

LiFeAs 超导体中磁性与声子软化*

李 斌^{1)†} 邢钟文²⁾ 刘 楣¹⁾

1) (东南大学物理系, 南京 211189)

2) (南京大学材料科学与工程系, 南京 210093)

(2010年9月28日收到; 2010年11月5日收到修改稿)

运用第一性原理密度泛函理论研究了铁基超导体 LiFeAs 的电子结构和声子谱. 计算得到的 LiFeAs 基态具有涨落的条型反铁磁构型. 通过比较 LiFeAs 在非磁态与条形反铁磁态下的声子态密度, 发现, LiFeAs 中各向异性自旋相互作用的竞争产生了不稳定的自旋密度波和部分晶格位置弛豫, 导致 Fe 和 As 原子振动模式的软化, 从而提高电声子耦合强度. 因此, 自旋-声子相互作用对非常规超导电性有重要贡献.

关键词: 铁基超导体, 反铁磁序, 超导电性, 电声子耦合

PACS: 74.70.-b, 75.50.Ee, 74.25.-q, 63.20.kd

1. 引言

层状铁基超导体的发现开辟了研究非常规超导电性的新课题. 早先的理论计算提出, 常规的电声子耦合机理并不能解释铁基超导体的超导电性. 第一性原理计算得到的铁基超导材料中的电声子耦合常数 λ 都很弱 (LaFeAsO: 0.21^[1]; FeSe: 0.17^[2]; CaFe₂As₂: 0.23^[3]; LiFeAs: 0.26^[4]), 不能解释实验上较高的超导转变温度. 但最近的实验和理论对铁基超导体的电声子耦合强度有了新的认识, Tacon 等^[5]用非弹性 X 射线散射研究了 SmFeAsO 的晶格动力学性质, 发现在 23 meV 附近的三个光学模式中有一个模式 (A_{1g} (1), B_{1g}) 在 F 掺杂后引起了强的重整化, 提出声子振动模式的软化对超导电性有重要贡献. Liu 等^[6]对 SmFeAsO 和 BaFe₂As₂ 掺杂超导体的同位数效应测量表明铁同位素替代对自旋密度波和超导相变温度有同样的影响, 这一结果表明磁性和电-声子耦合有重要的关系. McGuire 等^[7]通过研究 LaFeAsO 中四方到正交相变区域的输运行为证明强的电声子耦合存在于高温四方相. 掺杂将抑制结构相变和自旋密度波, 但允许四方相中的强电声子耦合扩展到低温超导相. 理论上 Egami 等^[8]提出通过引入自旋相互作用可能加

强铁基超导体中电声子耦合. Huang 等^[4]用冻结声子法计算了 LiFeAs 中 Fe 平面上各向异性的自旋作用可以软化 Fe 原子振动频率, 提高电声子耦合作用. 近来在对“1111”系列和“122”系列铁基化合物晶格动力学的理论计算研究结果表明掺杂可以引起声子的软化, 提高电声子耦合强度^[9-11].

之前对“1111”系列 (如 REFeAsO, RE 为稀土元素) 和“122”系列^[12] (如 AEF₂As₂, AE 为碱金属) 铁基超导体的实验研究表明它们的母体并没有超导电性但表现有自旋密度波, 通过电子 (空穴) 掺杂, 引入化学压力或外界施加压力抑制了自旋密度波, 产生超导电性, 但“111”结构 LiFeP ($T_c = 6$ K^[13]) 与 LiFeAs ($T_c = 18$ K^[14]) 无需掺杂或加压便具有超导电性. 实验表明 LiFeAs 中不存在结构和磁相变^[15-18], 仅在接近其超导转变温度时才观测到 Fe 原子上有很弱的局域磁矩, 并没发现自旋密度波行为^[19]. 但是最近的实验证实了在同构的化合物 Na_{1-x}FeAs ($T_c = 9-25$ K) 中存在磁有序^[20].

