

### 推荐国家自然科学基金项目公示

项目名称	铁基超导体的电子结构和磁性质的理论研究
推荐单位	教育部
推荐单位意见： <p>我单位认真审阅了该项目推荐书及附件材料，确认全部材料真实有效，相关栏目均符合国家科学技术奖励工作办公室的填写要求。</p> <p>卢仲毅教授主要从事凝聚态系统电子结构计算方法及分子动力学模拟方法的发展和应用。长期以来，他在凝聚态物理强关联系统和材料结构与特性两个前沿研究领域取得了一系列有国际影响的重要研究成果。</p> <p>自2008年新的铁基高温超导材料发现以来，该材料奇异物理性质的研究成为国际凝聚态物理研究的热点之一。卢仲毅教授和合作者在该领域做出了多项开创性的国际领先的重要研究成果。这些研究成果澄清了铁基超导体的母体以及其电子结构和磁结构及磁相互作用机理。这对铁基高温超导体中电子配对的本质和动力学机理的研究提供了基础和帮助。他与合作者在铁基超导体研究方面发表SCI论文35篇，这些论文被他人引用1377次，其中8篇代表论文他人引用639次。因这些开创性的工作，卢仲毅教授荣获香港大学2010年度‘Daniel Tusi Fellowship’，教育部2012年度长江学者特聘教授，2015年度中国物理学会叶企孙物理奖，和2015年度教育部自然科学一等奖。此外，卢仲毅教授还是国家自然科学基金委2007年度数理学部杰出青年基金获得者和2009年度国家新世纪百千万人才工程入选者。</p> <p>依照国家科学技术进步奖授奖条件，我单位推荐该项目申报 2017 年度国家自然科学基金二等奖。</p>	

## 项目简介:

铁基高温超导电性是凝聚态物理研究最为关切的热点之一。其核心是高温超导电子配对的机理,这也是量子多体理论研究中的一个基本问题。与铜氧化物高温超导一样,铁基超导也是通过对其母体掺杂实现的。这样要解决这个基本问题,首要澄清的是:铁基超导体母体的基态是什么,是否具有磁或其它长程有序?如果具有磁性,磁性相互作用的机理是什么?项目组自铁基超导体最初发现以来,一直围绕着这两个首要问题系统地开展理论研究,做出了有国际影响的结果。主要的创新点有:

- 1) 预言了铁基超导体母体是反铁磁半金属,并被实验所证实,为铁基超导机理的研究提供了正确的出发点。

铁基超导体发现的初期,由于样品质量不是很好,实验上没有发现任何磁有序的迹象。通过理论计算,项目组在国际上最早预言铁基超导体的母体是一个反铁磁半金属,随后被中子散射实验所证实;基于此,进一步预言FeTe的基态具有一种新型的双共线反铁磁长程序,随后也被中子散射实验所证实;项目组还预言三元铁硒超导体 $K_yFe_{2-x}Se_2$ 的母体是反铁磁半导体,并给出了在不同组分下磁有序的结构和电子结构,随后也分别被ARPES实验和中子散射实验所证实。

- 2) 提出砷或硒传递的反铁磁超交换作用是主要的磁相互作用,并提出反铁磁涨落是导致铁基超导电子配对的主要原因,这已成为研究人员对铁基超导体磁机制的主要认识。

既然铁基超导的母体具有磁有序,那么磁相互作用产生的机理是什么?通过系统的计算和理论分析,项目组提出铁基超导体中磁性相互作用的本质是铁离子的涨落局域磁矩之间存在通过砷或硒原子传递的超交换作用,这个图像也被称之为洪德耦合增强的磁交换机制,同时提出相应的反铁磁涨落是引起铁基超导电子配对的主要原因。根据这个机制,人们可以很好地解释项目组预言的FeTe的双共线反铁磁结构,也可以解释所有其它铁基超导体母体中所发现的磁性结构。在此基础上,项目组提出了描述铁基超导电子相互作用的 $t-J_H-J_1-J_2$ 模型,这个模型在铁基超导的理论研究中得到广泛的应用。

这些理论工作澄清了铁基超导体中电子结构和磁结构及磁相互作用机理,对铁基高温超导体中电子配对的本质和动力学机理的研究提供了基础和帮助,得到国际同行的广泛引用和高度评价。项目期间,项目组共发表SCI论文35篇,被他人引用1377次,其中8篇代表论文他人引用639次,申请人在重要国际会议上做邀请报告26次。期间因这些研究成果,第一申请人获得了香港大学‘Daniel Tusi Fellowship’,2012年度长江学者特聘教授,2015年度中国物理学会叶企孙物理奖,和2015年度教育部自然科学一等奖;同时项目组还受邀在赵忠贤院士和于淦院士主编的‘铁基超导体物性基础研究’一书中撰写‘概论’和‘电子结构’两章。

