

I 强关联与超导物理

分会召集人：陈焱、李有泉、罗洪刚、许祝安、杨义峰、张清明、周兴江

分会联系人：李凯（kaili@zzu.edu.cn）

I01

Electronic Genes for Unconventional High Temperature Superconductors

Jiangping Hu

Institute of Physics, CAS

In the past several decades, two families of unconventional high temperature superconductors (high T_c) based on transition metal compounds, cuprates and iron-based superconductors, were discovered. Both discoveries were made accidentally in labs without any theoretical guides. Lacking of successful predictions on new high T_c materials is one of major obstacles to reach a consensus on unconventional high T_c mechanism.

In this talk, we address the key question related to these two special materials: Why are these Cu and Fe compounds so special? We answer this question by suggesting the existence of a common electronic gene behind these two families of materials: those d-orbitals of transition metal elements with the strongest in-plane bonding to anion p-orbitals are isolated near Fermi energy. This character is absent in other known transition metal compounds. Thus, it explains the rareness of unconventional high T_c superconductors. The gene also indicates the superexchange antiferromagnetic interactions mediated through anion p-orbitals are the source of superconducting pairing.

Furthermore, we will extend this idea to predict possible unconventional high T_c materials. The gene conditions can only be fulfilled through special collaborations between cation-anion building blocks, lattice structures and filling configurations of d-shells. We predict three cases for Co/Ni-based compounds which meet the gene conditions. Verifying the prediction can convincingly establish high T_c superconducting mechanism and pave a way to design new high T_c superconductors.

I02

Intertwined dipolar and multipolar order in a triangular-lattice magnet

Yao Shen,¹ Changle Liu,¹ Yayuan Qin,¹ Shoudong Shen,¹ Yao-Dong Li,^{1,2} Robert Bewley,³ Astrid Schneidewind,⁴ Gang Chen,^{1,5,6}

and Jun Zhao^{1,6}

¹State Key Laboratory of Surface Physics and Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China

²Department of Physics, University of California Santa Barbara, Santa Barbara, California 93106, USA

³ISIS Facility, Rutherford Appleton Laboratory, STFC, Chilton, Didcot, Oxon OX11 0QX, United Kingdom

⁴Jülich Centre for Neutron Science (JCNS) at Heinz Maier-Leibnitz Zentrum (MLZ),

Forschungszentrum Jülich GmbH, Lichtenbergstr. 1, 85748 Garching, Germany

⁵Center for Field Theory and Particle Physics, Fudan University, Shanghai, 200433, China

⁶Collaborative Innovation Center of Advanced Microstructures, Nanjing University, Nanjing, 210093, China

A phase transition often involves a symmetry breaking and the emergence of an order parameter. Certain f-electron materials exhibit exotic hidden ordered phases, in which the order parameters are inaccessible to neutron diffraction experiments. Insight of the nature of the hidden order can be obtained by investigating the collective excitations associated with the phase transition. However, experimental identification and theoretical interpretation of such collective modes are often complicated and ambiguous, especially in a system with both itinerant and local moments. In this work, we combine neutron scattering and thermodynamic probes to study a rare-earth triangular-lattice magnet deep in the Mott insulator regime. We show that the observed highly dispersive spin excitations and thermodynamic properties can be accurately described by a transverse field Ising model on the triangular lattice with an intertwined dipolar and multipolar order that is “hidden” in the neutron diffraction measurements.

I03

Dirac fermions in layer-structured titanium-based oxypnictide superconductors

Wanling Liu¹, Zhe Huang¹, Xianbiao Shi², Hongyuan Wang³,

Yanfeng Guo³, and Dawei Shen¹

¹Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, 865 Changning Road, Shanghai 200050, China

²State Key Laboratory of Advanced Welding and Joining, Harbin Institute of Technology, Shenzhen 518055, China

³School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 200031, China

Key words: Dirac fermions, Angle-resolved photoemission spectroscopy, Titanium-based oxypnictide superconductors

Angle-resolved photoemission spectroscopy and first-principles calculations are used to prove the existence of a single pair of three-dimensional Dirac points in the well-known layered titanium-based oxypnictide superconductor $\text{BaTi}_2\text{Bi}_2\text{O}$. The Dirac point is found approximately 100 meV below the Fermi level. This compound is also found to be a superconductor with transition temperature (T_c) 4.6 K, which may provide an appropriate platform to study the interplay between topological Dirac fermions and superconductivity.

I04

Charge order evolution in overdoped cuprates

Xintong Li¹, Ying Ding², Hongtao Yan², Changwei Zou¹, Haiwei Li¹, Shusen Ye¹, Lin Zhao², Xingjiang Zhou^{2,3}, Yayu Wang^{1,3†}

¹ State Key Laboratory of Low Dimensional Quantum Physics, Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China

² Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China

³ Collaborative Innovation Center of Quantum Matter, Beijing, China

Email: yayuwang@tsinghua.edu.cn

摘要 : One of the key issues in unraveling the mystery of high T_c superconductivity in the cuprates is to understand the ubiquitous charge modulations. Checkerboard charge orders have been widely observed in underdoped cuprates with four-unit-cell ($4a_0$) periodicity. However, the heavily overdoped regime is much less explored. Here we start from the strongly overdoped regime, which is considered to be Fermi liquid, performing scanning tunneling microscopy and spectroscopy measurements on $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ cuprates with varied dopings. In the overdoped non-superconducting regime, spectroscopic

imaging reveals nanoscale patches of static charge order with $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ periodicity, which will fade away with reduced hole-concentration. Meanwhile, a nearly periodic charge modulation assembling the checkerboard charge order emerges and evolves into the well-known checkerboard when approaching the optimal doping. The doping-dependence of the charge order wavevector and the doping-independence intra-order unit-cells demonstrate the peculiar charge order evolution in the cuprates from the Fermi liquid limit to the doped Mott insulator regime with strong correlations.

关键词：overdoped cuprate, STM, charge order

资助项目：国家自然科学基金项目 No. 51788104

I05

三铜氧面铋系铜氧化物 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ 准粒子相干散射分析

郝镇齐^a、邹昌炜^a、李昕彤^a、李海威^a、冀豫^a、徐妙^a、叶树森^a、俞理^b、周兴江^b、王亚愚^a

^a清华大学物理系低维量子物理国家重点实验室，北京 100084

^b中国科学院物理研究所北京凝聚态物理国家研究中心，北京 100190

Email: hzq.physics@outlook.com

摘要：铋系铜氧化物超导体具有层状结构，其超导转变温度随着层内铜氧面数目 ($n=1, 2, 3$) 的增加而升高。对于三铜氧面 ($n=3$) 的 Bi-2223 样品，其最高超导转变温度约为 $T_c \approx 110$ K，高于 Bi-2201 ($n=1$) 和 Bi-2212 ($n=2$)。通常认为，在 Bi-2223 中存在两种不等价的铜氧面，其中内层铜氧面 (IP) 空穴掺杂浓度较低，外层铜氧面 (OP) 浓度较高。这种铜氧面的不等价性，是 Bi-2223 的独特之处，也被认为与其更高 T_c 的属性有密切关联。

课题组团队利用自建的扫描隧道显微镜 (STM) 在 4.2 K 环境下对该材料进行了深入研究。通过傅里叶变换隧道谱学 (FT-STs) 方法，得到了波戈留波夫准粒子干涉图样，进而推断出准粒子色散关系以及潜在费米面的形态。结果表明，与 Bi-2212 相比，Bi-2223 准粒子散射存在于更大的能量区间，与其更高的超导转变温度相匹配。相位敏感准粒子相干散射 (PR-QPI) 分析表明该材料能隙函数同样具有 d-波对称性。实验测量还展现了准粒子干涉图样中更多精细结构，与 Bi-2223 材料中两种不等价铜氧面有关。这些实验观察或将对揭示铜氧化物超导机理提供新的线索。

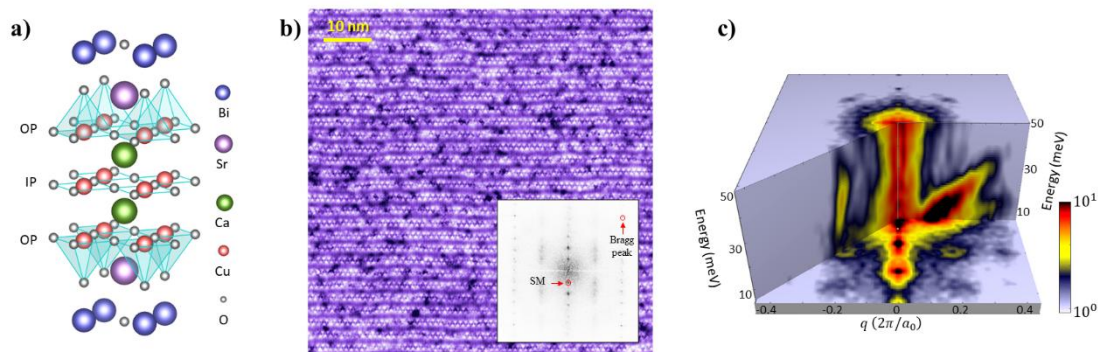


图 1 a) Bi-2223 晶格结构 ; b) STM 形貌图 ; c) 准粒子干涉图样的能量依赖关系

关键词：铜氧化物 扫描隧道显微学 准粒子干涉 Bi-2223

参考文献

- [1] J. E. Hoffman et al., Imaging Quasiparticle Interference in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. *Science* 2002, 297, 1148–1151.
- [2] Gu, Q. et al., Directly visualizing the sign change of d-wave superconducting gap in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ by phase-referenced quasiparticle interference. *Nat. Commun.* 2019, 10, 1603.

基金项目：国家自然科学基金项目 (No. 51788104) 等

I06

Cr 和 Mn 基新超导体探索和物性研究

雒建林

中国科学院物理研究所

过渡金属化合物是高温超导电性和非常规超导电性研究的摇篮。本报告将综述近年来我们在过渡金属化合物特别是 Cr 基和 Mn 基材料中新超导体的探索和非常规物性研究中的一些进展。我们发现 CrAs 和 MnP 在高压下超导[1,2]，其正常态表现出量子临界性和非费米液体行为，多种实验证据表明其具有非常规超导电性，这些发现打开在 Cr 和 Mn 基材料中探索超导体新路。最近我们发现了新的 Cr 基超导体 $\text{Pr}_3\text{Cr}_{10}\text{N}_{11}$ [4]和具有 MnP 结构的新超导体 WP[5]。

[1] W. Wu et al, Superconductivity in the vicinity of antiferromagnetic order in CrAs. *Nature Communications* 5, 5508 (2014).

[2] J. G. Cheng et al, Pressure Induced Superconductivity on the border of Magnetic Order in MnP, *Phys. Rev.*

Lett, 112, 117001(2015)

[3] W. Wu et al, Superconductivity in Chromium Nitrides Pr₃Cr_{10-x}N₁₁ with Strong Electron Correlations, National Science Review, in press.

[4] Z. Y. Liu et al, Superconductivity in the WP single crystal, Phys. Rev. B 99, 184509 (2019).