本文用密度泛函理论计算“111”结构铁基超导体 LiFeAs 中的电, 声子谱, 研究其结构, 磁性与声子软化的关系. 我们计算得到 LiFeAs 基态的电子结构表明, 无需掺杂控制, LiFeAs 基态与其他掺杂后的铁基超导体都具有涨落的反铁磁序和不稳定的

* 国家自然科学基金 (批准号: 11074109, 110704033, 110704032), 江苏省自然科学基金 (批准号: SBK200920627) 和中国基础研究重点项目 (批准号: 2010CB923404.) 资助的课题.

† E-mail: alex968873@yahoo.com.cn

结构^[21-25]. 通过比较 LiFeAs 在非磁 (NM) 态与条形反铁磁 (AF2) 态下的声子态密度, 我们得到的结论是: 考虑到铁基超导体中在 Fe 平面上各向异性自旋相互作用后, Fe-As 键长的增大使 Fe 和 As 原子在平面振动模式 ($E_g(1)$, 16 meV) 和垂直振动模式 ($A_{1g}(1)$, 25 meV) 的声子频率发生软化, 同时 Li, As 间距离的减小也引起了高频 $A_{1g}(2)$ 声子频率有很小的提高. 中频声子的软化与最近 Tacon 等^[5] 用非弹性 X 射线散射实验得到的 F 掺杂 SmFeAsO 在 23 meV 处的声子软化结果是一致的. 以上计算结果表明, LiFeAs 中涨落的反铁磁序背景下各向异性的自旋相互作用导致了 Fe 和 As 原子振动模式的软化, 从而提高电声子耦合强度. 因此, 自旋-声子相互作用对非常规超导电性有重要贡献.

2. 计算方法

本文采用全势线性缀加平面波 (FP-LAPW) 方法的 WIEN2K 程序包进行了原子坐标优化以及电

子能带结构计算, 其中对条状反铁磁态的计算采用 $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ 的超胞模型. 交换关联势采用 Wu-Cohen 广义梯度近似 (GGA-WC)^[26], 其在结构优化方面存在优势. 布里渊区划分为 $11 \times 11 \times 7$ 的 k 点网格, 平面波展开量 $R_{\text{mt}} \times K_{\text{max}} = 7.0$ (R_{mt} 为 Muffin-tin 半径, K_{max} 为平面波截断值), 自洽计算的能量收敛判据为 0.01 mRy.

我们用基于超软赝势平面波方法的 Quantum Espresso 程序包^[27] 计算声子谱以及电声子耦合常数. 交换关联势采用 Pedrew, Burke, Ernzerhof (PBE) 广义梯度近似 (GGA-PBE)^[28]. 对于原胞, 自洽计算的能量收敛判据为 10^{-8} Ry, 布里渊区 k 点取样为 $16 \times 16 \times 8$, 声子谱计算的能量收敛判据为 10^{-16} Ry, 布里渊区 q 点取样为 $4 \times 4 \times 2$, 波函数截断能取为 30Ry, 电荷密度截断能取为 300Ry. 对于 $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ 的超胞, 能量收敛判据与原胞相同, 自洽计算的布里渊区 k 点取样为 $8 \times 8 \times 6$, 声子谱计算的布里渊区 q 点取样为 $2 \times 2 \times 2$, 波函数截断能取为 60Ry, 电荷密度截断能取为 600Ry.

