

二维应变作用下超导薄膜 LiFeAs 的磁性和电子性质*

王鑫¹⁾ 李桦¹⁾ 董正超^{1)†} 仲崇贵^{1)2)‡}

1) (南通大学理学院, 南通 226019)

2) (苏州大学物理科学与技术学院, 苏州 215006)

(2018 年 5 月 14 日收到; 2018 年 11 月 13 日收到修改稿)

基于密度泛函理论的第一性原理计算, 研究了二维应变作用下 LiFeAs 超导薄膜的磁性结构、电子能带和态密度变化, 分析了应变对其超导电性的作用. 结果显示, 对体系施加 1%—6% 的二维平面张、压应变均不改变其基态条形反铁磁性结构, 费米面附近的电子态密度主要来自于 Fe-3d 轨道电子以及少量的 As-4p 电子. 研究发现, 与无应变情形相比, 当施加压应变时, 体系中 Fe 离子的反平行的电子自旋局域磁矩减小, 薄膜反铁磁性受到抑制, 费米面上电子态密度增加, 超导电性来自于以反铁磁超交换耦合作用为媒介的空穴型费米面和电子型费米面间嵌套的 Cooper 电子对. 而在张应变作用时, 局域反铁磁性增强, 费米面上电子态密度减小, 金属性减弱, 特别是张应变时费米面上空穴型能带消失, Cooper 电子对出现概率显著降低, 将抑制超导相变.

关键词: 超导薄膜, 应变, 磁性, 电子结构

PACS: 74.78.-w, 61.72.Hh, 75.70.-i, 74.20.Pq

DOI: 10.7498/aps.68.20180957

1 引言

2008 年 2 月, 日本科学家 Nomura 等^[1]率先在铁基反铁磁性材料 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ 中发现了存在转变温度 (T_c) 为 26 K 的超导相, 这一突破性发现揭开了磁性超导材料研究的新篇章. 近几年来, 新型铁基超导材料的超导机理和特性研究日益成为国内外研究的热点. 一个普遍的观点是, 在大多数铁基磁性材料中, 由于存在具有显著的自旋密度波, 超导电性通常难以出现^[2]. 然而通过对母体的电子 (空穴) 掺杂或施加外界压力抑制其自旋密度波行为, 则可能在体系的反铁磁相界附近产生超导电性, 甚至可将材料的超导临界温度实现显著提升^[3,4].

磁性铁基化合物 LiFeAs (LFA) 作为超导电

性研究的原型材料, 其电子、磁性以及能带结构与超导机理的关联受到研究人员的极大关注. Ma 等^[5]通过核磁共振 (nuclear magnetic resonance, NMR) 实验发现, 由于不存在自旋密度波行为, 仅在接近超导转变温度时才观测到原子上很弱的局域磁矩, 使得 LFA 超导体的超导电性出现在不稳定的反铁磁相界附近. 另一方面, 通过角分辨电子光谱实验 (angle resolved photoemission spectroscopy, ARPES) 和非弹性中子散射实验 (inelastic neutron scattering, INS) 也发现 LFA 具有多能带结构, 在倒空间微弱的空穴型费米面和电子型费米面互相嵌套形成具有超导带隙的拓扑超导态^[6-8], 而其准嵌套的电子型和空穴型费米口袋的大小则可以

* 国家自然科学基金 (批准号: 11447229)、江苏省自然科学基金 (批准号: BK2012655) 和江苏省研究生科研与实践创新计划 (批准号: KYCX18_2412) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dzc@ntu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: chgzong@ntu.edu.cn

通过高压或掺杂方式进行调控^[9], 进而改变 LFA 超导薄膜的电子结构和超导特性, 提高其超导转变温度.

为了深入研究 111 体系的超导机制以及其超导态的可调控性, Zhang 等^[10]和 Zeng 等^[11]首先利用高压技术对样品施加压力并结合同步辐射技术, 通过压力调控研究铁基超导材料的结构及最高超导转变温度. 他们发现对于 LFA 晶体, 在一定压力范围之内, 超导转变温度 T_c 随着压力的增大、面内 As—Fe—As 键角的增加而降低, T_c 与压力呈现负相关效应, 而 NaFeAs 晶体的 T_c 则先增加后减小, 在 3 GPa 压力下 FeAs_4 为规则的正四面体结构时 T_c 达到最大, 表明畸变的 FeAs_4 四面体结构不利于体系的超导^[12]. Li 等^[13]对 LFA 晶体进行 Co 离子掺杂, 通过 INS 以及 ARPES 数据发现, 随着 Co 掺杂量增加, LFA 晶体中 d_{xy} 轨道空穴型费米面减小, d_{xz}/d_{yz} 轨道空穴型费米面向远离费米能级的方向移动, 电子型费米面增大, 电子和能带结构发生显著改变. 同时, 掺杂之后的 LFA 材料发生 Lifshitz 相变, 费米面附近的超导带隙向费米能级下方移动^[14], 表明通过掺杂可以调控 LFA 晶体的电子结构和超导特性. 虽然通过掺杂和压力调控铁基超导材料结构、磁性相变、超导转变等得到了较多研究, 但关于二维应变作用诱导 LFA 薄膜超导态变化的研究却鲜有报道. 我们可以对 LFA 施加二维应变作用, 通过改变 FeAs_4 四面体的结构对称性, 调控其电子和能带结构, 从而调控费米面的能带嵌套, 这也为 LFA 的超导特性及机理研究提供了有效途径.

