

铁基化合物 SrFeAsF 以及 Co 掺杂超导体 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的电子结构和磁性^{*}

刘 魁[†] 李 斌 王 玮 汪 军 刘 楣

(东南大学物理系, 南京 211198)

(2009 年 7 月 27 日收到; 2009 年 11 月 18 日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的全势线性缀加平面波方法, 计算了 SrFeAsF 和 Co 掺杂超导体 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的电子能带结构和磁性. 结果表明, SrFeAsF 的基态构型为条状反铁磁结构, 而 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的条状反铁磁构型与棋盘形能量相差非常小, 体系处于两种构型转变的临界值附近. 由电子能带结构计算表明, Co 掺杂引起 FeAs 杂化能带增宽, 增强了 d 电子的平面巡游性, 同时掺杂后费米能级处在范霍夫奇异峰上, 有利于破坏条状反铁磁序和形成超导电性. 这些结果说明 Co 掺杂超导体 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 表现出由反铁磁涨落引起的超导电性.

关键词: 铁基超导体, 反铁磁序, 掺杂, 交换相互作用

PACC: 7470, 7125, 7510J, 7170G

1. 引 言

2008 年初, Hosono 小组^[1]发现了具有 26 K 超导转变温度的铁基超导体 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ ($x = 0.05 - 0.12$), 这一突破性进展为高温超导的研究揭开了新的一页. 对铁基超导体的研究可以为高温超导研究另辟蹊径, 将有助于揭示高温超导的机理. 随着人们最近一轮研究热潮的兴起, 铁基系列超导材料不断被合成, 超导转变温度也已经提高到了 57.3 K^[2], 是铜氧化物外又一大类高温超导体. 铁基超导材料的母体是传导性不好的半金属, 不具有超导电性, 随着温度的降低出现了由反铁磁自旋密度波涨落引起的结构相变. 而通过电子或空穴掺杂, 能够有效地抑制反铁磁序以及结构相变, 产生超导电性. 在研究掺杂元素对超导电性的影响过程中, 人们发现不仅非 FeAs 层进行电子或空穴掺杂可导致超导电性的产生, 直接对 FeAs 层进行磁性元素 Co/Ni 掺杂同样可以产生超导电性^[3-6]. Sefat 等^[7]提出在 LaFeAsO 母体中用 Co 部分取代 Fe 可以产生超导电性. 在对铁砷超导体的磁性研究中,

Dong 等^[8]首次预言了铁砷基超导体母体基态的条状反铁磁结构, 并由中子衍射实验得到证实.

最近, Matsuishi 等^[9]对 SrFeAsF 母体化合物进行 Co 掺杂研究时发现, 当 Co 掺杂量 $x = 0.125$ ($\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$) 时, 该材料存在超导电性, 超导转变温度 $T_c = 4$ K. 同其他同结构铁基化合物一样, SrFeAsF 母体在室温下具有空间群为 $P4/nmm$ 四方结构. 当温度下降到 175 K 时, 出现由磁涨落引起的结构相变^[10,11], 由四方结构变为正交结构 (空间群为 $Cmme$).

为了研究 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的超导机理, 本文通过计算 SrFeAsF 母体和 Co 掺杂超导体 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 基态的电子能带结构, 对比两者来讨论结构畸变对磁性和超导电性的影响. 首先我们对 Co 掺杂前后两种材料的晶格进行模拟, 结果表明晶格由四方结构变为正交结构, 使两种材料的基态都为条状反铁磁构型 (AF2), 我们的数据证实了反铁磁自旋波涨落伴随着结构相变的实验结论. 然后根据海森堡模型计算了掺杂前后两种材料的磁矩, 最近邻、次近邻的磁交换耦合常数 J_1, J_2 , $J_1/(2J_2)$ 以及顺磁磁化率. 计算结果表明 Co 掺杂可

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10574021, 10704016)、高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20060286044) 和教育部博士点新教师科研基金 (批准号: 20070286036) 资助的课题.

[†]E-mail: sliu@seu.edu.cn

以有效抑制材料反铁磁序,增大 d 电子的巡游性.反铁磁涨落增大是引起 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 超导电性的原因.

2. 计算方法

本文采用基于密度泛函理论的全势线性缀加平面波 (FP-LAPW) 方法的第一性原理程序包 WIEN2K^[12]进行电子和磁性结构的计算,对 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的计算采用虚晶掺杂方法^[13,14]. 计算中交换关联势采用 Wu-Cohen 广义梯度近似 (GGA-WC)^[15]. Sr, Fe, As, F 原子的赝模半径分别取为 2.27, 2.29, 2.03 和 2.27 a.u., 控制平面波展开数 $R_{\text{MT}} \times K_{\text{max}}$ 取为 7.0, 布里渊区划分为包含 $16 \times 16 \times 8$ 个 k 点的网格. SrFeAsF 的单原胞晶格