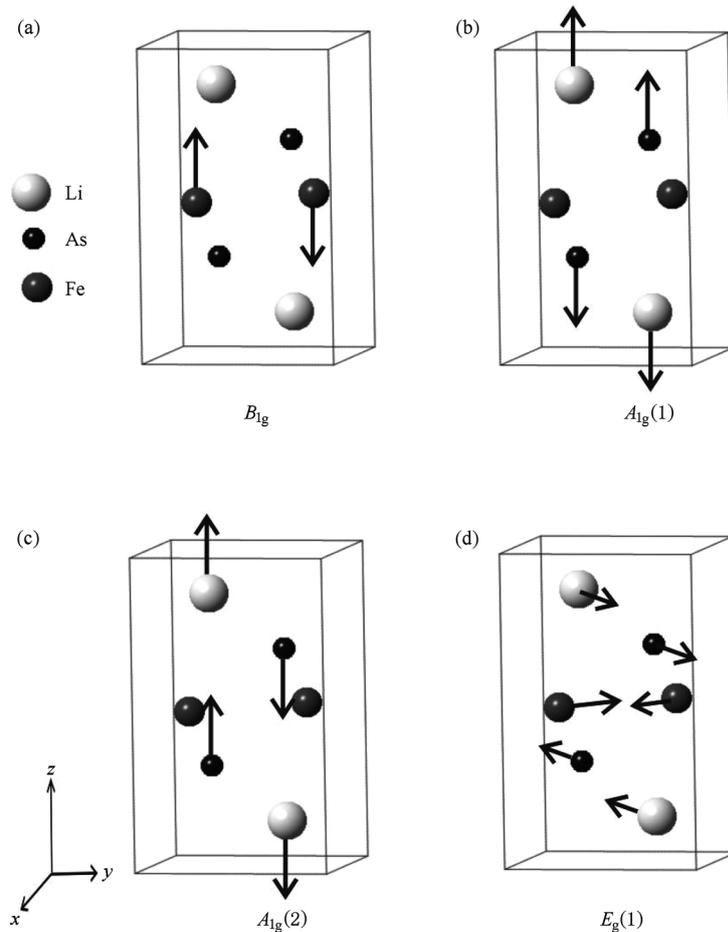


图 1 LiFeAs 原胞结构与原子振动模式 (箭头表示原子位移 μ 方向)

3. 结果与讨论

LiFeAs 在常温下为四方晶系结构,空间群为 $P4/nmm$. 每个原胞包含一个 $(\text{Fe}_2\text{As}_2)^{2-}$ 层,不同平面的 2 个 Li 原子将 $(\text{Fe}_2\text{As}_2)^{2-}$ 层隔开,如图 1 所示. 为研究反铁磁构型,我们构建一个包含四个 LiFeAs 分子的 $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ 超胞,超胞中 Fe 平面上 4 个 Fe 原子存在四种构型:非磁(NM),铁磁(FM),棋盘状反铁磁(AFMI,近邻 Fe 原子自旋相反)和条状反铁磁(AF2,次近邻 Fe 原子自旋相反)构型. 我们输入的原胞结构参数来自于文献[14]中的实验数据: $a = b = 3.79147 \text{ \AA}$, $c = 6.363917 \text{ \AA}$, $Z(\text{Li}) = 0.8459$, $Z(\text{As}) = 0.2635$. 在保持系统体积及对称性不变的情况下,对内坐标和 c/a 进行晶格参数优化,优化后得到的结构参数列在表 1 中. 表中 $Z(\text{Li})$, $Z(\text{As})$ 表示内坐标参数, $d_{\text{Fe-As}}$ 表示 Fe 原子与 As 原子之间的键长, $d_{\text{Li-As}}$ 表示 Li 原子与 As 原子之间的距离, M_{Fe} 表示 Fe 原子磁矩,每个 LiFeAs 分子的某一状态与 NM 态之间的能量差 $\Delta E = E - E_{\text{NM}}$.

表 1 四种磁态下结构优化后的 a, c 长度, 原子内坐标, 磁矩以及与非磁态的能量差

	NM	AF1	AF2	FM
$a/\text{\AA}$	3.8171	3.8042	3.7789	3.8016
$c/\text{\AA}$	6.2788	6.3214	6.4063	6.3299
$Z(\text{Li})$	0.8299	0.8253	0.8336	0.8318
$Z(\text{As})$	0.2865	0.2858	0.2806	0.2866
$d_{\text{Fe-As}}/\text{\AA}$	2.332	2.335	2.355	2.332
$d_{\text{Li-As}}/\text{\AA}$	2.796	2.780	2.770	2.791
$M_{\text{Fe}}/\mu_{\text{B}}$	—	0.12	1.32	0.29
$\Delta E/\text{meV}$	0	0.12	-49.25	38.11