本文运用基于密度泛函理论的第一性原理计算研究了不同二维应变作用下 111 体系中 LFA 的磁性结构、能带和电子态密度, 分析了应变对 LFA 超导薄膜超导电性的影响. 通过比较分析 LFA 材料所有可能的磁性结构, 计算得到体系的基态结构为条形反铁磁序, 而对其施加大到 6% 左右的张、压应力均不改变其磁性结构. 通过对 LFA 材料的电子态密度和能带结构的分析发现, 费米面附近的电子态密度主要来自于 Fe-3d 轨道电子以及少量的 As-4p 电子, 施加压应变可使其反铁磁性局域磁矩减小, 磁性减弱, 费米面的上电子态密度显著增加, 空穴型和电子型能带的同时出现为超导性提供了 Cooper 载流子, 而当 LFA 材料受到张应变作用时, 薄膜性质呈现相反的变化, 反铁磁性增强, 费米面处态密度值变小, 体系金属性降低.

2 结构及计算方法

LFA 晶体在常温下为四方晶系结构, 如图 1 所示, 空间群为 $P4/nmm$. 原胞中各原子的位置为^[15] Li (0.25, 0.25, 0.3325), Fe (0, 0, 0), As (0.25, 0.25, 0.1124), 可见 FeAs 层中的每一个 Fe 原子与周围 4 个 As 原子形成四面体结构, 而面内的 Fe 原子形成正方格子. 在该晶体中, 虽然其导电等输运性质主要来自于 FeAs 层^[16], 但其磁性不仅来源于层中 Fe 离子的自旋耦合, 层间 Fe 离子间也存在相对较弱的自旋交换耦合. 考虑到 Fe 离子间可能不同的交换耦合, 将 LFA 材料的层内 Fe 离子分为条形结构和棋盘形结构, 而 Fe-Fe 层之间又可以分为铁磁性耦合和反铁磁性耦合, 如图 2 所示, 总共有 4 种结构, 即条形铁磁性 (FM-1a)、条形反铁磁性 (AFM-2a)、棋盘形铁磁性 (FM-1b)、棋盘形反铁磁性结构 (AFM-2b).

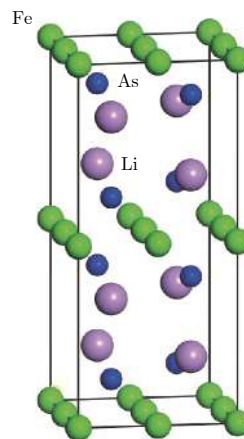


图 1 LFA 的晶体结构

Fig. 1. Crystal structure of LFA film.

计算使用基于第一性原理的 VASP 程序包进行, 采用全势线性缀加平面波展开法 (full-potential linearized augmented plane wave) 描述离子和电子之间的相互作用. 采用基于 Perdew-Burke-Ernzerhof 的广义梯度近似 (global gaming alliance) 描述交换关联能, 取 $2s^1$, $3d^64s^2$ 和 $4s^24p^3$ 分别作为 Li, Fe 和 As 原子的价电子参与计算. 考虑到磁性结构不同导致晶体的周期性扩大, 采用 $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 2$ 的超原胞模型进行计算. 计算中, 平面波截断能取为 500 eV ($1 \text{ eV} = 1.602177 \times 10^{-19} \text{ J}$), 布里渊区中 K 点取样为 $16 \times 16 \times 12$, 自洽计算的收敛判据为 $1 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$ ($1 \text{ eV/atom} = 96.15384615384615 \text{ kJ/mol}$).

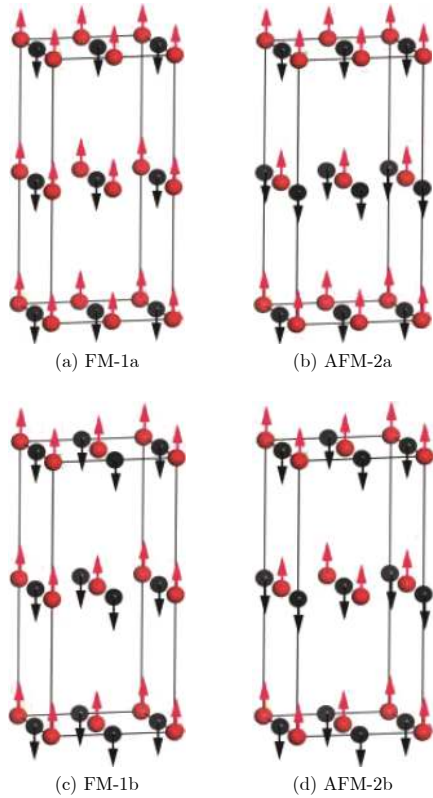


图 2 LFA 薄膜中 Fe 离子可能的四种磁性结构 (a) 条形铁磁; (b) 条形反铁磁; (c) 棋盘形铁磁; (d) 棋盘形反铁磁; 箭头表示自旋方向

Fig. 2. Four possible kinds of magnetic structures of Fe ion in LFA thin films: (a) Striped-type ferromagnetic order; (b) striped-type antiferromagnetic order; (c) checkerboard-type ferromagnetic order; (d) checkerboard-type antiferromagnetic order. The arrows represent the directions of electronic spins.