## 客观评价:

自从铁基高温超导体发现以来项目组在国际上始终处于铁基超导理论研究的最前沿, 取得了有国际影响及领先的重要研究成果, 项目组的理论研究工作在正式发表后被 SCI 引用 900 余次 (在 arXiv 上就另有 150 余次), 论文的引文主要发表在 Science, Nature, Nature Materials, Nature communications, Advances in Physics, Reviews of Modern Physics, Reports on Progress in Physics, Physical Review Letters, Physical Review B, JACS, Advanced Materials 等重要的学术刊物上。如下项目组摘入在阶段性研究总结的代表性综述文章中对项目组的研究论文的引用, 这些引用充分肯定和高度评价了项目组的研究成果, 特别是项目组的理论预言被实验所证实或实现, 其中引用和评述处都用黄色特别标出。

### 引文之一: 国际著名资深高温超导专家 David C. Johnston, "The puzzle of high temperature superconductivity in layered iron pnictides and chalcogenides", Advances in Physics 59, 803 (2010).

The parent 1111 and 122 compounds exhibit apparently coupled structural and commensurate antiferromagnetic (AF) transitions, also called 'spin density wave' (SDW) transitions, at  $\sim 100$ -200 K. These transitions result in distinct changes in the magnetic, thermal and electrical properties as illustrated for  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  in Figure 4 where these transitions are both at the same temperature of 138 K [24]. An AF ground state of  $\text{LaFeAsO}$  was predicted theoretically early on from first principles electronic structure calculations [31].

Superconductivity is induced upon 'doping' the parent compounds by changing the composition, as in  $\text{LaFeAsO}_{1-y}\text{F}_y$ ,  $\text{LaFeAsO}_{1-y}$ , or  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  as discussed

[31] F. Ma and Z.-Y. Lu, Phys. Rev. B 78 (2008), p. 033111 [31]即是代表性论文 1

From Table 7 the in-plane antiferromagnetic propagation vector for the diagonal double stripe structure  $\mathbf{Q}_{AF} = (\frac{1}{2}, 0)$  r.l.u. is at a  $45^\circ$  angle to the Fermi surface nesting vector  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  r.l.u. between the electron and hole pockets from Figures 18 and 20. From this one might infer that the magnetic ordering in FeTe has to arise from interactions between local moments. However, from spin-polarized electronic structure calculations, Ma *et al.* correctly predicted the observed antiferromagnetic diagonal double stripe structure in FeTe as shown at the bottom of Table 11 [271]. In addition, their band calculations predict an ordered moment of  $2.2$ - $2.6 \mu_B/\text{Fe}$  [271], which is in agreement with the experimental data for FeTe in Table 10 above.

To further address this issue, Ma *et al.* also calculated from their spin polarized band theory results the effective exchange constants between the Fe magnetic moments in FeTe and FeSe in the local moment  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  Heisenberg model, as listed in Table 11 [271]. We calculated the classical energies of the different ordered states that are listed in Table 11, using their exchange constants and our energy expressions in Equations (52). Our results reproduce the results given by Ma *et al.* In particular,

[271] F. Ma, W. Ji, J. Hu, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, Phys. Rev. Lett. 102 (2009), p. 177003;

[271]即是代表性论文 3

这篇综述文章对铁砷化合物超导体作了全面的总结, 其中项目组的工作被多处重点引用和高度评价。这里项目组摘入四处评述(黄色标注)。这就是, 项目组在论文[31]中第一个预言了铁基超导体的母体  $\text{LaOFeAs}$  是反铁磁半金属, 在论文[175]中系统地研究了 '122' 铁基超导体系列的电子结构和磁序, 在论文[271]中预言 FeTe 处于一种新型的双共线反铁磁序, 提出用  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  自旋海森堡模型描述, 并指出这里的物理机制是通过 Te 或 As 传递的次近邻超交换作用, 而不是费米面的嵌套。目前这一方案已经成为国际上对铁基超导体的反铁磁机制及结构相变驱动力认识的一个主要观点, 并获得越来越多的实验和理论研究支持。

one sees that the antiferromagnetic diagonal double stripe structure has the lowest energy for FeTe, and the (single) stripe structure as in the 1111-, 111- and 122-type FeAs-based compounds has the lowest energy for FeSe. Due to the lack of Fermi surface nesting in the  $\mathbf{Q}_{AF}$  direction and the success of the local moment model in explaining the observed magnetic structure of FeTe, the authors concluded that the local moment model is the most viable model to explain the observed antiferromagnetic structure of FeTe [271]. In addition to the results described in their paper, Ma *et al.* also calculated the wave vector dependent susceptibility  $\chi(\mathbf{Q})$  of the itinerant electrons and found that it peaks at the nesting wave vector(s)  $\mathbf{Q} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  r.l.u. in tetragonal reciprocal lattice units, as in Figure 41 above for  $\text{LaFeAsO}$ , but not at the observed diagonal double stripe wave vector  $\mathbf{Q} = (\frac{1}{2}, 0)$  r.l.u., thus confirming their local moment magnetism interpretation (Z.-Y. Lu, private communication). As noted above in Section 3.1.4, ARPES data for FeTe are consistent with local moment magnetism rather than itinerant magnetism.