结构如图 1(a) 所示,空间群为 $P4/nmm$ 四方结构. 原胞中包含 8 个原子,其中 2 个 Fe 原子. 晶格常数和原子坐标取文献[9]中实验数据: $a = b = 0.39994 \text{ nm}$, $c = 0.89727 \text{ nm}$, Sr 原子和 As 原子的内坐标分别为 $z(\text{Sr}) = 0.15903$ 和 $z(\text{As}) = 0.6528$. $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的晶格常数为 $a = b = 0.40018 \text{ nm}$, $c = 0.89434 \text{ nm}$, Sr 原子和 As 原子的内坐标分别为 $z(\text{Sr}) = 0.15821$, $z(\text{As}) = 0.6510$. 为了研究 Co 掺杂前后两种材料的反铁磁性,我们构建一个 $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a \times c$ 的超晶胞结构,如图 1(b) 所示. 超晶胞内包含 4 个 Fe 原子. 棋盘形反铁磁构型 (AF1) 超晶胞的 FeAs 平面自旋位型如图 1(c) 所示,最近邻 2 个 Fe 原子的自旋相反. AF2 超晶胞 FeAs 平面自旋位型如图 1(d) 所示,在 x 方向最近邻 Fe 原子的自旋相同, y 方向最近邻 Fe 原子的自旋相反.

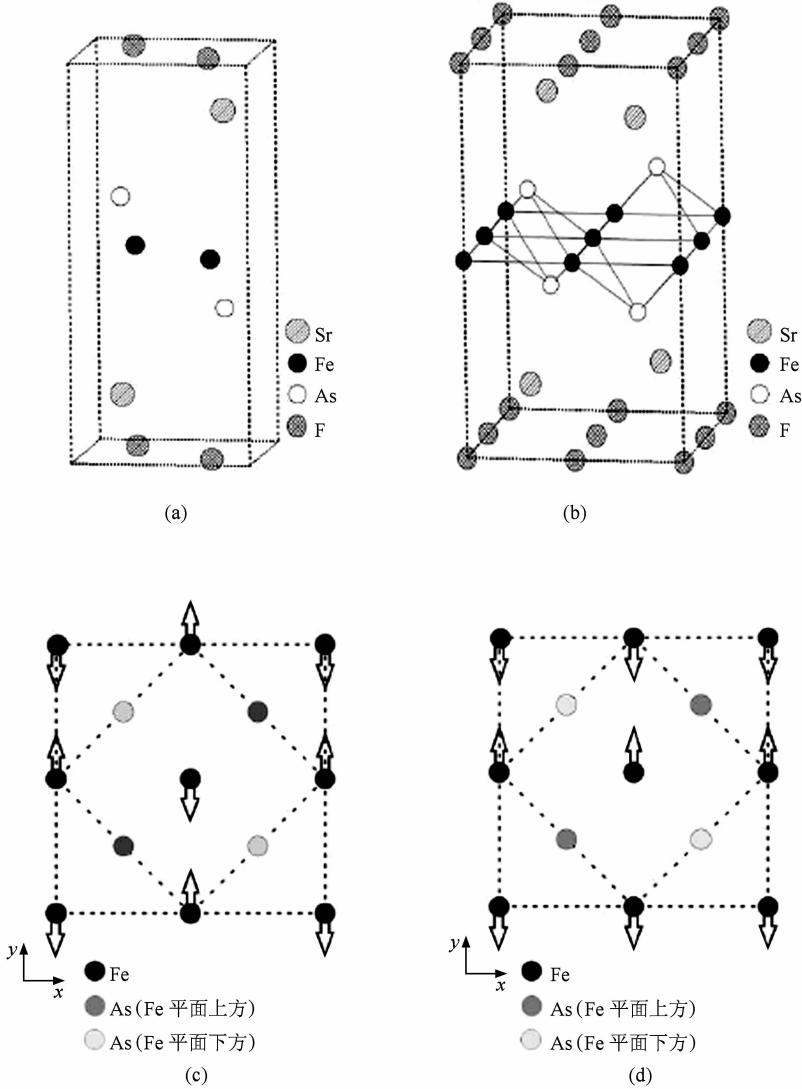


图 1 晶体结构与构型 (a) SrFeAsF 原胞结构, (b) $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a \times c$ 超晶胞结构, (c) AF1 态, (d) AF2 态

为了定量研究 Co 掺杂对 SrFeAsF 材料磁性的影响, 根据先前对铁基超导体磁性研究的分析^[16–18], 考虑海森堡模型来描述 FeAs 平面 2×2 自旋相互作用系统,

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle_{\text{nn}}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle ij \rangle_{\text{nnn}}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$

其中 $\langle ij \rangle_{\text{nn}}$ 和 $\langle ij \rangle_{\text{nnn}}$ 分别表示最近邻及次近邻相互作用, $\mathbf{S}_i$ 表示自旋算符, J_1 和 J_2 表示最近邻和次近邻原子之间的交换耦合常数, J_1 和 J_2 的正负值可表示格点之间自旋平行和反平行. 根据文献[19]附录中推导的公式, 分别计算出系统的铁磁(FM)态, AF1 和 AF2 反铁磁状态与不考虑系统自旋极化的非磁(NM)状态的能量差($\Delta E = E - E_{\text{NM}}$): ΔE_{FM} , ΔE_{AF1} 和 ΔE_{AF2} . 由此计算得到最近邻和次近邻原子交换耦合常数 $J_1 = (\Delta E_{\text{FM}} - \Delta E_{\text{AF1}})/(4S^2)$, $J_2 = (\Delta E_{\text{FM}} + \Delta E_{\text{AF1}} - 2\Delta E_{\text{AF2}})/(8S^2)$.