3 结果与讨论

首先对 LFA 晶体进行无磁性的结构优化, 得到其晶格常数分别为 $a = b = 5.363 \text{ \AA}$, $c = 12.266 \text{ \AA}$, 与实验结果相比, 晶格常数 c 约小 1.53%, 而晶格常数 a 仅有 0.52% 的误差^[7], 小的误差保证了本文结果的正确性. 然后, 基于该优化的晶体结构考虑不同的磁性结构计算, 得到了无应变作用时 LiFeAs 单胞在 4 种磁性结构下的能量, 如表 1 所列. 比较发现, 与其他 3 种磁性结构相较, LiFeAs 晶体的条形反铁磁性结构 (AFM-2a) 能量最低, 条形铁磁性结构 (FM-1a) 次之, 条形铁磁的单胞能

量比条形反铁磁高出 6.23 meV. 可见 LiFeAs 薄膜的条形反铁磁 (AFM-2a) 结构最稳定, 这与他人实验和理论预测的 LFA 基态磁性结构相符合^[18], 同时也证明了本文计算结果的可靠性.

为了研究二维应变作用对 LFA 薄膜的磁性和电子结构的改变, 通过改变平面内的晶格常数来实现对上述四种磁性结构施加 1%—6% 的张应变和压应变 (因为对超导薄膜平面内的拉伸和压缩应变调控可通过改变超导薄膜与衬底间的晶格失配来实现). 必须指出的是, 对于外延薄膜, 理论上随着薄膜生长, 晶格失配弛豫导致晶格常数的改变应当与薄膜的厚度相关. 这里, 为简单考虑, 我们假设薄膜中的应变均匀, 与厚度无关, 二维应变由平面晶格常数的大小决定. 同时考虑 LFA 薄膜外延生长于四方晶格衬底时, 面内晶格 $a = b$, 而晶格常数 c 的取值则是根据平面内晶格变化时单胞能量最低来确定. 因为条形反铁磁单胞能量最低, 这里选取其作为参考态, 不同磁性结构下相对能量随晶格常数 a 的变化如图 3 所示.

由图 3 可以看出, 当 LFA 超导薄膜的晶格常数发生变化时, AFM-2a 磁性态的相对能量总保持最低, 说明张应变和压应变都不能使 LFA 材料发生磁性相变, 其基态总是条形反铁磁结构. 而 FM-1a 态的相对能量次之, 与 AFM-2a 相差极不明显, 棋盘形的 FM-1b 和 AFM-2b 相对能量均远高于 FM-1a 和 AFM-2a. 同种类型中的反铁磁与铁磁的能量接近, 说明 LFA 薄膜中 Fe 离子的层间反铁磁耦合较弱, 而条形磁结构的能量远低于棋盘形磁结构则表明层内 Fe 离子间的反磁性耦合很强, 而且这种强的层内条形反铁磁以及层间的反铁磁耦合, 也是应变难以改变的, 这为通过应变调控电子和能带结构而不改变磁性结构提供了前提.

另外, 从图 3 中也可以发现, 施加压应变时体系能量相对变化比施加张应变时更快, 说明压应变对体系的作用更明显. 为了深入研究施加张应变和压应变对其能带和电子结构的作用, 下面我们在条形反铁磁性基态结构下, 分析体系不受应变 ($a = 5.363 \text{ \AA}$) 和受到 3% 张应变 ($a = 5.524 \text{ \AA}$) 和 -3% 的压应变 ($a = 5.202 \text{ \AA}$) 时的能带和电子结构.

图 4(a) 给出的是不受应变作用时的能带结构,

表 1 无应变时铁基超导薄膜 LFA 不同磁性结构下的单胞能量

Table 1. Energy of unit cell of the iron-based superconductor thin film LFA in different magnetic structures.

磁性结构	条形铁磁	条形反铁磁	棋盘形铁磁	棋盘形反铁磁
单胞能量/eV	-131.2446	-131.2508	-130.8171	-130.8156

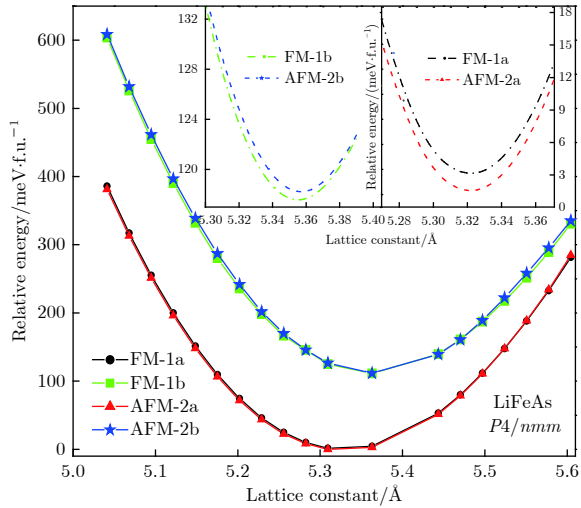


图3 LiFeAs 薄膜中四种磁性结构的相对能量随晶格常数的变化
Fig. 3. Relative energies of different magnetic states varying with lattice constant of LFA thin film.