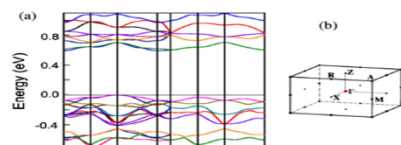


FIG. 15 (color online). (a) Electronic band structure of  $\text{K}_{0.8}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_2$  in the ground state with the  $2 \times 2$  block-AFM order. The top of the valence band is set to zero. (b) Explanation of the convention followed to label points of the Brillouin zone. These theoretical calculations are carried out in a tetragonal structure with lattice parameters in excellent agreement with experiments. From Xun-Wang Yan *et al.*, 2011.

### 引文之二: 国际著名量子多体和高温超导专家 Elbio Dagotto, "Colloquium: The unexpected properties of alkali metal iron selenide superconductors", Reviews of Modern Physics 85, 849 (2013).

which becomes superconducting upon electron or hole doping (Xun-Wang Yan *et al.*, 2011). This is relevant since in (Ti,K)Fe<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> superconductivity already occurs at  $x = 1.7$  or higher (M. H. Fang *et al.*, 2011). However, the issue of phase separation discussed in Sec. III renders the identification of the parent compound far more complicated than naively anticipated.

Xu, M., *et al.*, 2012, Phys. Rev. B 85, 220504(R).  
Yan, X.-W., M. Gao, Z. Y. Lu, and T. Xiang, 2011a, Phys. Rev. B 84, 054502.  
Yan, X.-W., M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, 2011b, Phys. Rev. Lett. 106, 087005.  
Yan, Xun-Wang, Miao Gao, Zhong-Yi Lu, and Tao Xiang, 2011, Phys. Rev. B 83, 233205.  
Yan, Y. J., M. Zhang, A. F. Wang, J. J. Ying, Z. Y. Li, W. Qin, X. G. Luo, J. Q. Li, Jiangping Hu, and X. H. Chen, 2012, Sci. Rep. 2, 212.

Recently another possibility was presented. Using neutron diffraction techniques for  $\text{K}_x\text{Fe}_{2-x}\text{Se}_2$ , Zhao *et al.* (2012) proposed the state in Fig. 3 (left panel), with a rhombus-type iron-vacancy order, as the parent compound of the SC state. In this state the iron spins have parallel (antiparallel) orientations along the direction where the iron vacancies are separated by four (two) lattice spacings. This state has ideal composition  $\text{KFe}_{1.5}\text{Se}_2$ , iron magnetic moments  $2.8 \mu_B$ , and an AFM band-semiconductor character, as in the first-principles calculations by Yan *et al.* (2011b). FS nesting is not applicable in this state and the large moments suggest that correlation effects cannot be neglected. The semiconducting nature of this state is also compatible with ARPES experiments (F. Chen *et al.*, 2011) that also proposed a semiconductor as the parent compound.

Xu, M., *et al.*, 2012, *Phys. Rev. B* **85**, 220504(R).  
Yan, X.-W., M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, 2011a, *Phys. Rev. B* **84**, 054502.  
Yan, X.-W., M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, 2011b, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 087005.  
Yan, Xun-Wang, Miao Gao, Zhong-Yi Lu, and Tao Xiang, 2011, *Phys. Rev. B* **83**, 233205.  
Yun, Y. J., M. Zhang, A. F. Wang, J. J. Ying, Z. Y. Li, W. Qin, X. G. Luo, J. Q. Li, Jiangping Hu, and X. H. Chen, 2012, *Sci. Rep.* **2**, 212.