I07

To p or not to p ? – New ¹⁷O NMR results on Sr₂RuO₄

Wuhan High Magnetic Field Cent, Huazhong University of Science and Technology, China

Sr₂RuO₄ is one of the most fascinating unconventional superconductors. Although it shares the same crystalline structure with single-layer high- T_c cuprates, its T_c value is much lower than that of the high- T_c . At the early stage of its discovery, theorists predicted a p -wave pairing state in Sr₂RuO₄. The experimental evidence for p -wave pairing came primarily from NMR Knight shift, the phase-sensitive, and later, cantilever magnetometry measurements. However, controversies on its precise pairing symmetry have persisted. For example, the absence of T_c vs. strain cusp near zero strain in the uniaxial strain measurements on Sr₂RuO₄ appears to suggest that a simple p -wave on a single-band is not likely to explain the experimental data assuming that no complications from the nonuniformity of the strains exist. Bulk and local experimental probes are needed to elucidate this critical issue. In this talk, I will present our recent ¹⁷O NMR measurements on Sr₂RuO₄ in both normal and superconducting states. Significant drops in the Knight shift across T_c are observed at both zero strains and that corresponding to van Hove singularity. These results have prompted reconsideration of the pairing symmetry in Sr₂RuO₄.

References:

[1] Y. Luo *et al.*, Phys. Rev. X 9, 021044 (2019).

[2] A. Pustogow, Y. Luo *et al.*, arXiv: 1904.00047 (2019).

I08

A₂Cr₃As₃ 中的铁磁量子临界点和非常规超导电性

罗军*, 杨杰, 周睿, 郑国庆

中国科学院物理研究所, 北京 100190

Email: junluo@iphy.ac.cn

摘要：超导和铁磁的关系是凝聚态物理研究的重要课题。早在上个世纪 80 年代，Appel 和 Fay 两位理论工作者给出了铁磁超导的相图：无论是在铁磁有序态里还是在顺磁态里，铁磁涨落都会导致 p 波自旋三重态超导的出现。但是铁磁超导的实验进展非常缓慢，这是因为这种新奇超导态的出现需要满足三个条件：处于铁磁有序态附近、高晶体质量和极低的温度。目前，包含 $5f$ 电子的化合物 UGe₂ 在铁磁有序态里出现超导（超导转变温度 T_{sc} 小于 1K），证实了理论的预言。但是铁磁有序态被抑制后，超导并没有出现。因此，人们对顺磁态铁磁涨落背景下的超导依然缺乏认识。

在这个报告中我将介绍铬基超导体 A₂Cr₃As₃ (A = Na, Na_{0.75}K_{0.25}, K, Rb) 的核四极矩共振研究结果【1】。如图 1(a)所示，我们发现从 Na 过渡到 Rb，物理量 θ 逐渐向零靠近，表明系统逐渐靠近铁磁量子临界点(QCP)。这可以由 Cr₂-As₂-Cr₂ 键角 α 逐渐向 90°靠拢时铁磁相互作用增强来解释。而当系统偏离铁磁 QCP 时， T_{sc} 逐渐上升，

在 $\text{Na}_2\text{Cr}_3\text{As}_3$ 处达到了 8K。这种行为与反铁磁 QCP 处 T_{sc} 为极大值形成鲜明的对比。如图 1(b)和 1(c)所示，四个样品的 $1/T_1$ 在 T_{sc} 之下快速下降且没有相干峰， $1/T_1$ 在特征温度 $T^* \approx 0.6T_{sc}$ 之下正比于 T^5 ，这说明 $\text{A}_2\text{Cr}_3\text{As}_3$ 家族的超导能隙中普遍存在点状节点。在报告中，我还将讨论 $\text{A}_2\text{Cr}_3\text{As}_3$ 与超流 $^3\text{He A}$ 相的对应关系。因此， $\text{A}_2\text{Cr}_3\text{As}_3$ 是一类连接强关联、非常规超导以及拓扑性质三大研究领域的重要材料，值得进一步研究。

本工作是与穆青隔博士，刘通博士，伊长江博士，任志安研究员和石友国研究员共同合作完成的。

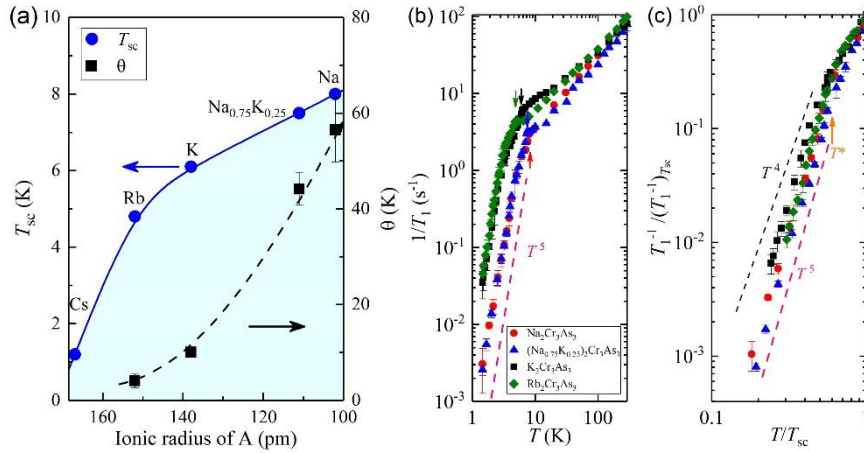


图 1 $\text{A}_2\text{Cr}_3\text{As}_3$ ($\text{A} = \text{Na}, \text{Na}_{0.75}\text{K}_{0.25}, \text{K}, \text{Rb}$)体系的相图和 $1/T_1$ 随温度的变化

关键词：铁磁量子临界点 铁磁涨落 非常规超导 核四极矩共振

参考文献 【1】 J. Luo, J. Yang, R. Zhou, Q. G. Mu, T. Liu, Zhi-an Ren, C. J. Yi, Y. G. Shi, and Guo-qing Zheng, Tuning the distance to a possible ferromagnetic quantum critical point in $\text{A}_2\text{Cr}_3\text{As}_3$, *Phys. Rev. Lett.* 2019, 123 (4), 047001.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NOs. 11674377, 11634015 and 11774399),

MOST基金 (Nos.2016YFA0300502, 2017YFA0302901 and 2017YFA0302904).

I09

Tunable metal-insulator transition and superconductivity in twisted bilayer graphene

Tianxing Ma

Department of Physics, Beijing Normal University, 100875 China

Using exact quantum Monte Carlo method, we identify the phase diagram of the half filled, the lightly doped and heavily doped graphene, which shows a rather rich physical properties. At half filling, the system is driven to a Mott insulator with antiferromagnetic long range order by increasing interaction, and a transition from a $d+id$ pairing to a $p+ip$ pairing is revealed, depends on the next-nearest hopping and the electronic fillings. We also examine the recent novel electronic states seen in magic-angle graphene superlattices. From the Hubbard model on a double-layer honeycomb lattice with a rotation angle $\theta=1.08^\circ$, we reveal that an antiferromagnetically ordered Mott insulator emerges beyond a critical U_c at half filling, and with a small doping, the pairing with $d+id$ symmetry dominates over other pairings at low temperature. The effective $d+id$ pairing interaction strongly increase as the on-site Coulomb interaction increases, indicating that the superconductivity is driven by electron-electron correlation. Our non-biased numerical results demonstrate that the twisted bilayer graphene share the similar superconducting mechanism of high temperature superconductors, which is a new and idea platform for further investigating the strongly correlated phenomena.

I10

铜氧化物高温超导体超导与赝能隙态的唯象描述

张健豪、李森、马遥、钟益桂、丁洪、翁征宇

清华大学高等研究院, 北京 100084

西安理工大学应用物理系, 西安 710048

北京凝聚态物理国家实验室/中国科学院物理研究所, 北京 100190

中国科学院大学物理学院, 北京 100190

Email: zhang-jh15@mails.tsinghua.edu.cn

摘要:三十余年来,铜氧化物高温超导体的发现吸引了大量物理学家的广泛关注,包括理论计算与实验测量。其中,铜基高温超导体的准二维结构使得角分辨光电子谱(ARPES)技术成为其中最重要的实验手段之一。在 ARPES 实验观测中,不连续的“费米弧”和有“kink”的色散关系是其中两个比较反常的实验现象,且他们都揭示了朗道费米液体理论(Landau Fermi liquid theory)不适用于铜基高温超导体。在这个工作中,基于掺杂莫特绝缘体的微观理论,我们提出了一个用于表征铜基高温超导体超导态和赝能隙态的唯象格林函数。在这个框架之下,对于不同的空穴掺杂浓度,ARPES 实验所观测到的不连续的“费米弧”与有“kink”的色散关系等现象可以被系统的解释,节点(nodal)与反节点(antinodal)处不同的物理也可以用超导态中的“两重能隙”结构来很好的解释。我们着重说明,由相位弦效应所导致的电子分数化(fractionalization)对于我们提出这样一个奇异的“两部分”格林函数(two-component Green's function)起到了决定性的作用。

关键词: ARPES, 费米弧, “kink” 色散, 超导, 赝能隙, 唯象理论, 格林函数, 相位弦, 分数化

【1】 J.-H. Zhang *et al.*, Phenomenological Description of the Spectral Function for the Pseudogap and Superconducting Phases of High-Tc Cuprates, *arXiv: 1905.04862*.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11534007), 中国科技部基金项目 (Nos. 2015CB921000 与 2017YFA0302902)

III

双玻色模超导体中的同位素效应

赖盛强、王达、王强华

南京大学物理学院, 南京市汉口路 22 号 210093

Email: dawang@nju.edu.cn

摘要: 超导转变温度的反常同位素效应在许多超导体中被普遍观测到。在本工作中, 我们通过在 Bardeen-Cooper-Schrieffer 理论框架下同时考虑声子和非声子模式, 对此提供一种简单且统一的物理图像。同位素系数 α 被解析的得到并进行系统的研究。与传统的 Eliashberg 理论 (其中 $\alpha \leq 1/2$) 不同, 在非声子波色模式的影响下, 同位素系数 α 可

以为任意值。最有趣的是，如果两种波色模式中的一种（既可以是非声子，也可以是声子）为拆对模式，则只要声子具有更高的频率，大的同位素系数 $\alpha > 1/2$ 就可以被得到。基于我们的理论，我们将对几类超导材料进行一些讨论。

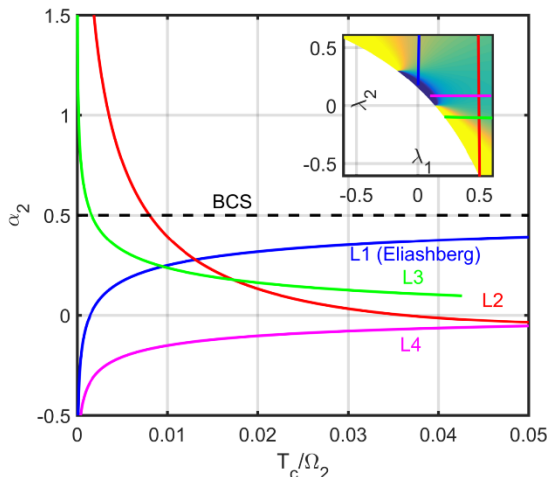


图 1 几种典型的同位素系数随超导转变温度的关系。

关键词：同位素效应 同位素系数

基金项目：国家自然科学基金项目 (Nos. 11874205, 11574134)。

I13

准一维铜氧化物超导体 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 的电子结构

刘 凯

中国人民大学物理学系，北京 100872

Email: kliu@ruc.edu.cn

摘要：普遍认为，完整的 CuO_2 面是实现铜氧化物高温超导电性的先决条件。然而，在 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 超导材料中可能存在例外，这里 CuO 链扮演着重要角色。我们采用基于密度泛函理论的第一性原理计算，系统地研究了 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 的电子结构和磁性质。关于化学计量的 Ba_2CuO_3 和 Ba_2CuO_4 的计算结果显示，不同于包含完整二维 CuO_2 面的非磁性金属 Ba_2CuO_4 ，包含准一维 CuO 链的 Ba_2CuO_3 是一个反铁磁莫特绝缘体，它拥有最近邻的链内反铁磁耦合和较弱的链间耦合，且最低未占据态和最高占据态由 Cu 的 $3d_{b^2-c^2}$ 轨道（如果我们定义 bc 平面为 xy 平面的话， $d_{b^2-c^2}$ 就是 $d_{x^2-y^2}$ 轨道）和 O 的 $2p$ 轨道所主导。总能计算表明，若以常规的铜氧化物超导体为参照， $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 中的氧空位更容易出现在平面位而非顶点位，这与类似材料的实验测量相吻合。此外，我们发现适度的电荷掺杂将诱导出 CuO 链中的磁阻挫和自旋涨落，有利于超导电性的出现。我们预测， $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 中的自旋涨落存在较强的各向异性，这有待于进一步的实验证实。

关键词：铜氧化物超导体 准一维 电子结构

参考文献

- [1] Kai Liu, Zhong-Yi Lu, and Tao Xiang, Electronic structures of quasi-one-dimensional cuprate superconductors $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$, *Phys. Rev. Mater.* 2019, 3 (4), 044802.