很明显这是一个金属型的能带结构. 之前, 方明虎团队的实验研究发现铁基超导体的母体化合物呈现反铁磁性^[19], 并且可以通过自旋口袋模型解释^[20]. 在此模型中, 反铁磁性的具体表现就是电子能带结构在费米面附近有能隙出现. 依据此模型, 结合图 4(a) 可以看到, 在 LFA 超导薄膜的倒格子第一布里渊区边缘沿着高对称 $X-R$ 方向出现可通过应变调控的能隙. 该能隙的出现表明 LFA 材料的基态结构具有典型的层间反铁磁性耦合特点, 这与我们前面得到的材料的基态磁性结构相吻合, 该方向平坦的散射曲线也说明层间的反铁磁耦合相对较弱. 在高对称方向 $\Gamma-X$ 以及 $Z-R$ 方向出现两个开口向下的空穴型能带, 而且这些空穴型能带明显表现出较强的散射特性, 表明层内 Fe 离子间的电子自旋存在强的交换耦合. 这种强磁性交换耦合作用既包括了条带间离子的反铁磁性耦合, 也包括了条带内相邻 Fe 离子间电子自旋间的铁磁性交换作用. 而面内能隙的消失则应该这是由于条带内铁磁性的耦合作用所致. 但是, 能带中无电子型能带的出现, 说明无应变时 LFA 条形的反铁磁基态中的金属导电性强弱完全依赖于空穴浓度的高低.

应变作用下 LFA 薄膜能带发生了显著变化, 如图 4(b) 和图 4(c) 所示. 与没有发生应变的图 4(a) 相比, 当 LFA 超导膜受到-3% 压应变时 (见图 4(b)), 虽然空穴型能带数目没有增加, 但是费米能级之上的能带显著向下移动, 导致沿着高对称性 $\Gamma-M$ 和 $\Gamma-Z$ 方向, 特别是在 Z 点出现两条开口向上的电子型能带, 费米面上的电子态密度增加. 这样, 在

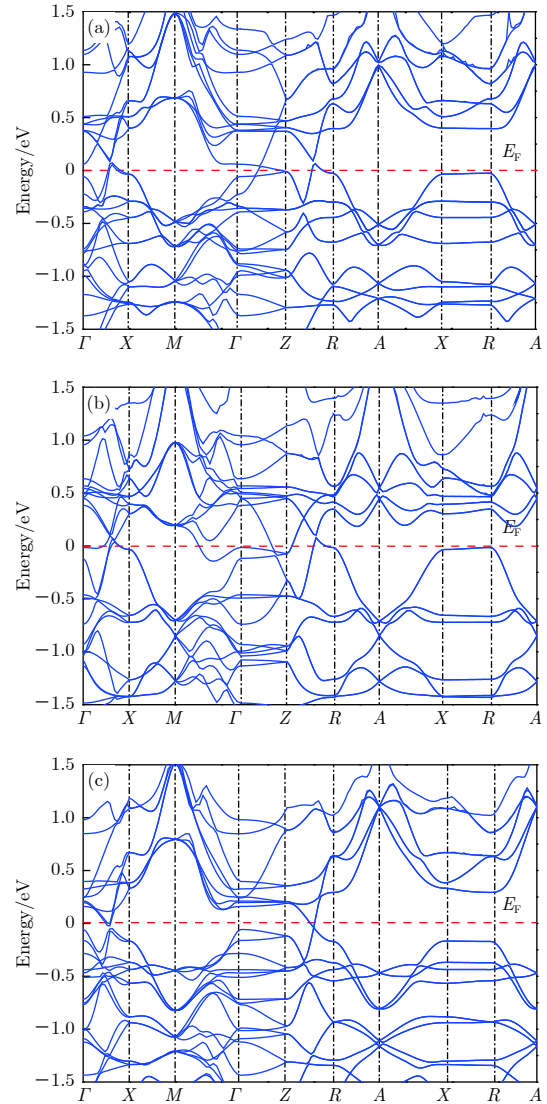


图4 LFA 超导薄膜 AFM-2a 磁性结构在不同应变条件下的能带结构 (a) 无应变; (b) 压应变 (-3%); (c) 张应变 (3%)
Fig. 4. The band structure of LFA superconductor thin film (AFM-2a magnetic states) under different strains: (a) Nostrained effect; (b) compressive strain (-3%); (c) tensile strain (3%).

