

## 新闻中心 NEWS

- ▶ 通知公告
- ▶ 学院新闻
- ▶ 学术活动

## 相关链接 LINKS

## 联系我们 CONTACT US

电话: 86-027-87543228

邮编: 430074

地址: 湖北省·武汉市 珞瑜路1037号

华中科技大学电气大楼A座

## 学术活动

您当前的位置: 首页 &gt; 新闻中心 &gt; 学术活动 &gt; 正文

### 强磁场中心徐刚团队在多极矩物态计算方法上取得重要进展

发表时间: 2021-10-09 作者: 国家脉冲强磁场科学中心 浏览次数: 311

新闻网讯 (通讯员 邱温轩 程远) 9月29日,《物理评论快报》(Physical Review Letters)在线发表了我校国家脉冲强磁场科学中心徐刚教授团队题为“多极矩物态的高效预测方法及其在 $\text{RuX}^3$ ( $X=\text{Cl}, \text{I}$ )中的应用”(Efficient Method for Prediction of Meta-stable or Ground Multipolar Ordered States and its Application in Monolayer $\alpha\text{-RuX}^3$ ( $X=\text{Cl}, \text{I}$ ))的研究成果。

国家脉冲强磁场科学中心博士生邱温轩为第一作者,徐刚教授与中国科学技术大学王义林教授为共同通讯作者,中心博士后邹金雨、博士生罗爱云、高锦华教授,中科院物理所硕士生崔志海、普林斯顿大学宋志达博士共同完成了相关工作。

在强自旋轨道耦合关联电子体系中,自旋磁矩与轨道磁矩(它们都是偶极矩)会耦合形成一些高阶的序参量,称为多极矩序参量。近年来,研究人员发现在4d/5d化合物中多极矩会主导它们的一些物性,带来更丰富有趣的有序态和激发态,诸如“隐参量”相变、多极矩近藤效应、奇异磁电耦合、非线性霍尔效应等。目前,多极矩序参量在实验表征和理论计算上都面临极大挑战,理论上主要是缺少从第一性原理计算预测和计算多极矩序参量的快速有效方法。