基金项目：国家重点研发计划项目 (No.2017YFA0302900)；国家自然科学基金项目 (No.11774422, No.11774424)

I14

Grassmann Tensor product state study for global phase diagram of doped-Mott-insulator on honeycomb lattice

Hao Zhang, Zheng-Cheng Gu and Wei-Qiang Chen

Department of Physics, Southern University of Science and Technology, China

We study the global phase diagram of t-J model on honeycomb lattice with grassmann tensor product state. A robust d+id superconducting phase is found over a large doping regime. In small t/J case, the coexistence of superconductivity and antiferromagnetism is found at low doping.

I15

Effect of structural supermodulation and oxygen defects on superconductivity in tri-layer cuprate $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$

邹昌炜、郝镇齐、王亚愚

清华大学物理系低维量子物理国家重点实验室，北京 100084

Email: yayuwang@mail.tsinghua.edu.cn

Abstract: We investigate the spatial and doping evolutions of the superconducting properties of tri-layer cuprate $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ (Bi-2223) by using scanning tunneling microscopy and spectroscopy. Both the superconducting coherence peak and gap size exhibit periodic variations with the structural supermodulation, but the effect is much more pronounced in the underdoped regime than at optimal doping. Moreover, a new type of tunneling spectrum characterized by two superconducting gaps emerges with increasing doping, and the two-gap features also correlate with the supermodulation. We propose that the interaction between the inequivalent outer and inner CuO_2 planes is responsible for these novel features that are unique to tri-layer cuprates.

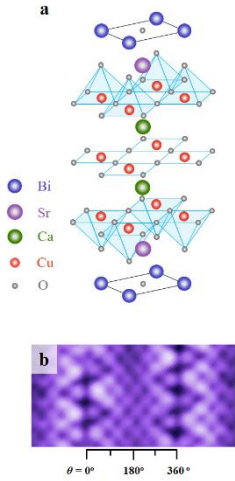


Figure 1:
Crystal structure
of Bi-2223.

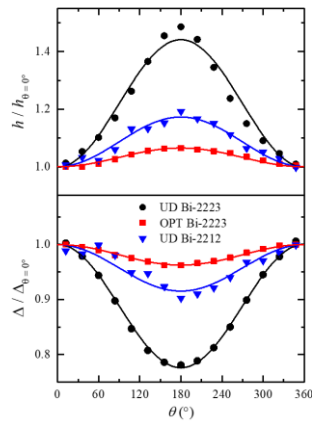


Figure 2:
Superconducting gap size and
coherence peak height as a
function of θ .

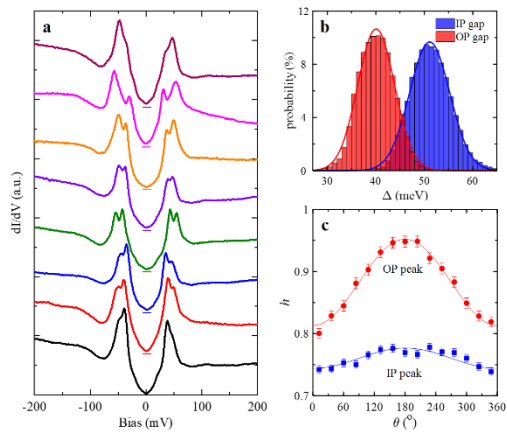


Figure 3:
Emergence of two superconducting gaps
in optimally doped Bi-2223.

References:

[1] C. Zou, Z. Hao, H. Li, X. Li, S. Ye, L. Yu, C. Lin, and Y. Wang, in arXiv e-prints2019.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 51788104、 11534007)

I16

铜基超导 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ 薄膜的离子固体调控

廖孟涵¹、朱玉莹¹、张金¹、John Schneeloch²、 Ruidan Zhong²、 Genda Gu²、姜开利

¹、张定¹、马旭村¹、薛其坤¹

¹清华大学物理系，北京 100084

²Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973, United States

Email: lmh15@mails.tsinghua.edu.cn dingzhang@mail.tsinghua.edu.cn qkxue@mail.tsinghua.edu.cn

摘要：离子固体/液体技术因为其 10^{15} cm^{-2} 的载流子调节能力而成为了连续调控超导和其他量子物态的重要方法。在该工作中，我们利用固态离子背栅调节技术，在机械剥离的 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (BSCCO) 薄膜中利用锂离子注入连续调控了其载流子浓度，实现了超导-绝缘体转变。我们通过搭建平面隧穿结，原位测量了在该量子相变过程中 BSCCO 态密度演化的重要信息。我们发现，在超导转变温度降低并最终进入绝缘态的过程中态密度逐渐降低，超导相干峰消失，赝能隙变大并出现向绝缘能隙转化的趋势。最近，我们还在 1T-TiSe₂ 薄膜中通过离子固体调控注入锂离子而成功实现了超导。我们发现，随着锂离子浓度的增加，其电子浓度逐渐增大，CDW 相逐渐被压制，出现了一个 T_c 约为 2 K 的超导态。有趣的是，在该材料中的 CDW 转变温度和超导 T_c 随着载流子浓度几乎保持不变，研究了该体

系中揭示出了锂离子插层过程中的相分离与电荷密度波和超导相之间的竞争关系。该工作显示出离子固体调控技术是研究二维材料中量子相变的有效手段。

关键词：离子固体调控，锂离子插层，超导-绝缘体相变，赝能隙，CDW 相变

参考文献

【1】 M. Liao, Y. Zhu, J. Zhang, R. Zhong, J. Schneeloch, G. Gu, K. Jiang, D. Zhang, X. Ma, Q.-K. Xue. *Nano Letters* 18, 5660. (2018)

基金项目：该项工作得到国家自然科学基金，科技部和北京未来芯片技术高精尖创新中心等的支持。

I17

超薄 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ 的 c 轴各向同性约瑟夫森隧穿

朱玉莹¹、廖孟涵¹、张庆华²、孟繁琦²、Ruidan Zhong³、John Schneeloch³、Genda Gu³、谷林²、马旭村¹、张定¹、薛其坤¹

¹清华大学物理系，北京 100084

²中国科学院物理研究所，北京 100190

³Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973, United

States

Email: yuyingzhu@tsinghua.edu.cn, dingzhang@mail.tsinghua.edu.cn, qkxue@mail.tsinghua.edu.cn

摘要：基于高温超导薄膜的约瑟夫森结不仅有非常多的应用价值，而且可以用于研究高温超导体的配对对称性。我们通过解理 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (BSCCO) 的单晶得到超薄的薄膜样品，采用范德瓦尔斯堆叠技术，制备了微米量级原子层平整的界面约瑟夫森结。通过低温下的电流-电压 (I-V) 特性曲线，证明观测到的超流是来源于界面处上下各半个单位元胞 (unit cell) 内的库珀对所参与的约瑟夫森隧穿。在此基础上，我们制备了大约 30 个不同扭转角度 θ ($0^\circ \sim 90^\circ$) 的约瑟夫森结，通过对比同样掺杂条件下，不同扭转角度 θ 的约瑟夫森耦合强度 (临界电流与正常态电阻的乘积, $I_c \cdot R_N$)，我们发现约瑟夫森耦合强度对扭转角度不敏感。根据理论预言【1】，d 波超导体的临界电流密度 J_c 与扭转角度 θ 呈现 $\cos(2\theta)$ 的关系，也就是说在 45° 角附近很快衰减为零，而 s 波超导体的临界电流密度 J_c 不依赖于扭转角度 θ 。所以我们的实验结果更符合各向同性的 s 波的配对对称性。另外，我们的工作也为将来实现高温超导量子电路提供了一种非常经济有效的方法。

关键词：高温超导体 约瑟夫森效应 配对对称性

参考文献

【1】 A. Bille, R. A. Klemm, K. Scharnberg. Models of c-axis twist Josephson tunneling. *Phys. Rev. B* 64, 174507 (2001).

【2】 Yuying Zhu[†], Menghan Liao[†], Qinghua Zhang[†], Fanqi Meng, Ruidan Zhong, John Schneeloch, Genda Gu, Lin Gu, Xucun Ma, Ding Zhang^{*}, and Qi-Kun Xue^{*}. arXiv:1903.07965.

基金项目：国家自然科学基金，中国科学技术部，北京未来芯片技术高精尖创新中心

铈基和铀基材料中 f 电子特性的 ARPES 研究

Q. Y. Chen^{1*}, S. Y. Tan¹, L. Shu², H. Q. Yuan³, S. Kirchner³, Q. Si⁴, D. L. Feng², X. C. Lai¹

¹*Science and Technology on Surface Physics and Chemistry Laboratory, Mianyang, China*

²*Department of Physics, Fudan University, Shanghai, China*

³*Center for Correlated Matter, Zhejiang University, Hangzhou, China*

⁴*Department of Physics and Astronomy, Rice University, Huston, TX 77005, USA*

Email: shequiuyun@126.com

Heavy fermion systems share some of the strange metal phenomenology seen in other unconventional superconductors, providing a unique opportunity to set strange metals in a broader context. The interplay of localization and itinerancy is central to understanding heavy fermion systems. These materials acquire high electronic masses and a concomitant Fermi volume increase as f electrons delocalize at low temperature. Here we performed systematic study of some typical Cerium-based and Uranium-based compounds. In Ce-based compounds, like CeCoIn₅, we spectroscopically resolved the development of band hybridization and the Fermi surface expansion over a wide temperature region, and observed the localized-to-itinerant behavior of the 4f electrons in these compounds. Our results also point to an unanticipated role played by the crystal field excitations, and offer a comprehensive and in part, unanticipated experimental picture of the heavy fermion formation, setting the stage for understanding the emergent properties, including unconventional superconductivity, in this and related materials.

Due to the risk of handling radioactive actinide materials, direct experimental observation of the electronic structure across either the localized-to-itinerant or magnetic transitions remains lacking. Moreover, another long-standing important issue is whether f -electrons are itinerant or localized when the magnetic order occurs, and how they coexist with each other. Here, by using angle-resolved photoelectron spectroscopy, we present detailed electronic structure of USb₂ and observed two different kinds of heavy quasi-particle bands in the antiferromagnetic state of USb₂. Polarization-dependent measurements show that these electronic states are derived from 5f orbitals with different characters; in addition, further temperature-dependent measurements reveal that one of them is driven by the Kondo correlations between the 5f electrons and conduction electrons, while the other reflects the dominant role of the magnetic order. Our results on the low-energy electronic excitations of USb₂ implicate orbital selectivity as an important new ingredient for the competition between Kondo correlations and magnetic order and, by extension, in the rich landscape of quantum phases for strongly correlated f -electron systems.