3. 结果及讨论

首先, 我们找出 SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$

两种材料的稳定基态形式. 最近对 SrFeAsF 的实验结果表明^[8], 在低温 175 K 存在结构相变, 空间群对称性由 $P4/nmm$ 四方结构改变为 $Cmme$ 正交结构, 同时伴随着自旋密度波的异常. 由此可知铁基化合物可能存在 NM, FM, AF1 以及 AF2 等 4 种状态, 对 SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 在 4 种状态下分别进行全方位的晶格参数优化. 第一步固定晶格体积不变对 As 和 Sr 原子内坐标进行优化, 然后固定内坐标和 c/a 值对晶格体积进行优化, 最后考虑到磁相互作用下晶格可能发生的畸变, 对 b/a 值进行优化. 优化后的晶格参数和内坐标 $z(\text{As})$, $z(\text{Sr})$ 值列在表 1 中. 同时, 我们定义畸变因子 $\delta = b/a - 1$, 用它来描述系统晶格由四方结构向正交结构的变化. 采用优化后的数据计算各种状态下系统能量与 NM 状态下的能量差 $\Delta E = E - E_{\text{NM}}$, 所得结果亦列在表 1 中. 为方便比较, 我们在计算 NM 态下的晶格参数和系统能量时均采用超晶胞计算. 进一步的计算表明, 用超晶胞计算 NM 态与用原胞计算的结果并无区别.

表 1 优化后的结构参数和能量差值

	SrFeAsF				SrFe _{0.875} Co _{0.125} AsF			
	NM	AF1	AF2	FM	NM	AF1	AF2	FM
$\sqrt{2}a/\text{nm}$	0.55721	0.55472	0.55633	0.54252	0.55304	0.55261	0.55097	0.54835
$\sqrt{2}b/\text{nm}$	0.55721	0.55472	0.56588	0.54882	0.55304	0.55261	0.55625	0.54974
c/nm	0.88359	0.87965	0.87417	0.89810	0.87395	0.87328	0.86452	0.86654
$z(\text{Sr})$	0.1646	0.1637	0.1635	0.1590	0.1645	0.1636	0.1632	0.1582
$z(\text{As})$	0.6364	0.6394	0.6432	0.6528	0.6350	0.6366	0.6405	0.6510
$\delta/\%$	0.00	0.00	1.72	1.16	0.00	0.00	0.96	0.25
V/nm^3	0.27434	0.27068	0.27520	0.26741	0.26730	0.26668	0.26496	0.26122
$d_{\text{Fe-As}}/\text{nm}$	0.2309	0.2313	0.2346	0.2368	0.2284	0.2289	0.2304	0.2341
$\alpha_{\text{As-Fe-As}}/(^{\circ})$	117.1	116.0	115.5	109.2	117.8	117.2	116.4	112.0
$\beta_{\text{As-Fe-As}}/(^{\circ})$	105.8	106.3	105.8, 107.3	110.1, 109.2	105.5	105.8	105.7, 106.6	108.1, 108.3
$\Delta E/\text{meV}$	0.00	-17.00	-235.86	361.58	0.00	-157.07	-163.07	36.27

由表 1 可以看出, SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 在 FM 态能量值最高, 在 AF2 态能量值最低, 因此 AF2 态为两种材料的基态. 在对 b/a 值进行晶格优化时发现, 两种材料在 NM 和 AF1 状态下晶格不发生畸变, 而 AF2 状态的晶格畸变因子 δ 分别为 1.72%, 0.96%, 表明晶格在自旋平行(x 轴)方向上收缩, 而在自旋反平行(y 轴)方向上伸长, 晶格结构由四方转变为正交, 我们的数据证实了 SrFeAsF 中结构相

变与反铁磁自旋波涨落有关联^[8]. 同时发现, 由于 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的晶格畸变较小, 表明 Co 掺杂使得结构相变得到有效抑制. $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 中 AF1 态能量值为 -157.07 meV, 与 AF2 态能量值 (-163.07 meV) 相差非常小, 因此 Co 掺杂材料中 AF1 与 AF2 两种反铁磁序竞争容易产生无序效应, 破坏其自旋密度波. 此外, $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 在 AF2 态下的体积小于 SrFeAsF , Fe 原子和 As 原子之间的

距离 $d_{\text{Fe-As}}$ 由 0.2346 nm 减小到 0.2304 nm, 同时 As-Fe-As 的夹角 $\alpha_{\text{As-Fe-As}}$ 由 115.5° 增大到 116.4° ,

FeAs_4 四面体在 z 方向上收缩. 这些都说明 Co 掺杂会引起晶胞体积减小, 使得原子间的相互作用增强.