比较表 1 中各种状态的 M_{Fe} 和 ΔE 值可以看到, LiFeAs 在条型反铁磁态能量最低,即 AFM2 态为基态. 计算得到的基态原子磁矩为 $1.32\mu_{\text{B}}/\text{Fe}$, 与 Li 等^[29]用自旋极化 GGA 方法计算得到的结果 ($1.5\mu_{\text{B}}/\text{Fe}$) 相近, 比掺杂超导体母体化合物 BaFe_2As_2 ($1.75\mu_{\text{B}}/\text{Fe}$ ^[21]), SrFeAsF ($1.54\mu_{\text{B}}/\text{Fe}$ ^[22]) 和 LaFeAsO ($2.6\mu_{\text{B}}/\text{Fe}$ ^[23]) 的 GGA 计算结果要小. 同时我们发现, 由于受到 AFM2 态中各向异性 Fe-Fe 原子间最近邻自旋相互作用力的影响, 原胞的 a 轴比实验值有所减小, 而原胞的 c 轴有所增加, 导致了 Fe-As 原子的键长比不计及自旋相互作用的非磁态

增大了 0.023\AA , Li 和 As 原子的距离比非磁态下的距离减小了 0.026\AA .

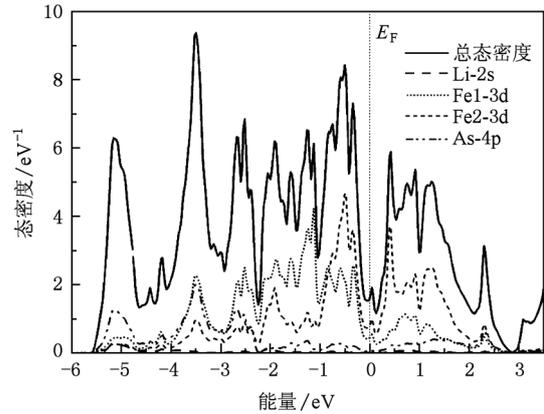


图 2 LiFeAs 基态电子态密度(自旋向上部分), Fe1, Fe2 分别表示自旋相反两种 Fe 原子

我们计算得到 LiFeAs 基态电子态密度分布表示在图 2 中. 从图 2 可以看到, 费米面附近态密度主要来自于 Fe-3d 电子, As-4p 和 Fe-3d 电子杂化带分布在 -5.6 eV 到 2.9 eV 范围内, 能带宽度为 8.5 eV , 表明 LiFeAs 有较好的金属性. 费米能级位于态密度曲线中的一个小的 van Hove 奇异峰附近, 该处的总态密度值 $N(E_{\text{F}}) = 3.42 \text{ eV}^{-1}/\text{f. u.}$, 这一结果与最近角分辨光电子谱实验在 LiFeAs 电子能带结构中观察到的 van Hove 奇异峰是一致的^[18]. 根据电子比热系数公式: $\gamma_0 = \pi^2 N(E_{\text{F}}) k_{\text{B}}^2/3$, 计算得到 $\gamma_0 = 8.04 \text{ mJ/mol. K}^2$. 根据 Stoner 判据因子公式: $\xi = N(E_{\text{F}}) \cdot I/2$, Fe 的交换关联积分 I 取为 0.7 eV , 计算得到 $\xi = 1.2$, Stoner 判据因子大于 1 表明在 AFM2 态中有大的铁磁涨落. Singh 等^[25]用密度泛函理论计算了 LaFeAs (OF) 电子能带结构, 得到了 $N(E_{\text{F}}) = 2.62 \text{ eV}^{-1}/\text{f. u.}$, $\gamma_0 = 6.5 \text{ mJ/mol. K}^2$, $\xi = 0.92$. 与 F 掺杂铁基超导体 LaFeAs (OF) 对比, LiFeAs 中无需掺杂控制, 费米面处较高的电子态密度导致了巡游磁性, 因此基态为涨落的反铁磁态. 涨落的反铁磁序不易产生结构相变但能产生晶格的弛豫, 这就解释了在实验中观察不到 LiFeAs 中的结构相变行为.