Key words : heavy-fermion system, ARPES, 4f electrons, localization/itinerancy

Reference

- [1] Q. Y. Chen et al., **Phys. Rev. Lett.** 123, 106402(2019)
- [2] Q. Y. Chen et al., **Phys. Rev. Lett.** 120, 066403(2018)
- [3] Q. Yao et al., **Phys. Rev. B** 99, 081107(R)(2019)
- [4] Q. Y. Chen et al., **Phys. Rev. B** 100, 035117(2019)
- [5] Q. Y. Chen et al., **Phys. Rev. B** 96, 155124(2018)
- [6] Q. Y. Chen et al., **Phys. Rev. B** 97, 075149(2018)
- [7] W. Zhang et al., **Phys. Rev. B** 98, 115121(2018)
- [8] Y. Zhang et al., **Phys. Rev. B** 97, 55155(2018)
- [9] Q. Y. Chen et al., **Phys. Rev. B** 96, 045107(2017)

致谢：感谢国家自然科学基金 (No.11874330), 国家重点研发计划及核挑战计划 (TZ2016004) 对本项目的支持。

脉冲激光沉积法制备铜氧化物界面高温超导的一些实验进展

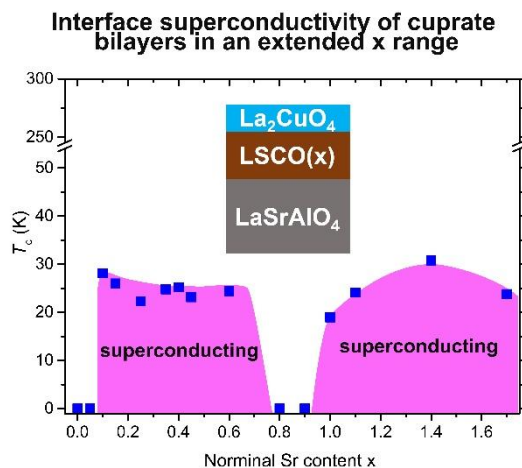
谢燕武

浙江省杭州市浙江大学物理学系 310008

ywxie@zju.edu.cn

关键词：铜氧化物，界面，超导，脉冲激光沉积，高温超导

摘要：The effect of interface on superconductivity has received much attention. It has been demonstrated that superconductivity can occur at the interface of two non-superconducting materials, and the critical temperature can even be significantly enhanced compared with the corresponding single-phase materials[1]. Here, we will present our recent efforts in exploring superconductivity at interfaces of copper oxides. We prepared all our samples by pulsed laser deposition (PLD). Taking La_2CuO_4 - $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ bilayer as an example, we extensively explore this interface by spanning x from 0.00 to above 1.00, in which the $x > 0.47$ range has never been explored in previous studies. High- T_c interface superconductivity was observed in a wide range of Sr doping levels up to $x > 1.00$. Our result demonstrates that the interface superconductivity in cuprates is quite robust and general (see the Figure below). Since PLD is versatile in growing a large number of materials with reasonable quality, our result suggests an opportunity to combine more materials using PLD and thus to search for superconductivity in new interfaces.



[1] Gozar *et al.*, High-temperature interface superconductivity between metallic and insulating copper oxides, *Nature* **455**, 782-785 (2008).

中国人民大学冷中子非弹性散射谱仪的研制与运行

程鹏¹、张红霞¹、汪晋辰¹、徐大业¹、刘娟娟¹、罗伟¹、鲍威^{1,2}

中国人民大学物理系，北京 100872

摘要：中子散射是研究物质结构和磁性的重要手段，在许多学科前沿重大科学问题的研究中起着关键性作用。和国外相比，我国中子散射谱仪的研制和运行还有很大的发展空间。由中国人民大学承担的国家重大科研仪器设备研制专项“冷中子非弹性散射谱仪的研制”基于中国原子能科学研究院的中国先进研究堆（CARR），研制具有国际先进水平的两台中子散射谱仪：冷中子三轴极化谱仪“行知”和冷中子广谱谱仪“博雅”。该项目于2013年开始实施，于2019年上半年顺利通过了基金委组织的各项验收。

其中，“行知”谱仪最佳能量分辨率优于0.05meV，中子极化效率在90%以上。“博雅”谱仪通过罗兰聚焦的方式，连续对120°角度范围内多个终端能量进行分析，数据采集效率比普通三轴谱仪提高两个数量级。两台谱仪配备有50mK和300mK极低温，9T至12T强磁场，2GPa高压包等极端样品环境。我们利用CARR开堆时间，和中科院物理所、南方科技大学等单位合作，已在铁基超导、量子磁性等领域开展研究工作，部分科研成果已在arXiv上贴出并投稿[1]。

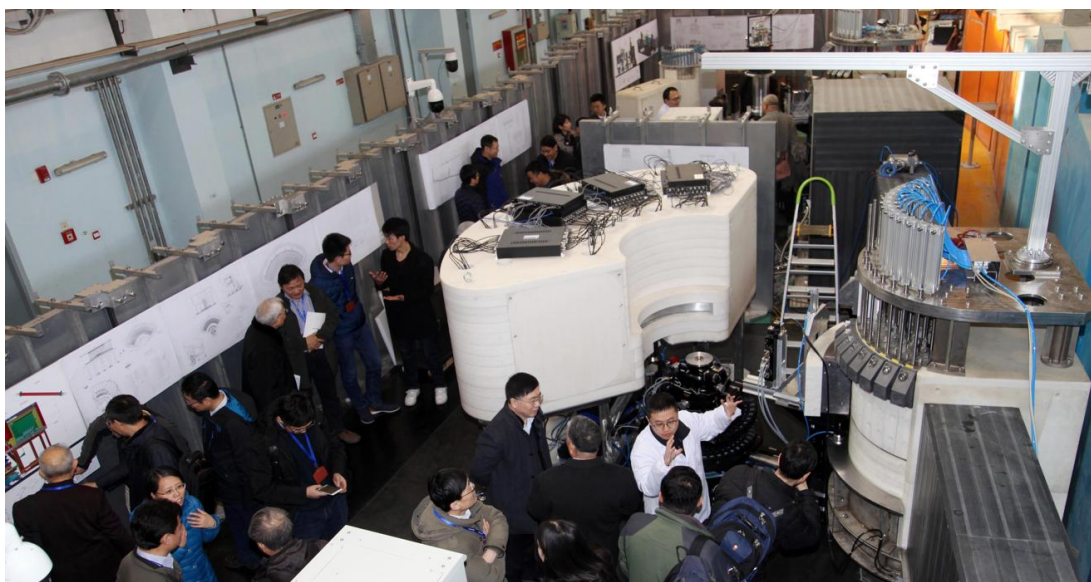


图1 2019年上半年，专家组多次对“行知”、“博雅”谱仪进行现场考察和验收

关键词：中子散射 谱仪研制和运行

参考文献：

- [1] S. Li et al., The effect of non-superconducting dopants (Mn, V, Cr and Cu) on the nematic fluctuations in iron-based superconductors, ArXiv:1905.03941 (2019).

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11227906)

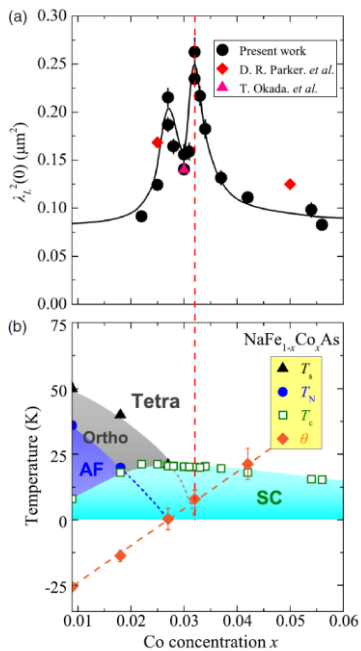
I21

专题代号：I

NaFe_{1-x}Co_xAs 中观察到由向列序量子涨落导致的电子有效质量增大

王春光、杨杰、周睿、郑国庆

摘要：在铜基和铁基两类高温超导体中，超导伴随着其他的有序态比如反铁磁态和电子向列序等。研究这些有序态与超导的关系是凝聚态物理中的重要课题。在过去，反铁磁态被大量广泛地研究，人们普遍认为反铁磁量子临界点及其涨落与高温超导体有密切的关系。在铁基超导体中，除了反铁磁态，还存在一个电子向列序，近年来逐渐受到人们的关注。尽管有研究发现在铁基超导体的正常态普遍存在向列序的临界涨落，铁基超导态下面是否真正隐藏着向列序的量子临界点还存在很大的争议。铁基超导体的反铁磁和向列序的转变温度通常十分接近，导致它们外推的量子临界点不可区分，这阻碍了人们对向列序量子临界点的研究。NaFe_{1-x}Co_xAs 是一个独特的体系，该体系不仅十分干净而且向列序转变温度 T_s 和反铁磁转变温度 T_N 随掺杂一直很好地区分开来，适合研究上述提到的问题。



在这个报告中，我们将介绍利用核磁共振手法对 NaFe_{1-x}Co_xAs 体系进行的系统测量。过 ²³Na 原子核的核磁共振谱在超导态下的展宽，我们获得了零温穿透深度的平方随掺杂的演化，发现了两个非常尖锐的峰。其中一个出现在 $x=0.027$ ，通过 ⁷⁵As 自旋-晶格弛豫率的测量，我们确认这是一个反铁磁量子临界点。另外一个更高的峰出现在 $x=0.032$ 的位置。这个位置刚好是电子向列序消失的位置，并且该样品的电阻随温度的变化出现了线性行为。这些结果表明超导拱形区域下存在一个向列序的量子临界点，该临界点的量子涨落导致其附近电子的有效质量增大。我们的结果首次提供了超导态下存在向列序量子临界点的确凿证据，为理解高温超导机理提供了新的线索【1】。这项工作是与中科院物理所的邢令义、代光阳、望贤成、靳常青等人合作完成的。

图 1：(a) 零温穿透深度的平方随掺杂的变化。(b) NaFe_{1-x}Co_xAs 体系的相图。 θ 是由核磁共振得到的表征距离反铁磁量子临界点距离的参量。

关键词：铁基超导体 NaFe_{1-x}Co_xAs 向列序 量子临界点 穿透深度 核磁共振

【1】 C. G. Wang *et al*, Electron Mass Enhancement near a Nematic Quantum Critical Point in NaFe_{1-x}Co_xAs. *Phys. Rev. Lett.* **121**, 167004 (2018).

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11634015) 科技部 (NO. 2017YFA0302904, 2016YFA0300502) 中科院先导

B 专项 (XDB07000000)

122

Phase dynamics of topological Josephson junctions with Majorana zero modes

Topological Josephson junctions are distinct from conventional ones in that they host Majorana bound states which form a two-level quantum system, the so-called Majorana qubit. The energies of the two levels are depending on the Josephson phase shift across the junction, while reversely the effective potential for the phase shift is controlled by the quantum state of the Majorana qubit. We build a quantum RSJ model to describe the correlation between the

Majorana qubit and the classical phase shift. Within this model, we systematically study the properties of the topological junctions, including the I-V characteristics, the Josephson radiation, and the Shapiro steps. We also demonstrate how to use injected current to control the phase shift in the junction and build quantum gates for the Majorana qubit.