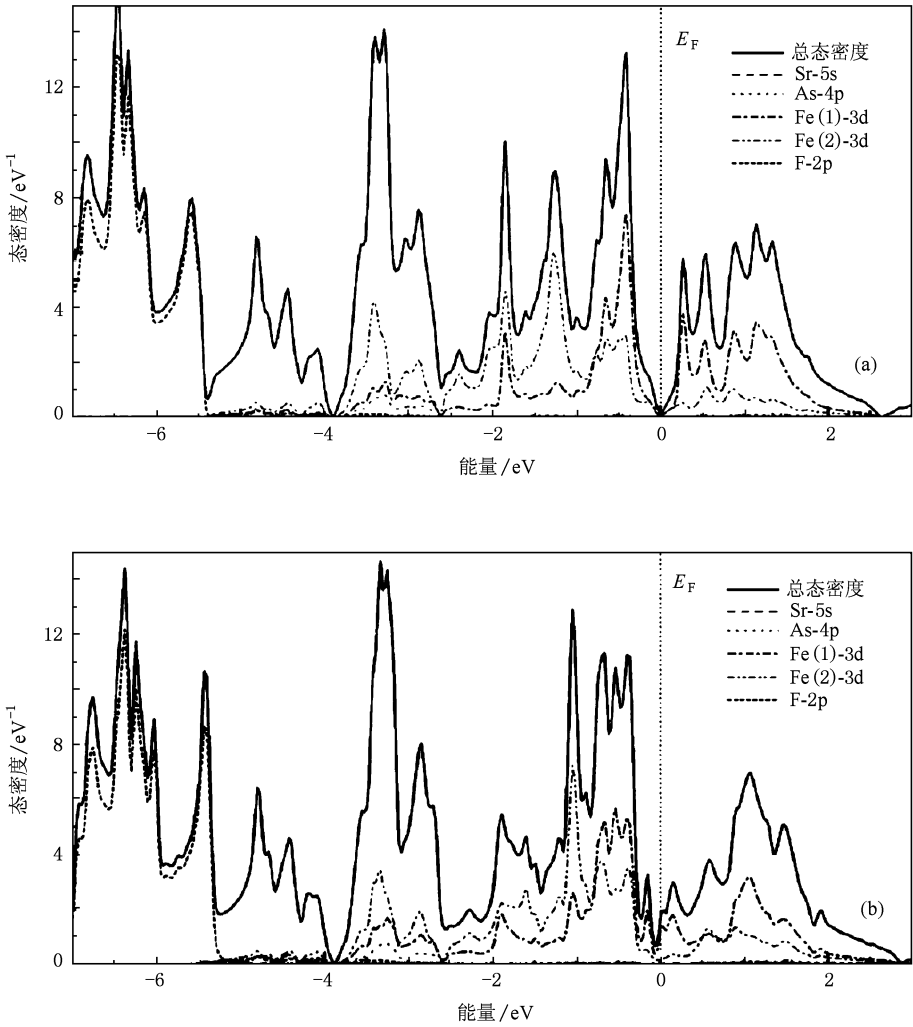


图2 掺杂前后 AF2 态自旋向上电子的态密度 (a) SrFeAsF , (b) $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$

我们计算了 Co 掺杂前后两种材料基态下总态密度和分态密度, 结果示于图 2 中. 从图 2 可以看到, SrFeAsF 在费米能级附近 $-2.6\text{--}3.0\text{ eV}$ 的范围内, 态密度主要由 Fe 的 3d 轨道电子起作用. 在 $-5.5\text{--}-2.6\text{ eV}$ 范围内, 态密度主要来自于 As 的 4p 轨道电子与 Fe 的 3d 轨道电子的杂化贡献. F 的 2p 电子态密度占据了 $-7.0\text{--}-5.5\text{ eV}$ 的能量范围, 而 Sr 的 5s 电子在 $-7.0\text{--}3.0\text{ eV}$ 范围内的态密度贡献非常小. 以上结果表明, $(\text{FeAs})^{\delta-}$ 层对超导电性的产生起主要作用, 而 $(\text{SrF})^{\delta+}$ 层则起到提供电子的作用. 同时发现 Co 掺杂后由于体积减小, 原子相互作用增强, Fe 的 3d 电子的带宽由 8.10 eV 增加到 8.37 eV. 掺杂前, 在 -3.8 eV 能量及费米能级处分别存在着两个赭能隙, 掺杂后费米能级处的赭能

隙消失, 总态密度 $N(E_F)$ 由掺杂前的 0.30 eV^{-1} 上升到 1.69 eV^{-1} .