为了研究 LiFeAs 中的电声子耦合强度, 我们首先不考虑自旋作用, 用原胞计算 LiFeAs 在非磁态的声子谱. LiFeAs 原胞在 Γ 点处点群为 D_{4h} , 晶格振动模式可以分解成以下不可约表示: $\Gamma = 3A_{2u} + 3E_u + 3E_g + B_{1g} + 2A_{1g}$, 其中 A_{2u}, B_{1g}, A_{1g} 为非简并模式,

E_u 和 E_g 为双重简并模式. 在这 18 支振动模式中包括 3 支声学模和 15 支光学模. 我们在图 1(a), (b), (c) 和 (d) 中标出了 B_{1g} , $A_{1g}(1)$, $A_{1g}(2)$ 和 $E_g(1)$ 模式中的原子位移 μ 方向. 可以看出 B_{1g} 模式对应于 Fe 原子在垂直平面方向相对振动; $A_{1g}(1)$ 模式对应于 Fe 平面上下的 As(Li) 原子在垂直平面方向背对平面运动; $A_{1g}(2)$ 模式对应于平面上下的 As 原子在垂直平面方向向着平面运动, Li 原子与 As 原子运动方

向相反; $E_g(1)$ 模式是原子间在 xy 平面方向上的相对振动: Fe-Fe 原子间相对振动, 平面上下两支的 As(Li) 原子相对振动. 不考虑在 Γ 点处频率为零的 3 支声学模 (包括 1 支非简并 A_{2u} 和 1 支双重简并 E_u), 我们将计算得到的 Γ 点光学模振动频率列在表 2 中, 其中包括拉曼活性和红外活性两部分. 最近 JiShi 等^[30] 对 LiFeAs 声子振动频率的计算结果也列在表 2 中.

表 2 LiFeAs 在 Γ 点的振动频率与文献[28]中数据对比

		频率/meV					
Raman	本文	17.0(E_g)	24.9(A_{1g})	30.5(B_{1g})	30.9(E_g)	38.6(A_{1g})	40.0(E_g)
	文献[30]	15.0(E_g)	23.3(A_{1g})	27.9(B_{1g})	30.0(E_g)	44.1(A_{1g})	36.5(E_g)
IR	本文	30.3(E_u)	32.4(A_{2u})	35.3(E_u)	39.4(A_{2u})		
	文献[30]	28.3(E_u)	34.3(A_{2u})	34.2(E_u)	41.9(A_{2u})		