二维压应变作用下的反铁磁性 LFA 超导薄膜中, 不仅存在空穴导电, 还存在态密度更大的电子导电, 因此我们可通过增强二维压应变作用, 提高电子型能带在费米能级处的态密度来增强铁基超导 LFA 薄膜的金属性, 从而实现可能的超导电性. 这与在实验中通过对铁基超导材料 LaOFeAs , BaFe_2As_2 施加外加压力来提升超导电性的方法^[21]较为一致. 然而, 如果外加二维的张应变, 能带结构就会发生相反的变化, 如图 4(c) 所示. 相对于无应变时的能带, 这时我们发现能带整体下移, 空穴型电子能带消失, Γ 点以及 $X-R$ 方向的能隙增加, 费米面处

的电子态密度显著减小, 从后面的电子态密度图中也可以发现这一点. 这表明张应变使体系的金属性减弱, 不利于实现 LFA 薄膜的超导电性. 根据实验研究数据, 费米能上电子态密度的抑制是导致 LFA 超导相变温度下降的主要原因^[22].

费米面上电子态密度的增加或减少, 与二维压应变或张应变导致层内和层间的磁性交换耦合作用改变密切相关. 在平面压应变作用下, 层间的晶格常数增大, 反铁磁性交换耦合减弱, 而层内晶格常数减小, 条带内最近邻铁磁性交换耦合 J_1 以及条带间最近邻的反铁磁交换耦合 J'_1 都同时增强, 但由于层内四个次近邻的 Fe—Fe 之间反铁磁耦合 J_2 是通过 As 离子实现的超交换作用, 这种超交换耦合的性质和强弱与 Fe—As—Fe 的键角大小密切相关. 压应变使得面内晶格常数减小的同时, 原先扁平的 FeAs₄ 四面体逐渐向正四面体结构畸变, 层内 As—Fe—As 和 Fe—As—Fe 键角减小, Fe—Fe 之间的超交换耦合有向双交换耦合转变的趋势. 因此, 整体上单胞内反铁磁性耦合减弱, 铁磁性耦合增强, 但体系仍然以反铁磁性耦合为主. 也就是说压应变的增加使得体系更临近反铁磁耦合-铁磁耦合转变相界, 因此更容易诱导超导相, 这也验证了材料 LFA 或 NaFeAs 在加压作用下的结果^[23]. 而外加张应变的结果正好相反, 张应变使得 Fe—As—Fe 的键角增大, 反铁磁交换耦合增强, 铁磁性减弱, 费米面上电子态密度显著减小, 超导薄膜的金属性变差, 不利于超导性相变.

另一方面, 根据磁性计算, 我们得到了不同应变作用下 Fe 离子的自旋磁矩, 如表 2 所列. 可见, 压应变作用使得 Fe 离子的总磁矩 m_t 明显增大, 而张应变则使 Fe 离子总自旋磁矩减小. 压应变作用下的总磁矩增加, 似乎导致体系的反铁磁性增强, 这对于促进超导电性的相变极其不利. 然而, 进一步的数据分析发现, 压应变下的磁矩增加主要来自于费米面巡游电子的磁矩 m_i 增加; 与无应变作用相比, 此时反铁磁耦合的局域磁矩 m_l 却由 $1.345\mu_B$ ($1\mu_B = 9.27400949(80) \times 10^{-24} \text{ J}\cdot\text{T}^{-1}$) 减小到 $1.324\mu_B$. 另一方面, 虽然张应变作用下的 Fe 离子总自旋磁矩从无应变时的 $1.532\mu_B$ 减小到 $1.414\mu_B$, 但这个降低主要是由于费米面上巡游电子磁矩的显著降低导致, 而局域磁矩则由 $1.345\mu_B$ 增加到 $1.388\mu_B$. 这些变化也可以从图 5 中不同应变作用下电子态的自旋劈裂情况分析得到. 外加张应变使得局域反磁性增强, 超导相变受到抑制, 而压应变作用则导致体系的反铁磁性压制, LFA 薄

表 2 不同应变作用下 LFA 薄膜中 Fe 离子的自旋磁矩
Table 2. Magnetic moments of Fe ions of LFA thin films under different strains.

应变	Fe 离子总磁矩 m_t / μ_B	巡游磁矩 m_i / μ_B	局域磁矩 m_l / μ_B
-3%	1.615	0.291	1.324
0%	1.532	0.187	1.345
3%	1.414	0.026	1.388