我们还进一步研究了 SrFeAsF (图 3 (a)) 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ (图 3 (b)) 在费米面附近 ($-1.0\text{--}1.0\text{ eV}$ 范围内) Fe 的 3d 轨道电子能带结构和分态密度, 结果示于图 3 中, 其中 $3d_{xy}$ 和 $3d_{yz}$ 轨道的贡献在图中用粗线表示. 为了清晰起见, 标注高对称点的布里渊区和 SrFeAsF 在 $k_z = 0$ 平面上的费米面示于图 3 (c) 和 (d) 中, 超胞和原胞的高对称点分别用 X, M 和 $\bar{X}, \bar{M}$ 表示, 在图 3 (d) 中, 实线框表示超胞的布里渊区, 虚线框表示原胞的布里渊区. 同时应该注意到由于超胞的晶格常数 a, b 均为原单胞晶格常数的 $\sqrt{2}$ 倍, 因此布里渊区沿 x 方向和 y 方向的边长应为单胞所对应的倒格子边长的

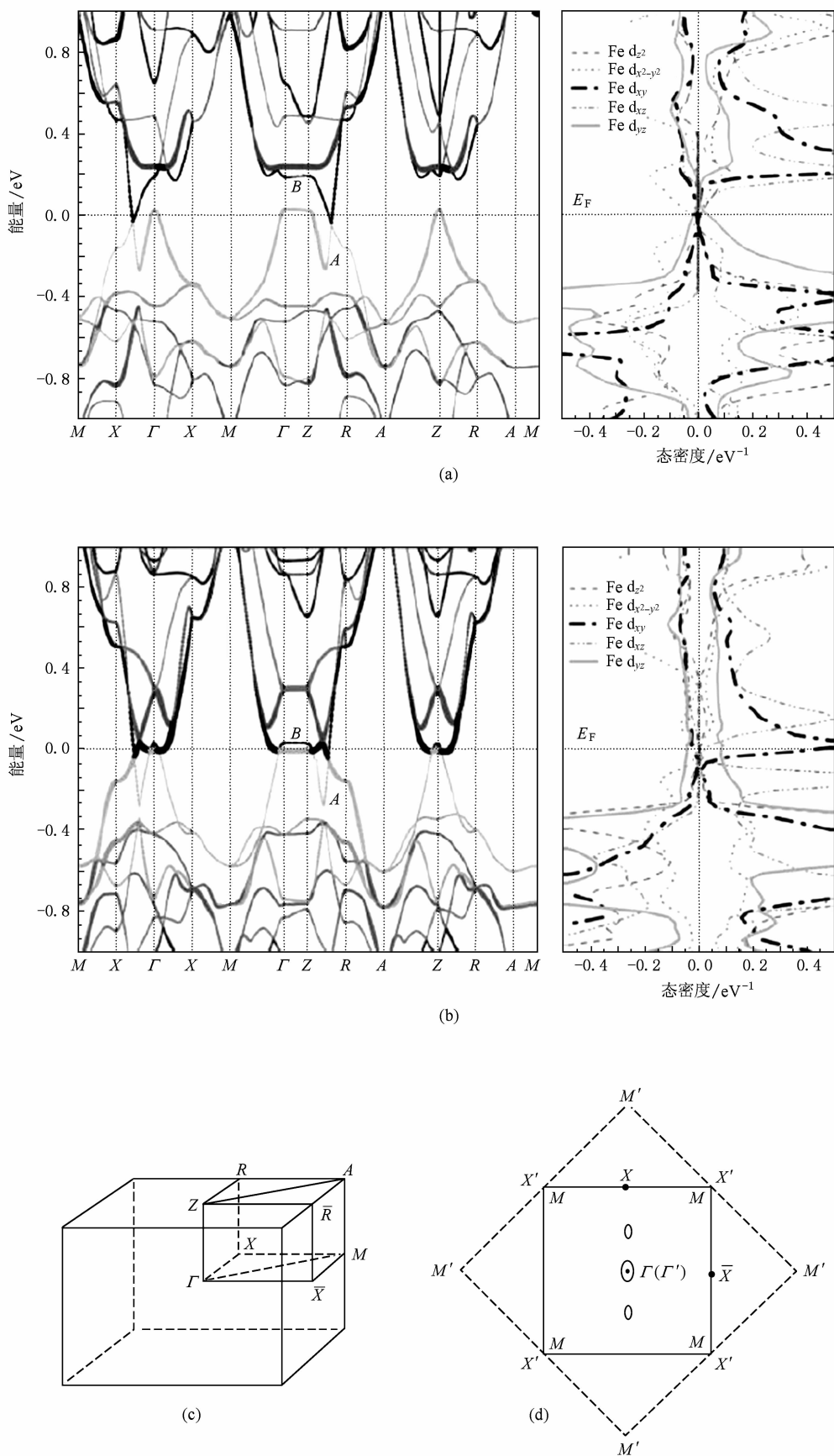


图 3 掺杂前后能带结构和 Fe 3d 轨道电子的分态密度及布里渊区 (a) SrFeAsF ; (b) $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$, 其中 $3d_{xy}$ 和 $3d_{yz}$ 轨道的贡献用粗线表示; (c) 标注了高对称点的布里渊区; (d) SrFeAsF 在 $k_y=0$ 平面上的费米面, 虚线框表示原胞的布里渊区, 实线框表示超胞的布里渊区

$1/\sqrt{2}$. 我们计算得到的费米面与能带色散关系表明空穴与电子费米面分布在 $\Gamma-X, Z-R$ 之间, 这一结果与文献[8,9]的结果是一致的.