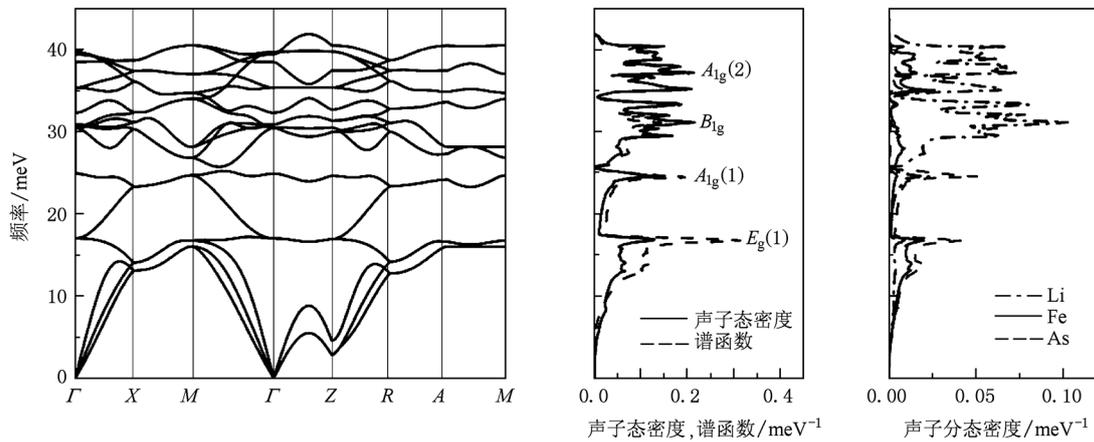


图 3 LiFeAs (NM) 的声子谱, 声子态密度, 谱函数以及声子分态密度分布

我们将计算得到的 LiFeAs (NM) 的声子谱, 声子态密度, 谱函数 $\alpha^2 F(\omega)$ 以及各原子的声子分态密度分布表示在图 3 中. 由图 3 中态密度和谱函数曲线可以看出, LiFeAs 在低频 16 meV ($E_g(1)$) 处和中频 25 meV ($A_{1g}(1)$) 处都有较高的峰值, 在高频 30—40 meV 区域有密集的峰值. 由图 3 中声子分态密度曲线分布可见, 在中低频区域声子态密度主要由 Fe 和 As 原子贡献, 而在高频区域 Li 原子振动对态密度的贡献更为显著. 我们计算得到的电声子耦合常数 λ 为 0.24, 声子对数频率 ω_{ln} 为 222K. 根据 Mcmillan 公式:

$$T_c = \frac{\omega_{ln}}{1.2} \exp \left[\frac{-1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)} \right],$$

在库仑赝势 μ^* 取为 0 时, 得到 LiFeAs 的超导转变温度的最大值为 0.86 K, 远小于实验值. 因此“111”材料和其他掺杂铁基超导体相似, 都不属于常规的电声子耦合

超导体.

为了研究磁性对电声子耦合的影响, 我们用 $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ 超胞模型分别计算了 LiFeAs 在 NM 态 (实线表示) 和 AFM2 态 (虚线表示) 的声子谱和声子态密度分布表示在图 4 中. 包含 4 个分子的 LiFeAs 超胞在 Γ 点处点群为 D_{2h} , 图中声子谱包含 36 支非简并的振动模式. 比较 LiFeAs 在 NM 态和 AFM2 态的声子谱色散关系以及声子态密度变化, 我们发现考虑了各向异性的磁相互作用后, 高频区的声子振动 $A_{1g}(2)$ 模式频率略有增大, 而中频 $A_{1g}(1)$ 和低频 $E_g(1)$ 振动模式的频率明显减小. 我们分析 LiFeAs 中低频声子频率发生明显软化的原因, 发现在 AFM2 态中由于考虑了 Fe 原子之间的自旋相互作用, Fe—As 之间的键长比非磁态增加 0.023 Å. Fe—As

键长的增加使 Fe 和 As 原子间的力作用常数减小, 使得在 Fe, As 原子在平面方向和垂直方向的相对振动模式($E_g(1)$ 和 $A_{1g}(1)$) 发生明显软化. 同时由于 AFM₂ 态 Li 与 As 之间的距离比非磁态减小 0.026Å, 引起 Li 与 As 原子间相对振动的高频声子

$A_{1g}(2)$ 的频率增强. 由电声子耦合常数公式

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \alpha^2 F(\omega) / \omega d\omega$$

可以看出, 低频声子软化有利于电声子耦合常数的提高, 从而可以提高超导转变温度.