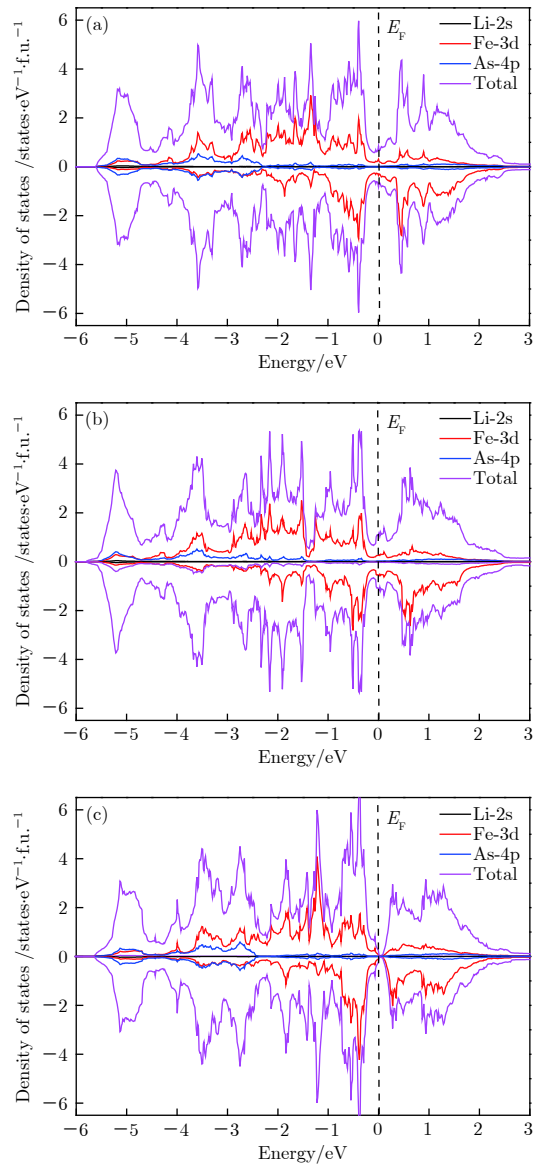


图 5 LFA 超导薄膜在不同应变条件下各离子的电子态密度 (a) 无应变; (b) 压应变 (-3%); (c) 张应变 (3%)

Fig. 5. The density of electronic states of different ions in LFA superconductor thin film under different strains: (a) Nostrained effect; (b) compressive strain (-3%); (c) tensile strain (3%).

膜向有利于超导相变的方向发生. 而且, 根据超导电性源于费米面附近形成的 Cooper 电子对理论^[24],

发生在近邻 Fe—Fe 原子间以反铁磁超交换耦合作用为媒介的空穴型能带和电子型能带间的 Cooper 电子对, 为压应变作用有利于诱导超导电性的形成提供了理论支撑. 而对于无应变或者张应变作用, LFA 的费米面处只存在电子型或空穴型能带, 难以形成电子的 Cooper 配对.

因此, 为了具体分析不同应变作用下费米面附近电子态的变化情况, 我们也分别给出了 LFA 在无应变、 -3% 压应变和 3% 张应变情况下的电子态密度分布, 如图 5 所示. 不难发现, 无论是否存在应变, 在能量 $-6-3$ eV 之间, Fe-3d 的电子态密度与总态密度的分布几乎一致, 且其态密度值仅次于总态密度值, 表明 LFA 费米面附近电子态主要来自于 Fe-3d 电子. As-4p 轨道电子则主要局域在费米面以下 $-5-3$ eV, 且 Fe-3d 和 As-4p 电子之间存在较强程度的杂化^[25], 说明 Fe 离子之间的电子自旋交换耦合是通过 As 离子来实现的, 而 Li-2s 电子对费米面的贡献很小, 可以忽略不计, 这一点在实验中已经得到证实^[26]. 掺杂或者加压的数据显示, LFA 费米面附近电子态来自 Fe-3d 以及少部分 As 的 4p 电子杂化^[27], 显然在二维应变作用下, 费米面附近的这种杂化相比于其低能区要微弱得多.

与图 5(a) 中 LFA 超导薄膜没有发生应变的电子结构相比, 当受到 -3% 的压应变作用时, 费米面下 $-4-0.25$ eV 能量范围内, 电子自旋劈裂减弱, 可见局域自旋磁矩减小, 反铁磁性耦合被抑制, 而费米能级处总的电子态密度随着 Fe-3d 态密度值的增加而增加, 见图 5(b). 这是因为压应变作用使得原先扁平的 As 四面体结构逐渐向正四面体畸变过程中 (见图 6), t_{2g} 能级与 e_g 能级间隔相对减小, Fe 离子 3d 轨道的电子分布更趋于均匀, 在费米面下 -3.5 eV 左右处 Fe-3d 和 As-4p 之间的轨道杂化减弱, 参与形成 Fe—As 共价束缚的电子数减少, 更多的 Fe-3d 电子填充 t_{2g} 态故而发生巡游变化, 原来贡献 Fe 离子磁矩的局域 3d 电子一部分变为巡游电子^[28], 导致 FeAs 层中的载流子数增多, 从而费米面上的电子态密度增加. 巡游电子数的增加, 贡献了更多的电子自旋, 因此压应变作用下 Fe 离子总磁矩的增大主要来自于巡游电子数的增多. 这与其他铁基超导材料计算得到的结果相符合^[29]. 相反, 在图 5(c) 中, LFA 超导薄膜受到 3% 张应变作用时, 费米能级处总的电子态密度则随着 Fe-3d 态密度值的减小而减小. 费米能处 Fe-3d 态提供的巡游电子数减少, 电子的巡游磁矩 m_i 显

著降低. 同时, 由于费米能以下处于束缚态的 Fe 离子核外 3d 电子的自旋劈裂显著增强, 导致体系的局域磁矩增大, 反铁磁性耦合增强, 从而抑制超导电性形成, 进而也影响材料的超导临界温度^[22]. 可以推测, 与受到 3% 张应变相比, -3% 压应变作用可通过改变能带结构从而更好地激发 LFA 薄膜的超导特性. 所以, 我们可通过对 LFA 薄膜施加二维压应变, 诱导其超导特性以及为提高其临界相变温度提供可能.