这里被绿色下划线所标注的三篇文章分别是项目组的代表性论文7, 6和5。

这篇综述文章对插层所形成的三元铁硒化合物超导体作了全面的总结，其中我们的工作被多处重点引用和高度评价。这里我们摘入三处评述(被下划绿线标注)。这就是，我们在上面三篇论文(Yan, Gao, Lu, and Xiang)中系统地研究了插层三元铁硒超导化合物，预言其母体是反铁磁半导体而不是 Mott 绝缘体，相应计算的带宽被随后的 ARPES 实验所证实；并给出了相应的电子结构和复杂的根号五乘根号五的区块化棋盘反铁磁序结构，指出超导是通过对这样的反铁磁半导体的掺杂而实现的；再则，我们的计算能带图被引用为一个标准。

代表性论文专著目录：（按照推荐书表格列出主要内容，不需再做表格）

序号	论文专著 名称/刊名 /作者	影响 因子	年卷页 码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表 时间 年月	通讯 作者	第 一 作 者	国内作者	SCI 他引 次数	他引 总次 数	知识 产权 是否 归国 内所 有
1	Iron-based layered compound LaFeAsO is an antiferromagnetic semimetal /PHYSICAL REVIEW B / Ma, FJ (Ma, Fengjie); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi)	3.736	2008 年 78 卷 033111 页	2008 年 6 月	卢仲毅	马锋杰	马锋杰, 卢仲毅	144	144	是
2	Arsenic-bridged antiferromagnetic superexchange interactions in LaFeAsO/PHYSICAL REVIEW B/Ma, F (Ma, Fengjie); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	3.736	2008 年 78 卷 224517 页	2008 年 12 月	卢仲毅, 向涛	马锋杰	马锋杰, 卢仲毅, 向涛	128	128	是
3	First-Principles Calculations of the Electronic Structure of Tetragonal alpha-FeTe and alpha-FeSe Crystals: Evidence for a Bicollinear Antiferromagnetic Order/PHYSICAL REVIEW LETTERS/Ma, FJ (Ma, Fengjie); Ji, W (Ji, Wei); Hu, JP (Hu, Jiangping); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	7.512	2009 年 102 卷 177003 页	2009 年 5 月	卢仲毅, 向涛	马锋杰	马锋杰, 季威, 卢仲毅, 向涛	143	143	是

4	Electronic structures of ternary iron arsenides AFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> (A = Ba, Ca, or Sr)/FRONTIERS OF PHYSICS IN CHINA/Ma, FJ (Ma, Feng-jie); Lu, ZY (Lu, Zhong-yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	2.086	2010年5卷150页	2010年6月	卢仲毅, 向涛	马锋杰	马锋杰, 卢仲毅, 向涛	36	36	是
5	Electronic Structures and Magnetic Order of Ordered-Fe-Vacancy Ternary Iron Selenides TlFe <sub>1.5</sub> Se <sub>2</sub> and AFe <sub>2</sub> (A = K, Rb, or Cs)/PHYSICAL REVIEW LETTERS/Yan, XW (Yan, Xun-Wang); Gao, MA (Gao, Miao); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	7.512	2011年106卷087005页	2011年12月	卢仲毅, 向涛	闫循旺	闫循旺, 高淼, 卢仲毅, 向涛	65	65	是
6	Ternary iron selenide K <sub>0.8</sub> Fe <sub>1.6</sub> Se <sub>2</sub> is an antiferromagnetic semiconductor/PHYSICAL REVIEW B/Yan, XW (Yan, Xun-Wang); Gao, M (Gao, Miao); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	3.736	2011年83卷233205页	2011年6月	卢仲毅, 向涛	闫循旺	闫循旺, 高淼, 卢仲毅, 向涛	60	60	是
7	Electronic and magnetic structures of the ternary iron selenides AFe <sub>2</sub> Se <sub>2</sub> (A = Cs, Rb, K, or Tl)/PHYSICAL REVIEW B/Yan, XW (Yan, Xun-Wang); Gao, M (Gao, Miao); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	3.736	2011年84卷054502页	2011年8月	卢仲毅, 向涛	闫循旺	闫循旺, 高淼, 卢仲毅, 向涛	39	39	是

8	Atomic and electronic structures of FeSe monolayer and bilayer thin films on SrTiO3 (001): First-principles study/PHYSICAL REVIEW B/Liu, K (Liu, Kai); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	3.736	2012 年 85 卷 235123 页	2012 年 6 月	卢仲毅, 向涛	刘凯	刘凯, 卢向涛 仲毅, 涛	24	24	是
合 计								639	639	

## 主要完成人情况:

### 1. 卢仲毅, 教授, 中国人民大学物理系

作为项目总负责人之一, 提出了本项研究的整体计划, 主持了项目的总体实施和参加了项目的所有研究工作, 确定研究方向、负责选题、进行解析推导、构建物理图像、分析讨论计算结果、完成论文写作以及具体指导学生进行计算和分析计算数据等。

### 2. 向涛, 研究员, 中国科学院物理研究所

作为这个项目合作单位的负责人, 与第一申请人共同提出了本项研究的整体计划, 确定研究方向和选题, 参与主持了项目的总体实施和项目的主要研究工作, 包括解析推导、构建物理图像、分析讨论计算结果、完成论文写作等。



**完成人合作关系说明：**

卢仲毅和向涛共同作为项目的负责人合作完成了系列代表性研究论文（代表性论文一除外）。