I23

专题代号：I

2M-WS₂ 中的 Majorana 束缚态

袁永浩^{1,2,†}、潘杰^{3,†}、王心童^{1,2}、方裕强^{3,4}、宋灿立^{1,2}、王立莉^{1,2}、何珂^{1,2}、马旭村^{1,2}、张海军⁵、黄富强^{3,4*}、李渭^{1,2*}、薛其坤^{1,2*}

¹ 低维量子物理国家重点实验室，清华大学物理系，北京 100084

² 量子物质科学协同创新中心，北京 100084

³ 高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室，中国科学院上海硅酸盐研究所，上海 200050

⁴ 稀土材料化学及应用国家重点实验室，北京大学化学与分子工程学院，北京 100871

⁵ 固体微结构物理国家重点实验室，南京大学，南京 210093

Email: yuanyh15@mails.tsinghua.edu.cn; huangfq@mail.sic.ac.cn; weili83@tsinghua.edu.cn; qkxue@mail.tsinghua.edu.cn

摘要：Majorana 束缚态是近年来凝聚态物理研究的热点。它不仅在基础物理领域有着重要意义，而且还是实现拓扑量子计算的基础。近期，科学家们制备了一种新型的过渡金属二硫族化合物—2M 相的 WS₂，它具有二硫族化合物中最高的超导转变温度（8.8 K），也被预言具有拓扑非平庸的电子结构。利用极低温扫描隧道显微镜技术，我们在 2M-WS₂ 的磁通内同时观测到 Majorana 束缚态和传统的 Caroli-de Gennes-Matricon 束缚态。这两种束缚态的表现是不同的，其中 Majorana 束缚态始终位于零能，不会因空间位置的改变而在能量上发生劈裂，而 Caroli-de Gennes-Matricon 束缚态则会发生劈裂。此外，2M-WS₂ 中的 Majorana 束缚态还呈现出空间各向异性，这可能是由超导序参量和费米速度的各向异性共同导致的。与其他存在 Majorana 束缚态的体系相比，2M-WS₂ 的优势在于它是一种不需要引入金属原子插层或元素掺杂的本征材料，而且超导转变温度相对较高。不仅如此，它还具有十分易于解理的层状结构，可以与其他过渡金属二硫族化合物重新组合成异质结构，2M-WS₂ 的发现也为新型二维异质结构的制备提供了更多可能性。

关键词：Majorana 束缚态 2M-WS₂ 过渡金属二硫族化合物

参考文献

【1】 Y. H. Yuan *et al.*, Evidence of anisotropic Majorana bound states in 2M-WS₂, *Nat. Phys.* 2019.

专题代号：I

常压下 BCS 超导体的 T_c 是否可以突破液氮温区？

高淼¹、闫循旺²、卢仲毅³、向涛^{4,5}

¹ 宁波大学物理科学与技术学院, 宁波 315211

² 曲阜师范大学物理工程学院, 曲阜 273165

³ 中国人民大学物理系, 北京 100872

⁴ 中国科学院物理研究所, 北京 100190

⁵ 中国科学院大学物理学院

Email: gaomiao@nbu.edu.cn

受益于高频率的声子和强电声耦合, 在超高压下富氢化合物 H_3S 、 LaH_{10} 的超导 T_c 已超过 200 K。然而, 目前常压下 BCS 超导体的 T_c 仍远低于液氮温度。从物理上来说, 金属性的 σ 能带电子和声子的耦合是非常强的, 可以使电子发生配对进入一个高 T_c 的超导态。这正是 MgB_2 39 K 超导电性背后的物理原因。2002 年, 仿照 MgB_2 的电子结构特点, W. E. Pickett 课题组提出将半导体 LiBC 中的一部分 Li 移除形成 Li_xBC , 并预测 $Li_{0.5}BC$ 的 T_c 可以达到 100 K [1]。然而, Li 的部分缺失使 BC 层发生了剧烈的结构扭曲, Li_xBC 价带顶的 σ 能带并没有实质性地金属化 [2]。后续人们提出用 B 替换部分 C, 形成 $LiB_{1+x}C_{1-x}$ 结构 [3-5], 其中某些特定组分的 T_c 可以超过麦克米兰极限, 但目前这些理论尚未得到实验的证实。本文中, 我们在保证 Li 和 BC 层均完整的情况下, 从体相 LiBC 中直接抽取出一个三层结构, 通过密度泛函理论第一性原理计算和瓦尼尔插值技术, 详细研究了该三层结构的电声耦合。在求解各项异性的 Eliashberg 方程后, 我们发现该三层结构的 T_c 大于 80 K, 突破了液氮温区。进一步研究表明, 双轴张应力可以有效地将其 T_c 提高至 120 K 左右。

关键词：LiBC 电声耦合 第一性原理计算 瓦尼尔插值 各项异性 Eliashberg 理论

参考文献

- [1] H. Rosner, A. Kitaigorodsky, and W. E. Pickett, Prediction of High T_c Superconductivity in Hole-Doped LiBC, *Phys. Rev. Lett.* 2002, 88(12), 127001.
- [2] A. M. Fogg, J. Meldrum, G. R. Darling, J. B. Claridge, and M. J. Rosseinsky, Chemical Control of Electronic Structure and Superconductivity in Layered Borides and Borocarbides: Understanding the Absence of Superconductivity in Li_xBC , *J. Am. Chem. Soc.* 2006, 128(31), 10043.
- [3] R. Miao et al., First-principles study of superconductivity in the hole self-doped $LiB_{1.1}C_{0.9}$, *J. Appl. Phys.* 2013, 113(13), 133910.
- [4] M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, Prediction of phonon-mediated high-temperature superconductivity in $Li_3B_4C_2$, *Phys. Rev. B* 2015, 91(4), 045132.
- [5] T. Bazhiron, Y. Sakai, S. Saito, and M. L. Cohen, Electron-phonon coupling and superconductivity in Li-intercalated layered borocarbide compounds, *Phys. Rev. B* 2014, 89(4), 045136.

基金项目：国家重点研发计划 (NO. 2017YFA0302900), 国家自然科学基金项目 (NO. 11774422), 浙江省自然科学基金 (NO. LY17A040005)

Fluctuating spin glass droplets immersed in a sea of quantum spin liquid on a triangular lattice

Shiyan Li

Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200438

Email: shiyan_li@fudan.edu.cn

摘要 : The search for quantum spin liquid (QSL), an exotic quantum magnetic state with strongly fluctuating and entangled spins down to zero temperature, is a main theme in current condensed matter physics. However, there is no smoking-gun evidence for deconfined spinons in any QSL candidate so far. The disorders and additional exchange interactions may prevent the formation of an ideal gapless QSL state on frustrated spin lattices. Here we report systematic measurements of the ultra-low-temperature specific heat, thermal conductivity, muon spin relaxation (μ SR), and nuclear magnetic resonant (NMR) for NaYbSe₂ single crystals, in which Yb³⁺ ions with effective spin-1/2 form a perfect triangular lattice. The magnetic specific heat shows a power law temperature dependence at low temperature, while no magnetic thermal conductivity is observed. Both μ SR and NMR measurements find freezing and dynamic spins in NaYbSe₂. We propose a scenario of fluctuating spin glass droplets immersed in a sea of quantum spin liquid on Yb³⁺ triangular lattice. This case may be quite common on the way pursuing an ideal QSL, and provides a platform to study the transition between spin glass and QSL.

关键词 : quantum spin liquid

资助项目 : 国家重点研发计划 (2016YFA0300503)

Effective Staggered Field and Double Quantum Critical Points in an Ising-like Spin-chain Antiferromagnet in a Transverse Magnetic Field

于伟强

中国人民大学

The one-dimensional (1D) transverse-field Ising model (TFIM) is a prototype for the study of quantum criticality. Recently, this model has gained renewed interests, because of novel observations close to the

quantum critical point (QCP) in real materials, such as E8 symmetries, spinon deconfinement, and topological excitations.

Here we report that the quantum criticality of the TFIM can also be accessed in a spin-chain antiferromagnet $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$, with the interplay of local lattice structures. The vertical O-Co-O bond deviates from the c-axis with a four-site period, which leads to an effective two-site staggered transverse field along the chain. The staggered field and the interchain frustration strongly suppresses the magnetic ordering, and leads to two quantum critical points at very low fields. Our scaling analysis reveals that these two QCPs belong to the 1D and 3D universality class of the TFIM, respectively, with the 1D type exposed outside of the 3D ordering. Gapless excitations are also observed at both QCPs. This work opens an avenue for the study of the quantum criticality of the 1D TFIM in the zero-temperature limit, observed for the first time experimentally.

I27

I 强关联与超导物理

新型低维量子磁性材料的制备、单晶生长和性能研究

Experimental Realization of Low Dimensional Quantum Magnets

Hongcheng Lu (卢 红成)^{1,2,*}, Hiroshi Kageyama (阴山 洋)^{2,*}

1 School of Chemistry and Chemical Engineering, Huazhong University of Science and Technology,

Wuhan, China 430074;

2 Department of Energy and Hydrocarbon Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan 615-8150

* Email: hcl@hust.edu.cn

Keywords: Quantum Magnetism; Low Dimensional Magnet; Magnetic Lattice

Low dimensional quantum magnets have been extensively investigated recently because of their novel intriguing quantum phenomena such as spin liquid and spin-charge separation,^[1] and their relation to high temperature superconductivity.^[2] However, experimental realization of such low dimensional quantum magnets is difficult, in particular experimentally realizing the specific magnetic lattices and models such as one dimensional (1D) diamond chain lattice and two dimensional (2D) triangular lattice and Kagomé lattice, which have been theoretically predicted and investigated. Thus, discovery of experimental magnetic lattices is crucial to test theoretical predictions or to explore novel exotic phenomena. In this talk, experimental realization and magnetic properties of several new low dimensional quantum antiferromagnets with specific magnetic lattices will be introduced, including the nearly-ideal 1D spin $S = 5/2$ chain antiferromagnet $(4,4'$ -bipyridyl) FeF_3 with best 1D magnetism,^[3] the first mixed-spin diamond chain system $\text{Cu}_2\text{FePO}_4\text{F}_4(\text{H}_2\text{O})_4$ with non-collinear magnetic structure and successive phase transitions,^[4] the first cube tile system $\text{CsFe}_3(\text{SeO}_3)_2\text{F}_6$ with a 1/3 magnetization plateau,^[5] and 1/6th bond depleted triangular magnetic lattice $\text{PbFePO}_4\text{F}_2$ with spin frustration.^[6]

References

- [1] L. Balents, *Nature* **2010**, 464, 199-208.
- [2] D. Wang, L. Kong, P. Fan, H. Chen, S. Zhu, W. Liu, L. Cao, Y. Sun, S. Du, J. Schneeloch, R. Zhong, G. Gu, L. Fu, H. Ding, H. Gao, *Science* **2018**, 362, 333-335.
- [3] H. Lu, T. Yamamoto, W. Yoshimune, N. Hayashi, Y. Kobayashi, Y. Ajiro, H. Kageyama, *J. Am. Soc. Chem.* **2015**, 137, 9804-9807.
- [4] H. Lu, N. Hayashi, Y. Matsumoto, H. Takatsu, H. Kageyama, *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 9353-9360.
- [5] H. Lu, H. Kageyama, *Inorg. Chem.* **2018**, 57, 6186-6190.
- [6] H. Lu, Kageyama, *Dalton Trans.* **2018**, 47, 15303.