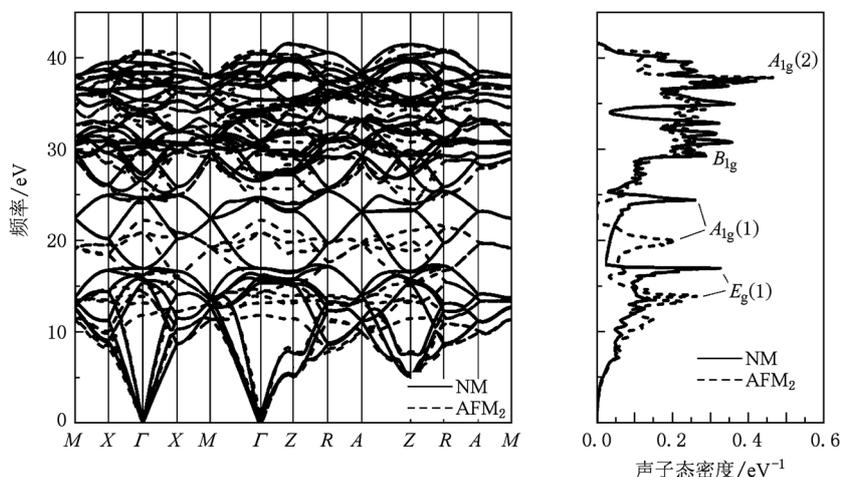


图4 LiFeAs 超胞在非磁态 NM(实线)和条状反铁磁态 AFM₂(虚线)的声子谱和声子态密度分布

4. 结 论

本文通过对 LiFeAs 的电, 声子谱密度泛函计算, 研究铁基超导体的结构, 磁性与声子软化的关系. 我们计算得到 LiFeAs 的基态具有涨落的条型反铁磁序. Fe—Fe 之间各向异性自旋相互作用的竞争产生不稳定的自旋密度波和 Fe—As 键长的弛豫. 我们得到非磁态下的电声子耦合常数 λ 为 0.24, 不能解释 LiFeAs 中 18 K 的超导转变温度, 因此它们同其他铁基超导材料一样均不属于常规电声子耦合超导体. 通过比较 LiFeAs 在 NM 态与 AFM₂ 态下的声

子态密度分布, 我们得到以下结论: 考虑铁基超导体中各向异性的自旋相互作用, Fe—As 键长的增大和 Li, As 间距离的减小引起了低频 $E_g(1)$ 和中频 $A_{1g}(1)$ 声子软化以及高频 $A_{1g}(2)$ 声子的硬化. 这一结果与最近 Tacon 等^[5]用非弹性 X 射线散射实验得到 F 掺杂后 SmFeAsO 在 23 meV 附近声子模式重整化结果是一致的. 由此可以看到, 由于自旋密度波的不稳定引起了晶格内坐标位置的弛豫, 部分晶格振动模式软化. 低频 $E_g(1)$ 和中频 $A_{1g}(1)$ 声子软化有利于增强电声子耦合强度, 因此自旋-声子相互作用对非常规超导电性有重要作用.

- [1] Boeri L, Dolgov O V, Golubov A A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 026403
- [2] Subedi A, Zhang L, Singh D J, Du M H 2008 *Phys. Rev. B* **78** 134514
- [3] Yildirim T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 037003
- [4] Huang G Q, Xing Z W, Xing D Y 2010 *Phys. Rev. B* **82** 014511
- [5] Tacon M Le, Forrest T R, Rüegg Ch, Bosak A, Walters A C, Mittal R, Rønnow H M, Zhigadlo N D, Katrych S, Karpinski J, Hill J P, Krisch M, McMorro D F 2009 *Phys. Rev. B* **80** 220504R
- [6] Liu R H, Wu T, Wu G, Chen H, Wang X F, Xie Y L, Yin J J, Yan Y J, Li Q J, Shi B C, Chu W S, Wu Z Y, Chen X H 2009 *Nature* **459** 64
- [7] McGuire M A, Christianson A D, Sefat A S, Sales B C, Lumsden M D, Jin R, Payzant E A, Mandrus D, Luan Y, Keppens V, Varadarajan V, Brill J W, Hermann R P, Sougrati M T, Grandjean F, Long G J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 094517
- [8] Egami T, Fine B V, Parshall D, Subedi A, Singh D J 2010 *Advances in condensed Matter Physics* **2010** 164916
- [9] Noffsinger J, Giustino F, Louie SG, Cohen ML 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 147003