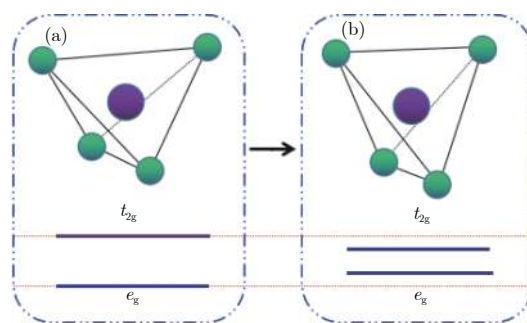


图 6 以 Fe 离子为中心的 As 四面体结构畸变与 3d 轨道能级分裂 (a) 无应变时扁平的四面体; (b) 压应变作用下畸变后的正四面体

Fig. 6. The tetrahedral structure distortion of As centered on Fe ions and 3d orbital energy splitting of Fe ions: (a) Tabular tetrahedron without strain effect; (b) the distorted regular tetrahedron under compressive strain effect.

4 结 论

对新型 111 体系铁基超导 LFA 薄膜在不同二维应变作用下的磁性结构、能带和电子性质进行了详细的分析, 得到了体系基态时的条形反铁磁性结构, 并且发现对该 LFA 薄膜施加 6% 左右的张、压应变均不能使条形反铁磁性结构发生改变. 通过对体系的能带结构和磁矩变化分析发现, 二维压应变驱动体系能带费米面附近同时出现空穴型和电子型能带, 费米面上电子态密度的增大, 而且由于 Fe 离子局域 3d 电子的一部分变为巡游电子, 使得 Fe 离子的磁矩增大, 但反铁磁性耦合减弱使得局域的自旋磁矩减小, 体系的反铁磁性受到抑制. 这样大量的通过反铁磁性交换耦合的费米面附近的 Cooper 电子对提供了超导电性的载流子, 有助于提高超导相变温度. 而在张应变作用下, 体系局域磁矩增大, 反铁磁性增强, 费米能级上电子态密度减小, 金属性减弱, Cooper 电子对难以形成, 抑制了材料的超导相变.

参考文献

- [1] Nomura T, Kim S W, Kamihara Y, Hirano M, Sushko P V, Kato K, Takata M, Shluger A L, Hosono H 2008 *Supercond. Sci. Technol.* **21** 125028
- [2] Dai P C 2015 *Rev. Mod. Phys.* **87** 855
- [3] Du Z Y, Fang D L, Wang Z Y, Du G, Yang X, Yang H, Gu G D, Wen H H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 097401 (in Chinese) [杜增义, 方德龙, 王震宇, 杜冠, 杨雄, 杨欢, 顾根大, 闻海虎 2015 物理学报 **64** 097401]
- [4] Dubroka A, Kim K W, Rossle M, Malik V K, Drew A J, Liu R H, Wu G, Chen X H, Bernhard C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 097011
- [5] Ma L, Zhang J, Chen G F, Yu W Q 2010 *Phys. Rev. B* **82** 180501
- [6] Qureshi N, Steffens P, Drees Y, Komarek A C, Lamago D, Sidis Y, Harnagea L, Grafe H J, Wurmehl S, Buchner B, Braden M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 117001
- [7] Wang M, Wang M Y, Miao H, Carr S V, Abernathy D L, Stone M B, Wang X C, Xing L Y, Jin C Q, Zhang X T, Hu J P, Xiang T, Ding H, Dai P C 2012 *Phys. Rev. B* **86** 144511
- [8] Umezawa K, Li Y, Miao H, Nakayama K, Liu Z H, Richard P, Sato T, He J B, Wang D M, Chen G F, Ding H, Takahashi T, Wang S C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 037002
- [9] Qureshi N, Steffens P, Lamago D, Sidis Y, Sobolev O, Ewings R A, Harnagea L, Wurmehl S, Buchner B, Braden M 2014 *Phys. Rev. B* **90** 144503
- [10] 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
- [11] Zeng B, Watanabe D, Zhang Q R, Li G, Besara T, Siegrist T, Xing L Y, Wang X C, Jin C Q, Goswami P, Johannes M D, Balicas L 2013 *Phys. Rev. B* **88** 144518
- [12] Jin C Q, Liu Q Q, Deng Z, Zhang S J, Xing L Y, Zhu J L, Kong P P, Wang X C 2013 *Chinese Journal of High Pressure Physics* **27** 473 (in Chinese) [靳常青, 刘清清, 邓正, 张思佳, 邢令义, 朱金龙, 孔盼盼, 望贤成 2013 高压物理学报 **27** 473]
- [13] Li Y, Yin Z P, Wang X C, Tam D W, Abernathy D L, Podlesnyak A, Zhang C L, Wang M, Xing L Y, Jin C Q, Haule K, Kotliar G, Maier T A, Dai P C 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 247001
- [14] Miao H, Qian T, Shi X, Richard P, Kim T K, Hoesch M, Xing L Y, Wang X C, Jin C Q, Hu J P, Ding H 2015 *Nat. Commun.* **6** 6056
- [15] Pitcher M J, Parker D R, Adamson P, Herkelrath S J C, Boothroyd A T, Ibberson R M, Brunell M, Clarke S J 2008 *Chem. Commun.* **45** 5918
- [16] Li S C, Gan Y, Wang J H, Ran K J, Wen J S 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 097503 (in Chinese) [李世超, 甘远, 王靖辉, 冉柯静, 温锦生 2015 物理学报 **64** 097503]
- [17] 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
- [18] Kawasaki S, Mabuchi T, Maeda S, Adachi T, Mizukami T, Kudo K, Nohara M, Zheng G Q 2015 *Phys. Rev. B* **92** 180508
- [19] Wang H D, Dong C H, Li Z J, Mao Q H, Zhu S S, Feng C M, Yuan H Q, Fang M H 2011 *Europhys. Lett.* **93** 47004
- [20] Tafti F F, Ouellet A, Juneau-Fecteau A, Faucher S, Lapointe-Major M, Doiron-Leyraud N, Wang A F, Luo X G, Chen X H, Taillefer L 2015 *Phys. Rev. B* **91** 054511
- [21] Krüger E, Strunk H P 2014 *J. Supercond. Nov. Magn.* **27** 601
- [22] Mollah S 2004 *J. Phys.: Condens. Matter* **16** R1237
- [23] 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]
- [24] Yu R 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 217102 (in Chinese) [俞榕 2015 物理学报 **64** 217102]
- [25] Chen Z J, Xu G B, Yan J G, Kuang Z, Chen T H, Li D H 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 235103
- [26] Yu R, Zhu J X, Si Q M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 186401
- [27] Yi W, Wu Q, Sun L L 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 037402 (in Chinese) [衣玮, 吴奇, 孙力玲 2017 物理学报 **66** 037402]
- [28] Lankau A, Koepf K, Borisenko S, Zabolotnyy V, Büchner B, Brink J V D, Eschrig H 2010 *Phys. Rev. B* **82** 184518
- [29] Li B, Xing Z W, Liu M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 077402 (in Chinese) [李斌, 邢钟文, 刘楣 2011 物理学报 **60** 077402]