Projects "CREST" and "JP16H06439" from MEXT in Japan.

I28

专题代号：I

Na₂Co₂TeO₆ 各向异性磁性的研究

姚伟良、李源

北京大学，北京 100871

Email: yuan.li@pku.edu.cn

摘要：

基于 d^7 电子构型的材料近期被理论工作者视为在真实材料中寻找 Kitaev 物理的新方向，其中， $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ 被当作是 Kitaev 模型可能适用的材料之一。在 $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ 中，具有 d^7 电子构型的 Co^{2+} 离子形成完美的二维六角格子，在晶体场和自旋轨道耦合的作用下，它低温下的磁学性质可以投影到有效自旋 $1/2$ 的模型中。虽然该材料的多晶样品在多年以前就已经被成功制备，但是单晶生长的方法近期才被报道，而它在磁场下的磁学性质还未被充分地研究和理解。

我们利用改良的助熔剂方法生长出了高质量的 $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ 单晶样品，通过磁化率和比热的测量，我们对 $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ 在磁场下的磁学性质做了详尽的研究。我们发现， $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ 的磁学性质表现出明显的各向异性，并具有丰富的相图。长程磁有序能够被平行于六角面的磁场有效地压制，但它基本不受垂直于六角面的磁场的影响。通过细致的磁化率测量，我们还发现材料表现出微弱的亚铁磁行为以及一定的自旋倾斜。这说明，为了全面地解释 $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ 在磁场下的行为，原本锯齿形的反铁磁基态需要做一定的修正。我们的结果将会给进一步理解 Kitaev 模型在 $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ 中的适用性以一定的启发。

关键词：Kitaev 模型 量子磁性

参考文献

- [1] H. Liu *et al.*, Pseudospin exchange interactions in d^7 cobalt compounds: Possible realization of the Kitaev model, *Phys. Rev. B* **2018**, 97, 014407.
- [2] R. Sano *et al.*, Kitaev-Heisenberg Hamiltonian for high-spin d^7 Mott insulators, *Phys. Rev. B* **2018**, 97, 014408.

- [3] L. Viciu *et al.*, Structure and basic magnetic properties of the honeycomb lattice compounds $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ and $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$, *J. Solid State Chem.* 2007, 180, 1060.
- [4] E. Lefrancois *et al.*, Magnetic properties of the honeycomb oxide $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$, *Phys. Rev. B* 2016, 94, 214426.
- [5] A. K. Bera *et al.*, Zigzag antiferromagnetic ground state with anisotropic correlation lengths in the quasi-two-dimensional honeycomb lattice compound $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$, *Phys. Rev. B* 2017, 95, 094424.
- [6] G. Xiao *et al.*, Crystal Growth and the Magnetic Properties of $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ with Quasi-Two-Dimensional Honeycomb Lattice, *Cryst. Growth Des.* 2019, 19, 2658.

I29

专题代号：I

三角晶格自旋 1/2 海森堡反铁磁模型自旋波谱旋子极小点的起源

张纯、李涛

中国人民大学物理系，北京 100872

Email: yshijing1@ruc.edu.cn

摘要：三角晶格自旋 1/2 海森堡反铁磁 (TLHAF) 模型是典型的阻挫量子磁性模型。近期对 TLHAF 模型材料 $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ 进行的非弹性中子散射测量发现，与线性自旋波理论 (LSWT) 的预言相比，体系的自旋波谱在布里渊区边界上的 M 点附近存在显著的向下重整化，从而形成旋子极小点。同时，实验发现在 M 点附近的高能激发谱中存在大量弥散的自旋涨落谱权重。前人的理论工作表明，由于 TLHAF 基态 120 度磁性有序结构的非共线特征，其自旋波可以发生自发衰变。微扰计算发现，这一自旋波衰变机制导致的自旋波自能修正在布里渊区边界发散。因此在传统的线性自旋波理论基础上的微扰修正不能给出 M 点附近自旋动力学谱的可靠信息。在本工作中，我们通过引入共振价键 (RVB) 结构，探索 TLHAF 磁性激发谱中上述反常特性是否可以在自旋分数化激发图像下给出合理的解释。为此，我们在费米共振价键理论的框架下，利用 RPA 近似计算了三角晶格上一个同时具有 120 度经典磁性有序和 π -flux 共振价键结构的模型体系的自旋涨落谱。我们发现，在 π -flux 背景下，由自旋子 (spinon) 激发所形成的自旋连续谱的下沿将在 M 点附近形成一个类似 Dirac 锥的极小。由此，我们论证 M 点附近的旋子极小点可以通过自旋波与自旋子激发连续谱的能级排斥效应加以理解。这一图像同时定性解释了 M 点附近观测到的高能自旋涨落谱权重。

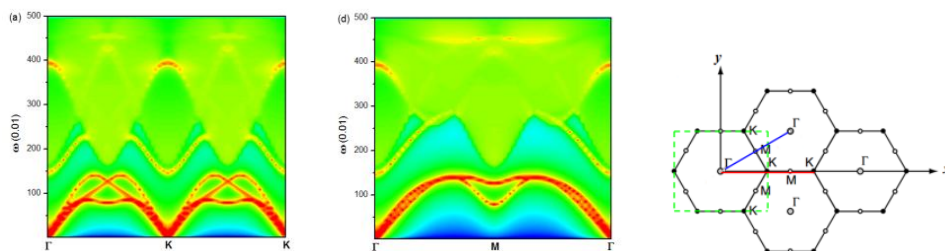


图 1 体系自旋涨落谱 ($U=9.5$) 分别沿着 Γ -K-K' 与 Γ -M- Γ 方向，右图是晶格布里渊区

关键词：spin-1/2 TLHAF, 旋子极小点, LSWT, RVB, RPA

参考文献

- [1] B. Dalla Piazza *et al.*, Fractional excitations in the square-lattice quantum antiferromagnet, *Nat. Phys.* **11**, 62-68 (2015)

- 【2】 Chang-Ming Ho *et al.*, Nature of Spin Excitation in Two-dimensional Mott Insulators: Undoped Cuprates and Other Materials, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1626 (2001)
- 【3】 Saya Ito *et al.*, Structure of the magnetic excitations in the spin-1/2 triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$, *Nat. Commun.* **8**, 235 (2017)

基金项目：国家自然科学基金项目 NSFC 11674391

I30

专题代号：I

掺杂的等效 $S=1$ 反铁磁海森堡体系中的超导态

侯杰¹、李定国²、娄捷¹、陈焱¹

¹ 复旦大学物理学系及表面物理国家重点实验室，上海 200433

² 台湾中研院物理所，台北 11529

Email: yanchen99@fudan.edu.cn

摘要：对局域磁矩构成的莫特绝缘体进行掺杂被认为是产生非传统超导电性的一种重要方式。过去的研究主要集中在掺杂的自旋 $1/2$ 系统上，我们系统地研究了掺杂的等效自旋 1 系统中的新奇的超导态。首先，我们提出了一个掺杂的自旋 $1/2$ 的两腿对角梯子模型来模拟一个掺杂的自旋为 1 的一维反铁磁海森堡模型。通过使用密度矩阵重整化群方法，我们发现此系统具有有限的自旋能隙和边缘态，有两重简并的纠缠谱，符合 Haldane 相的性质。数值结果表明带有幂律衰减的关联函数的配对通道属于自旋单态配对，配对对称性是 d_{xy} 波。同时我们应用重整化平均场方法，把排除双占据的限制用 Gutzwiller 重整化因子来代替，同样得到了 d_{xy} 波配对的超导态。我们在 RVB 框架下提供了掺杂的自旋 1 的链中配对对称性的起源的物理理解。另外，我们构造了一个四腿的掺杂的自旋 $1/2$ 模型来模拟一个掺杂的自旋为 1 的反铁磁海森堡梯子模型。应用简单版本的重整化平均场方法，我们得到了三个能量简并的超导态。通过改进后的重整化因子，我们发现其中一个态的能量最低，可以看成是层间 $d_{y^2-z^2}$ 波配对。密度矩阵重整化群方法得到了相同的超导配对对称性。这些结果说明了 Gutzwiller-RVB 方法的普适性。

关键词：自旋 1 ；掺杂的莫特绝缘体；非传统超导

参考文献

【1】 J. Hou, T.-K. Lee, J. Lou, and Y. Chen, *Phys. Rev. B* **99**, 094510 (2019)

【2】 J. Hou, T.-K. Lee, J. Lou, and Y. Chen, to be published.

基金项目：

国家重点研发计划 (No. 2017YFA0304204 和 No. 2016YFA0300504).

国家自然科学基金 (No. 11625416 和 No. 11474064).

Observation of spin glass state in heavily hole-doped iron-pnictide superconductors

吴涛

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026

Email: wutao@ustc.edu.cn

摘要：In this talk, I will introduce our recent progress on heavily hole-doped iron-pnictides superconductors. Although nematic fluctuations have been widely observed in heavily hole-doped regime of 122 family, there is no direct experimental evidence for magnetic order. Assuming a $3d^5$ Mott insulating phase and a similar phase diagram as cuprates, magnetic order or spin glass would be expected in the heavily hole-doped regime. Here, we will present the first experimental evidence for spin glass state in heavily hole-doped iron-pnictide superconductors. Our results reveal a new interesting region in the phase diagram and would stimulate new thinking on iron-pnictide superconductors.

关键词：铁基超导;自旋玻璃

在八角石墨烯中实现高温超导体

姚道新

中山大学物理学院, 广州 510275

Email: yaodaos@mail.sysu.edu.cn

摘要：我们提出在二维八角正方晶格上有可能实现新的高温超导电性，有望在八角石墨烯（octagraphene）中实现。通过对该格点系统的紧束缚模型分析，该结构在半填充情况下具有空穴口袋和电子口袋的完美嵌套，母体具有奈尔型反铁磁长程序，通过掺杂，系统能够进入自旋涨落占主导地位的非常规超导相区，具有极高的超导转变温度，超导配对的对称性为 S_{\pm} 波。为了跟实际材料比较，我们提出可以在八角石墨烯上实现该高温超导电性。第一性原理计算表明碳原子的 sp^2 杂化可以形成稳定的平面四八结构（octagraphene）， π 电子在该结构上运动。为了跟实际材料比较，我们采用跟第一性原理结果相一致的近邻电子跃迁动能参数 t_1 , t_2 进行分析。同时为了考虑电子间的库伦排斥相互作用，我们采取了强、中、弱三种电子关联强度（Hubbard U ），分别通过隶玻色子平均场（SBMF）、变分蒙特

卡罗 (VMC)、无规相近似 (RPA) 三种方法进行计算, 结果均表明系统可能具有~50meV 甚至更高的超导能隙, 具有很高的超导转变温度, 为实现无高压条件下的室温超导体提供了思路。