- [10] Zbiri M, Schober H, Johnson M R, Rols S, Mittal R, Su Y X, Rotter M, Johrendt D 2009 *Phys. Rev. B* **79** 064511
- [11] Mittal R, Zbiri M, Rols S, Su Y, Xiao Y, Schober H, Chaplot S L, Johnson M, Chatterji T, Matsuishi S, Hosono H, Brueckel T 2009 *Phys. Rev. B* **79** 214514
- [12] Li Z C, Lu W, Dong X L, Zhou F, Zhao Z X 2010 *Chin. Phys. B* **19** 026103
- [13] Deng Z, Wang X C, Liu Q Q, Zhang S J, Lv Y X, Zhu J L, Yu R C, Jin C Q 2009 *Europhys. Lett.* **87** 37004
- [14] Tapp J H, Tang Z J, Lv B, Sasmal K, Lorenz B, Chu P C W, Guloy A M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 060505
- [15] Chu C W, Chen F, Gooch M, Guloy A M, Lorenz B, Lv B, Sasmal K, Tang Z J, Tapp J H, Xue Y Y 2009 *Physica C* **469** 326
- [16] Gooch M, Lv B, Tapp J H, Tang Z, Lorenz B, Guloy A M, Chu P C W 2009 *Europhys. Lett.* **85** 27005
- [17] Pratt F L, Pratt F L, Baker P J, Blundell S J, Lancaster T, Lewtas H J, Adamson P, Pitcher M J, Parker D R, Clarke S J 2009 *Phys. Rev. B* **79** 052508
- [18] Borisenko S V, Zabolotny V B, Evtushinsky D V, Kim T K, Morozov I V, Yaresko A N, Kordyuk A A, Behr G, Vasiliev A, Follath R, Büchner B 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 067002
- [19] Zhang S J, Wang X C, Sammynaiken R, Tse J S, Yang L X, Li Z, Liu Q Q, Desgreniers S, Yao Y, Liu H Z, Jin C Q 2009 *Phys. Rev. B* **80** 014506
- [20] Chen G F, Hu W Z, Luo J L, Wang N L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 227004
- [21] Singh D J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 094511
- [22] Liu S, Li B, Wang W, Wang J, Liu M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4245 (in Chinese) [刘 魁、李 斌、王 玮、汪 军、刘 楣 2010 物理学报 **59** 4245]
- [23] Ma F J, Lu Z Y, Xiang T 2008 *Phys. Rev. B* **78** 224517
- [24] Wang W, Li B, Liu S, Liu M, Xing Z W 2010 *J. of Appl. Phys.* **107** 123906
- [25] Singh D J, Du M H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 237003
- [26] Wu Z, Cohen R E 2006 *Phys. Rev. B* **73** 235116
- [27] Baroni S, Dal Corso A, de Gironcoli S, Giannozzi P, Cavazzoni C, Ballabio G, Scandolo S, Chiarotti G, Focher P, Pasquarello A, Laasonen K, Trave A, Car R, Marzari N, Kokalj A, <http://www.quantum-espresso.org>
- [28] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [29] Li Z, Tse J S, Jin C Q 2009 *Phys. Rev. B* **80** 092503
- [30] Jishi R A, Alyahyaei H M 2010 *Advances in Condensed Matter Physics* **2010** 804343

Magnetism and phonon softening of LiFeAs superconductors*

Li Bin^{1)†} Xing Zhong-Wen²⁾ Liu Mei¹⁾

1) (Department of Physics, Southeast University, Nanjing 211189, China)

2) (Department of Materials Science and Engineering, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

(Received 28 September 2010; revised manuscript received 5 November 2010)

Abstract

Using the first principles calculations based on density functional theory, we study the electronic band structure, the phonon dispersion, and the phonon density of states of the iron-based superconductor LiFeAs. The obtained ground state of LiFeAs is of the fluctuated antiferromagnetic order and partial structural relaxation. A comparison of phonon densities of states between in the striped antiferromagnetic ordering and in the nonmagnetic state indicates that the anisotropic spin interactions result in phonon softening of Fe and As atomic vibrations, thereby enhancing the electron-phonon coupling. As a result, the spin-phonon interaction plays an important role in the unconventional superconductivity.

Keywords: iron-based superconductor, anti-ferromagnetic order, superconductivity, electron-phonon coupling

PACS: 74.70.-b, 75.50.Ee, 74.25.-q, 63.20.kd

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grand Nos. 11074109, 110704033, 110704032), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grand No. SBK200920627), and the State Key Program for Basic Researches of China (Grand No. 2010CB923404).

† E-mail: alex968873@yahoo.com.cn