Magnetism and electronic properties of LiFeAs superconducting thin film under two-dimensional strains effect*

Wang Xin¹⁾ Li Hua¹⁾ Dong Zheng-Chao^{1)†} Zhong Chong-Gui^{1)2)‡}

1) (*School of Sciences, Nantong University, Nantong 226019, China*)

2) (*School of Physical Science and Technology, Soochow University, Suzhou 215006, China*)

(Received 14 May 2018; revised manuscript received 13 November 2018)

Abstract

The magnetism, band properties and electronic density of states of LiFeAs superconducting thin film with two-dimensional strain are investigated by using the first principles calculations based on density functional theory, and the influences of different strains on the characteristics of superconducting films are analyzed in detail. The results show that the magnetic ground configuration is the striped antiferromagnetic state of nostrained LiFeAs thin film, and the ground structure of this system is unchanged in the range of applied 1%–6% compressive and tensile strain. The density of states near the Fermi level is mainly from the contribution of Fe-3d orbital and a few As-4p electrons. The electron spin exchange coupling between Fe ions is realized by As ions. Furthermore, unlike the case of the nostrain and the tensile strain, with increasing the compressive strain, the localized antiparallel electron spin magnetic moments of Fe ion decrease, the density of states at the Fermi surface improves, and the itinerant electron magnetism of Fe ions increases, which all greatly suppress the antiferromagnetic properties of thin film and enhance the superconducting phase transition temperature. The superconductivity of LiFeAs thin film originates from the Cooper pairs of electrons between the hole-type and electronic-type bands near the Fermi surface through the antiferromagnetic superexchange coupling effect. Instead, the LiFeAs thin film with the tensile strain presents completely opposite properties, that is to say, the decrease of the electronic density of states in the Fermi level brings about the weakening of the metal properties and the increasing of the antiferromagnetic exchange coupling. Particularly, the band structure of hole-type near the Fermi surface disappears, and the occurrence of Cooper pairs of electrons becomes significantly reduced, resulting in the suppressed superconducting phase transition when the LiFeAs thin film is subjected to tensile strain. In addition, the change of antiferromagnetic exchange coupling and magnetic moments of Fe ions are also explained according to the variation of electronic density of states of the Fe-3d energy levels during the distortion of FeAs tetrahedrons due to compressive strain. In brief, our researches provide an effective way to improve the superconducting properties of LiFeAs thin film and may promote the relevant practical applications of iron-based superconductors in the future.

Keywords: superconducting thin film, strain, magnetism, electronic structure

PACS: 74.78.-w, 61.72.Hh, 75.70.-i, 74.20.Pq

DOI: 10.7498/aps.68.20180957

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11447229), the National Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK2012655), and the Postgraduate Research & Practice Innovation Program of Jiangsu Province, China (Grant No. KYCX18_2412).

† Corresponding author. E-mail: dzc@ntu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: chgzhong@ntu.edu.cn