比较图 3 (a) 和 (b) 的能带结构可以看到, SrFeAsF 有 A, B 两条能带穿过费米能级, 而掺杂后只有能带 B 穿过费米能级, 能带 A 在 $\Gamma-Z$ 处刚好落在费米能级上. 由于能带 A 和能带 B 在 $\Gamma-Z$ 方向色散很小, 表现出平面性, 使得掺杂后态密度在费米能级附近形成范霍夫奇异 (vHs) 峰, 从而引起费米能级处的总态密度升高. 从部分态密度曲线可以看出: 掺杂前费米能级处的态密度主要由 $3d_{yz}$ 轨道 (粗实线) 贡献. 掺杂后费米面的态密度主要由 $3d_{yz}$ 和 $3d_{xy}$ 轨道 (粗点划线) 贡献, 并且 $3d_{xy}$ 轨道的贡献要远大于 $3d_{yz}$ 的贡献, 说明超导载流子主要由 $x-y$ 平面内的电子提供. 同时, 由于电子掺杂费米面的态密度接近 vHs 峰上, 因此增高了态密度.

图 4 给出了 SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 基态的电荷分布, 图 4 (a) 和 (b) 分别为 SrFeAsF 在 (001) 和 (110) 面上的电荷分布, (c) 和 (d) 分别为 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 在 (001) 和 (110) 面上的电荷分布. 由图 4 (a), (b) 可见, SrFeAsF 在 (001) 平面上 Fe-Fe 原子之间的电荷分布表现出平面各向异性. 在 x 方向 Fe-Fe 原子间电荷有较大的交叠, 表现出巡游电子的特性. 而在 y 方向电荷直接作用较小, Fe-Fe 原子间电荷通过 As 表现出超交换的反铁磁性. 在 (110) 面上 Fe 原子的 3d 电子和 As 原子的 4p 电子之间则存在着很强的杂化相互作用, Fe-As-Fe 之间电荷分布密集, 表现出很强的 Fe 原子次近邻反铁磁超交换作用. 而由图 4 (c), (d) 可见, $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 在 (001) 和 (110) 面上存在着类似的电荷分布图像, 但是在 (001) 面上巡游电荷密度增大, 而平面各向异性减弱. 这可能是由于晶格畸变变小所致.