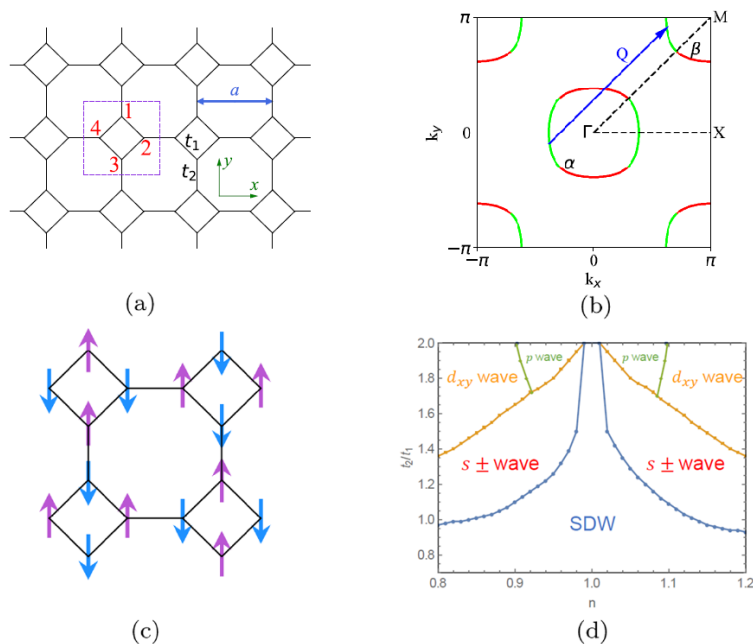


图 1 (a) 二维八角正方晶格 (b) 费米面的完美嵌套 (c) 反铁磁母体结构 (d) 高温超导相图

关键词：高温超导体 八角石墨烯 费米面的完美嵌套 反铁磁母体 二维材料

参考文献 (中文小五号宋体, 其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- [1] Yao-Tai Kang, Chen Lu, Fan Yang, Dao-Xin Yao, Single-orbital realization of high-temperature $s \pm$ superconductivity in the square-octagon lattice, *Phys. Rev. B* 2019, 99, 184506.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11574404, 11674025, 11334012, 1127404) 等

I33

专题代号：I

Correlation Effects in Quadrupole Insulators: A Quantum Monte Carlo Study

Chen Peng, Rong-Qiang He, and Zhong-Yi Lu

Department of Physics, Renmin University of China, Beijing 100872, China

Email: rqhe@ruc.edu.cn

Abstract: The quadrupole insulator, a high-order topological insulator, with on-site Hubbard interaction is numerically studied by large-scale projector quantum Monte Carlo (PQMC) simulations. The Green's function formalism is successfully used to characterize topological properties in interacting quadrupole insulators for the first time. We find that the topological quadrupole insulator is stable against weak interactions and turns into a trivial antiferromagnetic (AFM) insulator by a continuous topological phase transition (TPT) for strong interactions. The critical exponents related to the TPT are estimated to be $\nu=0.67(4)$, $\beta=0.40(2)$, which are distinct from those of the known AFM transitions and suggest a new universality

class.

[1] Chen Peng, Rong-Qiang He, Zhong-Yi Lu, arXiv: 1905.13222 (2019).

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11874421, NO. 11774422) 等

I34

专题代号：I

Determinant quantum Monte Carlo study of exhaustion in the periodic Anderson model

Lufeng Zhang, Tianxing Ma, Natanael C. Costa, Raimundo R. dos Santos, and Richard T.

Scalettar

北京师范大学物理学系, 北京 100875

Email: txma@bnu.edu.cn

摘要：The Kondo and periodic Anderson models describe many of the qualitative features of local moments coupled to a conduction band, and thereby the physics of materials such as the heavy fermions. In particular, when the exchange coupling J or hybridization V between the moments and the electrons of the metallic band is large, singlets form, quenching the magnetism. In the opposite, small J or V , limit, the moments survive and the conduction electrons mediate an effective interaction which can trigger long-range, often antiferromagnetic order. In the case of the Kondo model, where the moments are described by local spins, Nozières considered the possibility that the available conduction electrons within the Kondo temperature of the Fermi surface would be insufficient in number to accomplish the screening. Much effort in the literature has been devoted to the study of the temperature scales in the resulting “exhaustion” problem and how the “coherence temperature” where a heavy Fermi liquid forms is related to the Kondo temperature. In this paper, we study a version of the periodic Anderson model in which some of the conduction electrons are removed in a way which avoids the fermion sign problem and hence allows low-temperature quantum Monte Carlo simulations which can access both singlet formation and magnetic ordering temperature scales. We are then able to focus on a somewhat different aspect of exhaustion physics than previously considered: the effect of dilution on the critical V for the singlet-antiferromagnetic transition.

关键词：Kondo effect, Heavy-fermion systems, Quantum Monte Carlo

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11774033) 等

单空穴波函数：二维掺杂 Mott 绝缘体的研究

陈帅¹、王晴睿²、戚扬³、D. N. Sheng⁴和翁征宇¹

¹清华大学高等研究院，北京 100084，中国

²香港中文大学物理学院，沙田，香港，中国

³复旦大学物理学院，上海 200433，中国

⁴加州州立大学北岭分校物理与天文学院，加州 91330，美国

Email: s-chen16@mails.tsinghua.edu.cn

摘要：我们利用变分蒙特卡洛方法研究了单空穴掺杂 t - J 模型的基态变分波函数。这个波函数具有新奇的量子数，比如角动量。角动量由隐藏的自旋流生成，导致基态简并。这个与严格对角化和密度矩阵重整化群方法得到的结果吻合。进一步，我们发现波函数具有二分量结构，分别对应准粒子动量和不相干动量，这由密度矩阵重整化群在 8×8 大小格子计算结果证实。这样的二分量结构表明朗道的准绝热一对一原理失效。特别地，在热力学极限下，准粒子谱权重变为零。作为比较，在没有相位弦的 $\sigma \cdot t - J$ 模型中，我们会得到布洛赫波函数，其具有有限大的准粒子谱权重，也和严格对角化和密度矩阵重整化群一致。这个研究证实，单空穴掺杂 Mott 绝缘体具有奇异的相位效应，这使得裸空穴转变成平移对称性破缺的非朗道型准粒子。单空穴的结论可以推广到有限掺杂，并且暗示非 BCS 的配对机制。

关键词：Mott 绝缘体，变分波函数，自旋流

参考文献（中文小五号宋体，其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字）

- 【1】 Shuai Chen *et al.*, Single-hole wave function in two dimensions: A case study of the doped Mott insulator, *Physical Review B*, 99(20), 205128.

基金项目：Natural Science Foundation of China (Grant No. 11534007)

MOST of China (Grants No. 2015CB921000 and No. 2017YFA0302902).

FeTe_{0.55}Se_{0.45} 上 Bi₂Te₃ 薄膜和 Bi 岛拓扑超导性质的研究

陈明扬、陈晓宇、杨欢、闻海虎

南京大学物理学院，南京 210093

Email: huanyang@nju.edu.cn, hhwen@nju.edu.cn

摘要：具有奇宇称序参量的拓扑超导是凝聚态物理中的热门话题。可能的拓扑超导体可以由掺杂拓扑绝缘体或者由近邻效应诱导拓扑绝缘体超导来实现。我们在铁基超导体 FeTe_{0.55}Se_{0.45} 上的一些磁通芯子内发现分立的 Caroli-de Gennes-Matricon 束缚态【1】，在另一些磁通芯子内发现了可能的 Majorana 零能模。进一步，我们在 FeTe_{0.55}Se_{0.45} 上

生长拓扑绝缘体 Bi_2Te_3 薄膜，成功诱导薄膜超导。利用扫描隧道显微镜在表面进行准粒子相干散射测量 (图 1a-c)，发现表面的超导能隙具有二度对称性，符合理论预测的拓扑超导体 Δ_{4y} 配对形式。进一步在薄膜上观测到拉长的磁通 (图 1d) 也映证了二度对称的超导能隙 [2]。我们还在 $\text{FeTe}_{0.55}\text{Se}_{0.45}$ 上生长出铋金属岛 (图 1e)，并且在一些 Bi 岛上发现了全岛存在的零能模 (图 1f,g)。我们认为在自旋-轨道耦合很强的 Bi 岛上诱导产生了拓扑超导，而这些零能模可能是拓扑超导的 Majorana 模。这可能提供了一种简易获得 Majorana 零能模的方式 [3]。

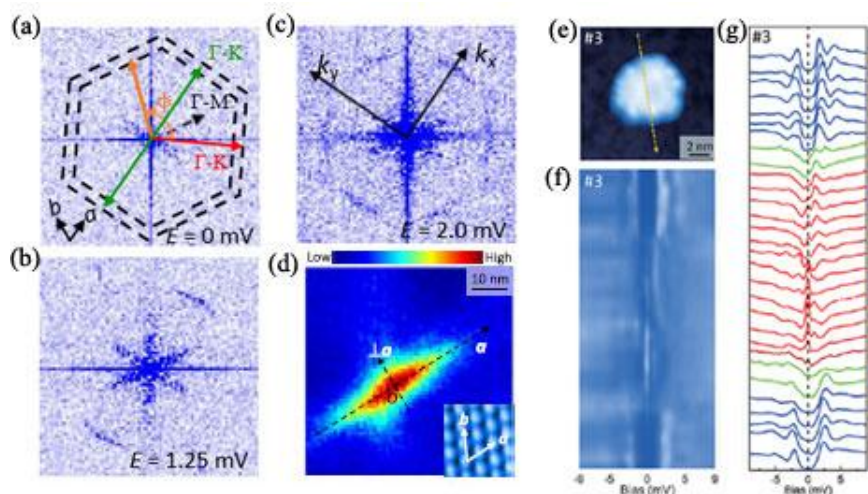


图 1 $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{FeTe}_{0.55}\text{Se}_{0.45}$ 异质结上二度对称的超导(a-d)和 $\text{FeTe}_{0.55}\text{Se}_{0.45}$ 上 Bi 岛(e)上发现的零能模(f,g)

关键词：拓扑超导，近邻效应，Majorana 零能模，扫描隧道显微镜

参考文献

- [1] M. Y. Chen *et al.*, Discrete energy levels of Caroli-de Gennes-Matricon states in quantum limit in $\text{FeTe}_{0.55}\text{Se}_{0.45}$, *Nat. Commun.* 2018, 9, 970.
- [2] M. Y. Chen *et al.*, Superconductivity with twofold symmetry in $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{FeTe}_{0.55}\text{Se}_{0.45}$ heterostructures, *Sci. Adv.* 2018, 4, eaat1084.
- [3] X. Y. Chen *et al.*, Zero-energy modes on superconducting bismuth islands deposited on $\text{Fe}(\text{Te},\text{Se})$, *arXiv:1905.05735*.

基金项目：国家重点研发项目 (2016YFA0300400)、国家自然科学基金项目 (NO. 11534005) 等

I38

专题代号：I

ZrSe₂ 和 ZrTe₂ 薄膜的 MBE 生长及 STM 研究

任明强、韩厦、宋灿立、马旭村、薛其坤

清华大学物理系，北京 100084

Email: mqren@mail.tsinghua.edu.cn

摘要：过渡金属硫族化合物 (TMDC) 通常是由范德瓦尔斯力结合沿着 c 方向堆叠形成的半导体层状材料

料。随着维度降低，材料中自旋、轨道、晶体对称性、能带结构等的相互作用使得 TMDC 薄膜材料

呈

现出很多新奇的电子态结构和物理特性，如界面增强的电荷密度波 (NbSe₂) 【1】、伊辛超导体 (MoS₂)

【2】、威尔拓扑半金属 (MoTe₂) 【3】以及狄拉克半金属 (ZrTe₂) 【4】等。

我们利用 MBE 生长技术分别制备了高质量的 ZrSe₂、ZrTe₂ 单层以及多层膜，并对其表面形貌和电子态结构进行了低温扫描隧道显微镜研究。首先两种材料都是间接带隙半导体，随着薄膜厚度的减小，界面电子掺杂逐渐增加，其费米能逐渐向导带移动。其次，ZrSe₂、ZrTe₂ 的表面都呈现 2×2 的短程电

荷密度调制，该电荷调制局域在表面点缺陷附近。此外，我们还观察到 ZrSe₂、ZrTe₂ 的费米能量附近都

打开一个低能能隙。这些研究结果对深入研究 ZrSe₂、ZrTe₂ 薄膜中电荷密度波及探索可能的超导电性具

有积极意义。

关键词：过渡金属硫族化合物，ZrSe₂，ZrTe₂，电荷密度波

【1】 X. Xi et al., Strongly enhanced charge-density-wave order in monolayer NbSe₂. *Nat. Nanotechnol.* 2015, 10, 765–769.