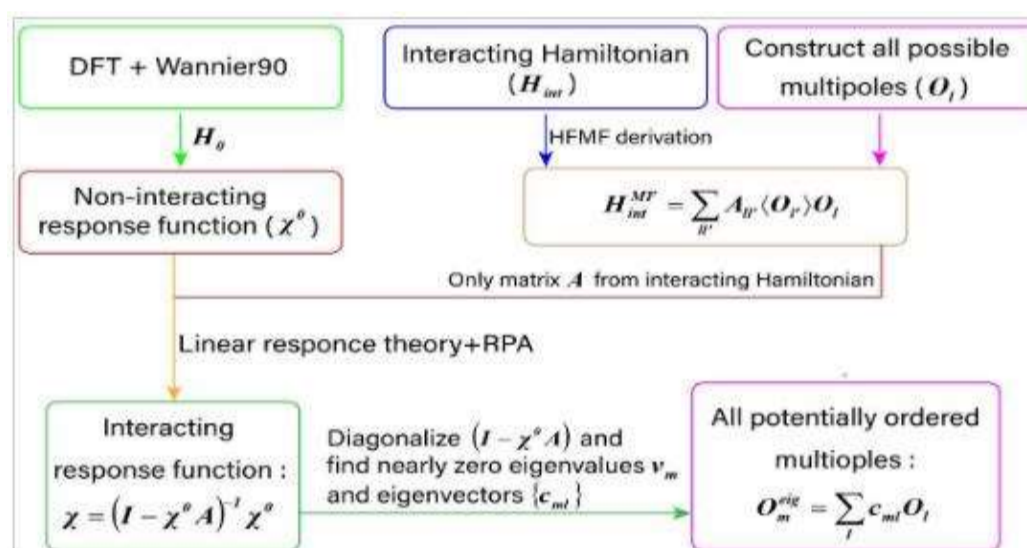


图1 多极矩序参量计算流程图

该研究中,徐刚及其合作者利用基于无规相近似的线性响应理论,发展了一套从第一性原理计算出发快速高效地预测多极矩序参量的方法(计算流程图如图1所示),并将其应用到单层蜂窝状结构的 $\text{RuX}^3$ ( $X=\text{Cl}, \text{I}$ )体系。如图2(a)、(b)所示,在 $\text{RuCl}^3$ 中找到两种纯八极矩亚稳态Oc-II(FM-O36 21)和Oc-IV(AFM-O36 21)。随后,探讨了八极矩的形成条件,并通过计算发现反向排列的八极矩态AFM-O36 21在 $\text{RuI}^3$ 中会成为基态(如图2(c)、(d))。最后,研究了Oc-II和Oc-IV相关的奇异物理性质,包括:(1)这种磁八极矩序参量打破时间反演对称性,但不表现出任何宏观磁性;(2)在同向排列的Oc-II态中施加xz平面的旋转磁场,可以在y方向诱导出如图2(e)所示的交变振荡的正交磁矩 $M^y$ ——实验上可以据此验证Oc-II态的存在。该工作为快速有效地计算多极矩序参量提供了新方法,为寻找相关材料、研究多极矩奇异物性提供了新思路。此外,还可以在该方法的基础上引入磁场等外场的作用,进一步拓展对多极矩序参量及其相关物性的研究能力。

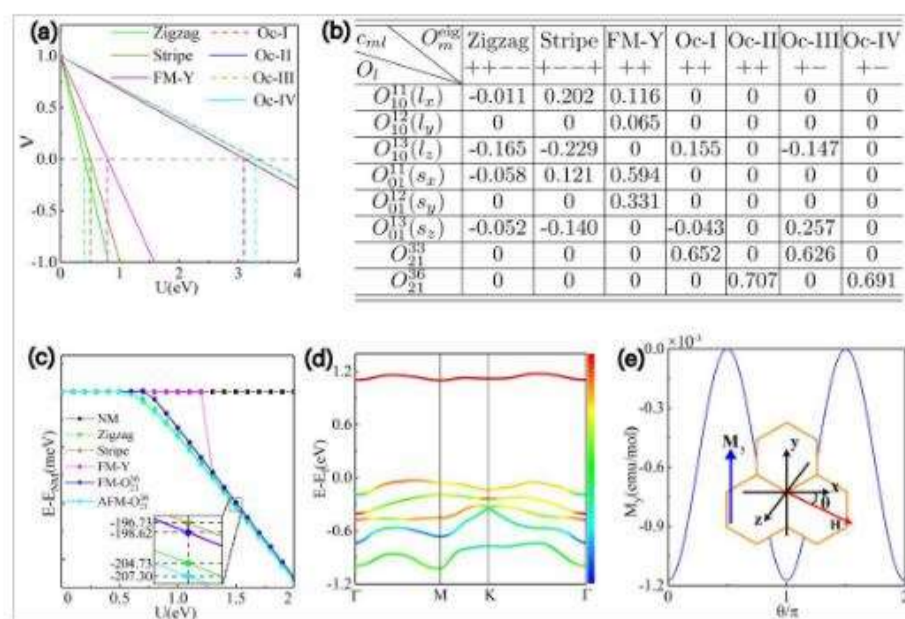


图2 (a)、(b)单层 $\text{RuCl}_3$ 的发现的两种八极矩亚稳态Oc-II (FM-O36 21)和Oc-IV(AFM-O36 21) ; (c)、(d)单层 $\text{RuI}_3$ 中的八极矩基态Oc-IV及其电子结构 ; (e)xz平面内旋转磁场在八极矩态Oc-II中诱导的正交磁矩振荡效应。

该研究工作得到了科技部重点研发计划、国家自然科学基金等项目支持。

论文链接:

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.127.147202>

友情链接: 院史网 | 华中科技大学 | 强电磁国家重点实验室 | 强磁场中心 | 华中科技大学图书馆 | 网络与计算中心 | 中国电力新闻网 | 电工技术学报 | 电源学报 | 教学研究 | 全国高校思政网 | IEEE电力电子学会武汉分会 | 双泽智能翻译系统 |

研究生招生就业: 027-87543035/87556634

本科生招生就业: 027-87542226/87542364

Copyright © 2016 华中科技大学电气与电子工程学院

电话: 86-027-87543228

E-Mail: seee@mail.hust.edu.cn

会议室预约

工会活动预约