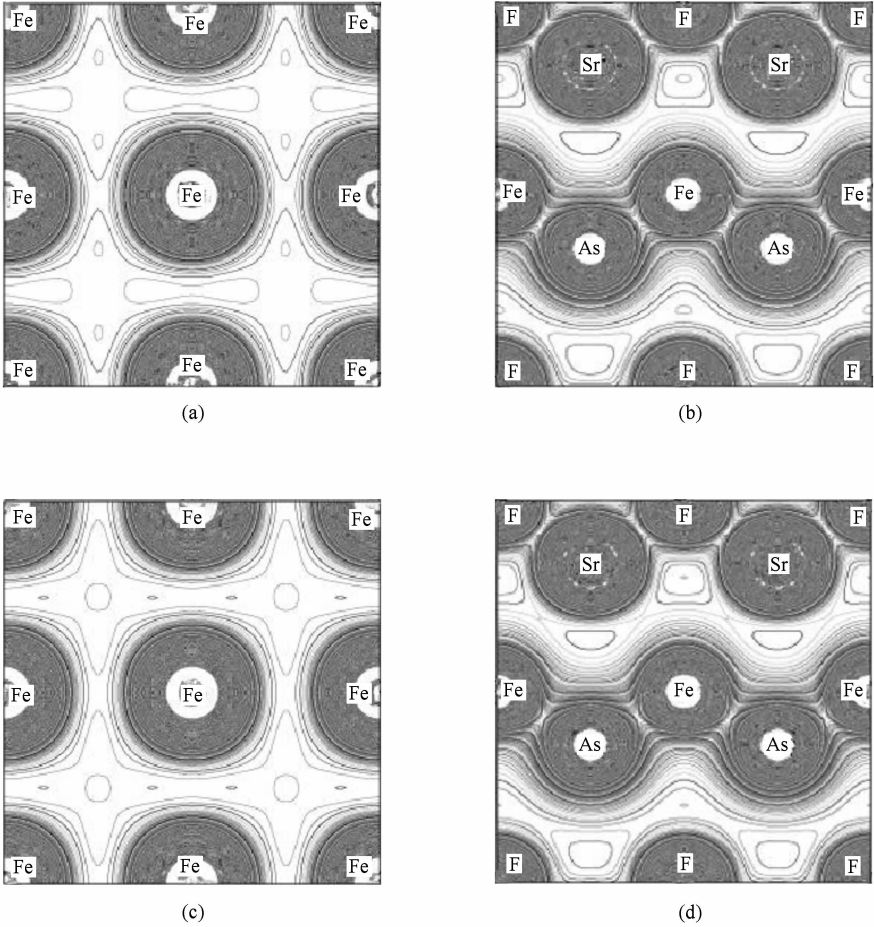


图 4 SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 在 AF2 态下的电荷分布 (a) SrFeAsF (001) 面, (b) SrFeAsF (110) 面, (c) $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ (001) 面, (d) $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ (110) 面

表 2 SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的基态相关物理量的对比

	SrFeAsF	$\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$
$N(E_{\text{F}})/\text{eV}^{-1}$	0.30	1.69
$\gamma_0/\text{mJ}\cdot\text{K}^{-2}\text{mol}^{-1}$	1.41 (1.52 ^[10])	7.95
$\chi_0/10^{-7}\text{Am}^2\cdot\text{mol}^{-1}$	0.19	1.09
$M_{\text{Fe}(\text{Co})}/\mu_{\text{B}}$	1.54	1.04
J_1/meV	94.6	48.4
J_2/meV	102.0	25.6
$J_1/(2J_2)$	0.46	0.94

最后,我们用 SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 基态费米能级处的电子态密度 $N(E_{\text{F}})$,计算出电子比热系数 γ_0 以及摩尔顺磁磁化率 χ_0 ,其中 $\gamma_0 = (2\pi^2/3)N(E_{\text{F}})k_{\text{B}}^2$, $\chi_0 = 2\mu_{\text{B}}^2N(E_{\text{F}})$. 我们还计算了 $\text{Fe}(\text{Co})$ 原子磁矩 $M_{\text{Fe}(\text{Co})}$ 、交换耦合常数 J_1 和 J_2 ,结果列在表 2 中. 由于 Co 掺杂后费米能级处的电子态密度增加,导致电子比热系数 γ_0 以及磁化率 χ_0 均有所上升. 计算得到 SrFeAsF 母体的电子比热系数 $\gamma_0 = 1.41\text{ mJ}\cdot\text{K}^{-2}\text{mol}^{-1}$,与文献[10]的实验结果($\gamma_0 = 1.52\text{ mJ}\cdot\text{K}^{-2}\text{mol}^{-1}$)符合很好. 而掺杂后 χ_0 由 0.19 增大到 1.09 表明,在 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 材料中由于巡游电子密度增大,有序的自旋结构遭到了抑制.

对 Co 掺杂前后两种材料磁性变化的计算结果表明, SrFeAsF 中 Fe 原子磁矩为 $1.54\mu_{\text{B}}$, J_1 和 J_2 分别为 94.6 和 102.0 meV. $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 中 $\text{Fe}(\text{Co})$ 原子磁矩为 $1.04\mu_{\text{B}}$,同时 J_1 和 J_2 减小为 48.4 和 25.6 meV,表明 Co 掺杂材料中磁性减弱. 这是由于 Co 掺杂引起晶胞体积减小,使得原子间的相互作用增强, Fe 的 d 电子杂化能带增宽,使得局

域磁矩减小,磁性减弱^[20]. $J_1/(2J_2)$ 的值是判断反铁磁构型的重要参量^[21],对于 AF1 态,应有 $J_1/(2J_2) > 1$,对于 AF2 态, $J_1/(2J_2) < 1$. 我们计算得到 Co 掺杂后 $J_1/(2J_2)$ 的值由 0.46 上升到 0.94,接近于两种反铁磁构型改变的临界值. 表明在 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 中 AF2 构型已不稳定, Co 掺杂后基态处在反铁磁 AF2 与 AF1 构型改变的临界值处,磁涨落增大.

4. 结 论

我们分别优化了 SrFeAsF 和 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 的晶格结构,计算了基态的电子能带结构和磁性质. 通过比较两种材料的费米面态密度、原子磁矩、交换耦合常数 $J_1, J_2, J_1/(2J_2)$ 和顺磁磁化率等参数可以看出,由于 Fe 平面晶格由四方到正交畸变, SrFeAsF 的基态为较稳定的 AF2 构型, Co 掺杂后由于结构畸变受到抑制, AF1 构型的能量与基态 AF2 构型能量相差很小, AF2 构型被有效抑制. 同时 Co 掺杂会引起晶胞体积减小,增大电子能带杂化,使得 $\text{Fe}(\text{Co})$ 原子的局域磁矩减小,交换耦合常数 J_1, J_2 均下降,且 $J_1/(2J_2) \approx 1$,系统处于 AF2 改变为 AF1 的临界状态,平面自旋涨落增大. 此外, Co 掺杂后费米能级处的费能隙消失,能带宽度增大,电子的巡游性增强. 电子掺杂使费米面上升到原费能隙之上的态密度 v_{Hs} 峰上,有利于 Co 掺杂后材料的超导电性. 因此我们认为 Co 掺杂超导体 $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ 表现为反铁磁涨落引起的超导电性.

