Rev. B 上。

由于强的自旋-轨道耦合，一个过去十多年来被广泛接受的观点认为： Sr_2IrO_4中Ir^{4+}离子的电子基态性质可以用完全占据的总角动量为j=3/2和半填充的总角动量为j=1/2的多重态来描述；如果把这一总角动量为1/2的态看作赝自旋，加上Sr_2IrO_4特殊的层状钙钛矿结构，Sr_2IrO_4的低能物理性质就可以用一个二维赝自旋1/2的莫特绝缘体模型来描述。而这一模型正是体现铜基超导母体材料物理精髓的典范模型。Sr_2IrO_4与铜基超导母体材料这种强相似性极大地激起了研究人员在掺杂的Sr_2IrO_4中寻找超导现象的兴趣。一大批实验工作也确实报道了可能与超导有关联的现象，诸如费米弧（Fermi arcs）或赝能隙（pseudogap）、类边缘费米液体电子散射率（marginal-Fermi-liquid-like electron scattering rates）及电子-波色子耦合（electron-boson coupling）等。但迄今为止确切的超导现象在掺杂的Sr_2IrO_4中还没有被发现。一个非常可能的原因是Sr_2IrO_4中的低能物理对上述被广泛接受的赝自旋1/2模型有较大的偏离。

鉴于此，该研究团队结合目前最先进的圆极化自旋角分辨光电子发射谱（circularly polarized spin-ARPES, CPS-ARPES）和多体理论计算，详尽地研究了Sr_2IrO_4的低能电子结构。基于j=1/2态的自旋-轨道耦合期望值<L●S>为正而j=3/2态的<L●S>为负这一特征，研究人员通过测量<L●S>在布里渊区不同k点随能量的变化，清楚地展现了Sr_2IrO_4中的低能物理对赝自旋1/2模型的偏离。如图1所示，在Γ和Z点，在某些能量区域Sr_2IrO_4的电子态均表现出以j=3/2态为主导的特征（<L●S>为负）。通过详尽的LDA+DMFT计算，研究人员发现只有包括所有t_{2g}态才能定量地解释实验结果（如图2所示）。最终研究人员确定了Sr_2IrO_4的低能谱权重：在0到-1.64 eV的能量范围内，j=3/2态占74%的份额，这和赝自旋1/2模型有很大的偏离。

该工作有助于重新审视Sr_2IrO_4和铜基超导材料的联系，并且展现了先进的实验方法和详尽的多体理论计算框架的结合对理解具有复杂的多重能量尺度耦合的真实材料体系的重要性。

这项工作得到了国家自然科学基金的资助，相关实验部分主要由加拿大不列颠哥伦比亚大学(University of British Columbia)的Zwartsenberg博士和Damascelli教授完成，理论部分由固体所的张国仁博士和德国于利希研究中心（Forschungszentrum Jülich）的Pavarini教授完成。

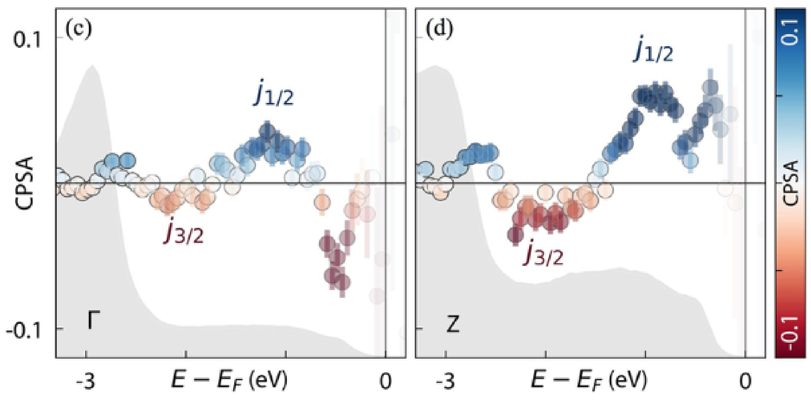

图1. 布里渊区中Γ和Z点的CPS-ARPES谱密度。

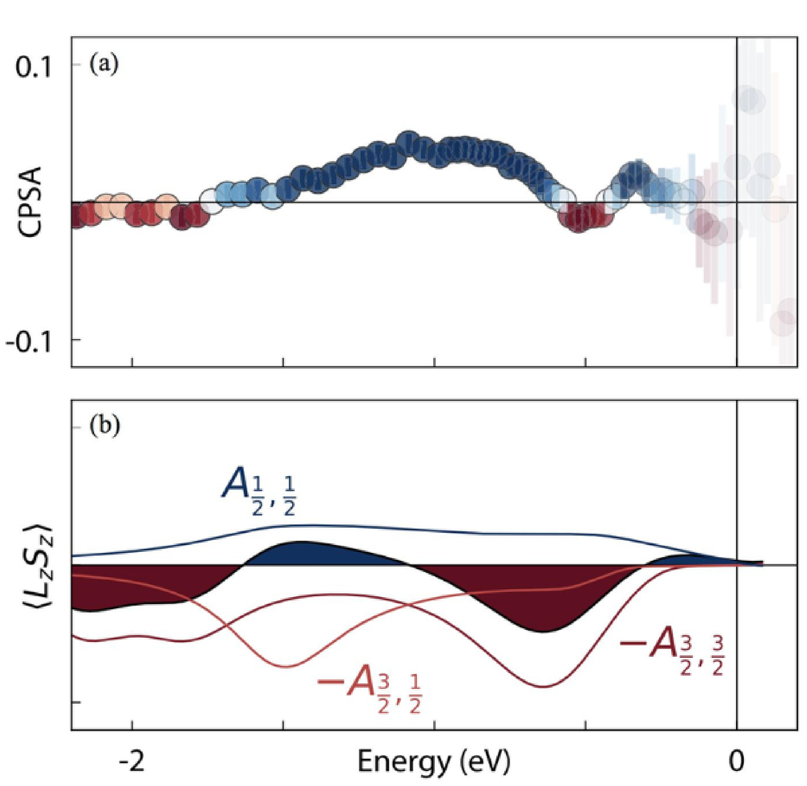

图2. 实验（上）和理论（下）的对比。

科学岛报 更多

科学岛视讯 更多

中国科学院 CHINESE ACADEMY OF SCIENCES
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
事业单位