感谢东南大学物理系计算中心提供计算支持.

[1] Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, Hosono H 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296

[2] Wei Z, Li H O, Hong W L, Lü Z M, Wu H Y, Guo X F, Ruan K Q 2008 *J. Supercond. Nov. Magn.* **21** 213

[3] Wang C, Li Y K, Zhu Z W, Jiang S, Lin X, Luo Y K, Chi S, Li L J, Ren Z, He M, Chen H, Wang Y T, Tao Q, Cao G H, Xu Z A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 054521

[4] Xiao Y, Su Y, Mittal R, Chatterji T, Hansen T, Kumar M N, Matsuishi S, Hosono H, Brueckel T 2009 *Phys. Rev. B* **79** 060504

[5] Cao G H, Jiang S, Lin X, Wang C, Li Y K, Ren Z, Tao Q, Feng C M, Dai J H, Xu Z A, Zhang F C 2009 *Phys. Rev. B* **79** 174505

[6] Tarascon J M, Greene L H, Barboux P, McKinnon W R, Hull G W, Orlando T P, Delin K A, Foner S, McNiff E J 1987 *Phys. Rev. B* **36** 8393

[7] Sefat A S, Huq A, Mcgruire M A, Jin R, Sales B C, Mandrus D, Cranswick L M D, Stephens P W, Stone K H 2008 *Phys. Rev. B* **78** 104505

[8] Dong J, Zhang H J, Xu G, Li Z, Li G, Hu W Z, Wu D, Chen G F, Dai X, Luo J L, Fang Z, Wang N L 2008 *Europhys. Lett.* **83** 27006

[9] Matsuishi S, Inoue Y, Nomura T, Hirano M, Hosono H 2008 *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** 113709

[10] Tegel M, Johansson S, Weiss V, Schellenberg I, Hermes W, Pottgen R, Johrendt D 2008 *Europhys. Lett.* **84** 67007

- [11] Han F, Zhu X, Mu G, Cheng P, Wen H H 2008 *Phys. Rev. B* **78** 180503
- [12] Blaha P, Schwarz K, Sorantin P, Trickey S B 1990 *Comput. Phys. Commun.* **59** 399
- [13] Zhang J H, Ma R, Liu S, Liu M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4816 (in Chinese) [张加宏、马 荣、刘 甦、刘 楣 2006 物理学报 **55** 4816]
- [14] Ma R, Zhang J H, Du J L, Liu S, Liu M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6580 (in Chinese) [马 荣、张加宏、杜锦丽、刘 甦、刘 楣 2006 物理学报 **55** 6580]
- [15] Wu Z G, Cohen R E 2006 *Phys. Rev. B* **73** 235116
- [16] Drew A J, Niedermayer C, Baker P J, Pratt F L, Blundell S J, Lancaster T, Liu R H, Wu G, Chen X H, Watanabe I, Malik V K, Dubroka A, Rössle M, Kim K W, Baines C, Bernhard C 2009 *Nat. Mater.* **8** 310
- [17] Yao D X, Carlson E W 2008 *Phys. Rev. B* **78** 052507
- [18] Baker P J, Franke I, Lancaster T, Blundell S J, Kerslake L, Clarke S J 2008 *Phys. Rev. B* **79** 060402
- [19] Ma F J, Lu Z Y, Xiang T 2008 *Phys. Rev. B* **78** 224517
- [20] Si Q, Abrahams E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 076401
- [21] Yildirim T 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 057010

Electronic structure and magnetism of SrFeAsF and Co-doped superconductor $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}^*$

Liu Su[†] Li Bin Wang Wei Wang Jun Liu Mei

(Department of Physics, Southeast University, Nanjing 211198, China)

(Received 27 July 2009; revised manuscript received 18 November 2009)

Abstract

Using the full-potential linearized augmented plane wave method, we studied the electronic structure and magnetic properties of SrFeAsF and Co-doped superconductor $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$. It is found that SrFeAsF exhibits a stripe antiferromagnetic ground state, and in $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$ the checkboard antiferromagnetic state become a competitive candidate. The Co-doping drastically suppresses the antiferromagnetic order, increases the density of states near the Fermi level and enhances the itinerancy of 3d electrons. These results show that the superconductivity is induced by the magnetic fluctuations in $\text{SrFe}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{AsF}$.

Keywords: iron-based superconductor, antiferromagnetic order, doping, exchange interaction

PACC: 7470, 7125, 7510J, 7170G

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10574021, 10704016), the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China (Grant No. 20060286044) and the Scientific Research Foundation for the Young Scholars of the Doctoral Program of Ministry of Education, China (Grant No. 20070286036).

[†] E-mail: sliu@seu.edu.cn