【2】 J. M. Lu et al., Evidence for two-dimensional Ising superconductivity in gated MoS₂. *Science.* 2015, 350, 1353-1357.

【3】 Z. Wang et al., MoTe₂: a type-II Weyl topological metal. *Phys. Rev. Lett.* 2016, 117, 056805.

【4】 P. Tsipas et al., Massless Dirac fermions in ZrTe₂ semimetal grown on InAs(111) by van der Waals epitaxy. *ACS Nano.* 2018, 12, 1696-1703.

M. Q. Ren, S. Han, C. L. Song, X. C. Ma, Q. K. Xue
Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084
Email: mqren@mail.tsinghua.edu.cn

Abstract : Transition-metal dichalcogenides (TMDC) usually are layered semi-conductors stacked via the weak van der Waals attraction between adjacent layers along c axis. With reduced dimensionality, the interplay between spin, orbital, symmetry and band structure brings out many novel electronic states and physical phenomena, including interface enhanced charge density wave (NbSe₂) [1], Ising superconductor (MoS₂) [2], Weyl topological semi-metal (MoTe₂) [3] and Dirac semi-metal (ZrTe₂) [4] etc.

Recently we have fabricated high-quality of ZrSe₂、ZrTe₂ monolayer and multi-layer films by using molecular beam epitaxy (MBE) growth method and investigated their electronic states and surface morphologies using scanning tunneling microscopy (STM). Firstly, both films are indirect bandgap semi-conductors and their fermi level moves to the conduction band with decreased film thickness and increased interface charge-transfer. Secondly, a short-range 2×2 charge density wave (CDW) modulation, which localized near the surface defects, is observed on both films. In addition, a low-energy gap opens near EF on both materials, consistent with the CDW formation. ZrSe₂ and ZrTe₂ thin films afford a good platform to study CDW and possible superconductivity.

Keywords : Transition-metal dichalcogenides, ZrSe₂, ZrTe₂, Charge density wave

[1] X. Xi et al., Strongly enhanced charge-density-wave order in monolayer NbSe₂. *Nat. Nanotechnol.* 2015, 10, 765–769.

[2] J. M. Lu et al., Evidence for two-dimensional Ising superconductivity in gated MoS₂. *Science.* 2015, 350, 1353-1357.

[3] Z. Wang et al., MoTe₂: a type-II Weyl topological metal. *Phys. Rev. Lett.* 2016, 117, 056805.

[4] P. Tsipas et al., Massless Dirac fermions in ZrTe₂ semimetal grown on InAs(111) by van der Waals epitaxy. *ACS Nano.* 2018, 12, 1696-1703.

专题代号：I

Distinct fingerprints of charge density waves and electronic standing waves in ZrTe_3

Li Yue^{1,*}, Shangjie Xue^{2,*}, Jiarui Li^{2,*}, Wen Hu³, Andi Barbour³, Feipeng Zheng⁴, Lichen Wang¹, Ji Feng^{1,5}, Stuart B. Wilkins³, Claudio Mazzoli³, Riccardo Comin², and Yuan Li^{1,5}

1. 北京大学物理学院, 北京 100871

2. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139, USA

3. Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973, USA

4. 暨南大学, 广州 510632

5. 量子物质科学协同创新中心, 北京 00871

Email: lilyue@pku.edu.cn

摘要： Experimental signatures of charge density waves (CDWs) in high-temperature superconductors have evoked much recent interest, yet an alternative interpretation has been theoretically raised based on electronic standing waves resulting from quasiparticles scattering off impurities or defects, also known as Friedel oscillations (FOs). Indeed the two phenomena are similar and related, posing a challenge to their experimental differentiation. Here we report a resonant X-ray diffraction study of ZrTe_3 , a model CDW material. Near the CDW transition temperature characterized by a pronounced resistivity anomaly, we observe two independent diffraction signatures that arise concomitantly, only to become clearly separated in momentum while developing very different correlation lengths in the well-ordered state that is reached at a distinctly lower temperature. Anomalously slow dynamics of mesoscopic charge domains are further found near the transition temperature, in spite of the expected strong thermal fluctuations. These observations demonstrate the presence of distinct experimental fingerprints of CDWs and FOs in a model compound, and reveal that a spatially-modulated CDW phase emerges out of a uniform electronic fluid via a process that is promoted by self-amplifying FOs.

参考文献

[1] Li Yue *et al.*, Distinct fingerprints of charge density waves and electronic standing waves in ZrTe_3 , *Arxiv*: 1905.06666.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11874069, No. 11888101) 等

专题代号：I

$\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ 中强赝自旋-晶格耦合：声子异常和负的热膨胀

胡立立、杨萌、吴艳玲、吴穹、赵惠、孙飞、王维、何睿、何绍龙、张红、黄荣进、

李来风、石友国、赵继民*

中国科学院物理研究所，北京 100190

Email: ylwu@iphy.ac.cn; jmzhao@iphy.ac.cn

摘要：Ruddlesden-Popper 钙钛矿铱氧化物体系($\text{Sr}_{n+1}\text{Ir}_n\text{O}_{3n+1}$, $n = 1, 2$, and ∞)与铜氧化物高温超导体具有相似的结构，且其为 5d 族过渡金属氧化物，具有非常强的自旋轨道耦合。这些物理性质引起了科学家们极大的兴趣对该材料超导性质进行探索，并研究其复杂的多自由度相互作用所引起的新奇物理效应和物理机制。我们采用超快光谱学方法对铱氧化物体系材料 $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ 的晶格动力学过程进行了深入的研究，产生和探测到了该材料 A_{1g} 模式的相干态光学支声子，如图一所示。在奈尔温度以下，首次发现了 PLC 诱导的声子异常（包括振幅、频率和寿命）和负的热膨胀效应。这些异常的物理现象直接由赝自旋与晶格强相互作用（PLC）所诱导，通过温度依赖的 X 射线衍射证实了这一结论，证实了在低温下 $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ 中 PLC 是最主要的相互作用，并且我们获得了赝自旋-晶格耦合系数为 $\lambda = 150 \pm 20 \text{ cm}^{-1}$ （迄今为止最强的耦合强度）。我们的研究清晰地揭示了 5d 过渡金属化合物中自旋轨道耦合的本质，以及铱氧化物体系和铜氧化物体系之间共有的奇异特性，为 $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ 中赝自旋-晶格耦合相互作用提供了清晰的基本物理图像，提出了一种在强关联体系甚至可能是超导体中调控磁性、晶格以及电子特性的新方法。

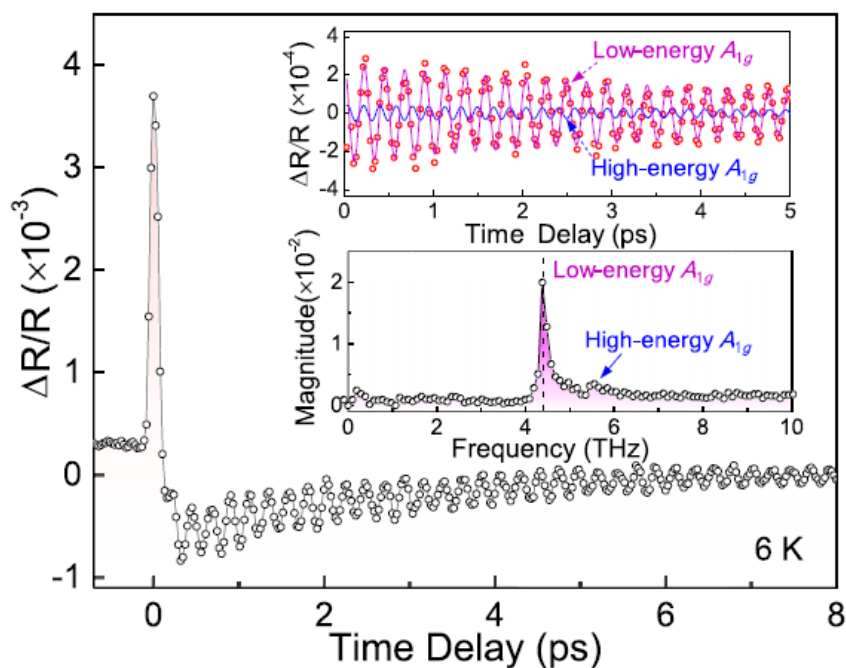


图 1 $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ 时间分辨超快动力学过程及相干态声子

关键词：相干态声子 赝自旋-晶格耦合

参考文献

- [1] L. L. Hu, M. Yang, Yanling Wu, *et al.*, Strong pseudospin-lattice coupling in $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$: Coherent phonon anomaly and negative thermal expansion, *Phys. Rev. B* 2019, 99, 094307.

基金项目：国家重点研发计划 (NO. 2017YFA0303603) 等

钛基超导母体材料 $\text{BaTi}_2\text{As}_2\text{O}$ 中结构相变起因问题的拉曼散射研究

任霄¹⁺, 李源^{2*}

¹郑州大学, 郑州市高新区科学大道 100 号, 郑州大学物理学院, 450001

²北京大学, 北京市海淀区成府路 209 号, 北京大学物理学院量子材料中心, 100871

Email: ^{2*}yuan.li@pku.edu.cn, ¹⁺rxphy@zzu.edu.cn

本实验用拉曼散射研究钛基超导母体 $\text{BaTi}_2\text{As}_2\text{O}$ 在 $T_s = 200$ K 处发生的由高温四方相到低温正交相的结构相变。研究表明 $\text{BaTi}_2\text{As}_2\text{O}$ 在进入正交相后存在两支能量接近的软模, 意味着该结构相变是由晶格驱动的。根据先前 LDA 计算出的 $\text{BaTi}_2\text{As}_2\text{O}$ 在 T_s 以下对称性由 $P4/mmm$ 变为了 $Pbam$ 这一结果[1], 结合声子对称性分析, 本实验推出, 参与 $\text{BaTi}_2\text{As}_2\text{O}$ 结构相变的序参量是一个二维表示。它们在低对称相中可约化为两个一维表示, 这和本拉曼实验中测到两个能量接近的软模这一结果一致。本实验的电子拉曼谱表明在正交相中存在很大能量尺度的电子信号, 该电子信号只在 T_s 以下产生, 被认为是电子对晶格畸变的响应。

关键词：钛基超导；结构相变；拉曼光谱散射；软模

参考文献：

[1] Nakano et al., Sci. Rep. 6, 29661 (2016).

Unveiling Electronic Correlation and the Ferromagnetic Superexchange Mechanism in the van der Waals Crystal CrSiTe_3

Jiaxin Zhang, Xiaochan Cai, Yanfeng Guo, Zhongkai Liu and Gang Li

School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University

Email: ligang@shanghaitech.edu.cn

摘要： The recent discovery of intrinsic ferromagnetic order in the atomically thin van der Waals crystal CrXTe_3 ($X = \text{Si}, \text{Ge}$) stimulates intensive studies on the nature of low-dimensional magnetism because the presence of long-range magnetic order in two-dimensional systems with continuous symmetry is strictly

prohibited by thermal fluctuations. By combining advanced many-body calculations with angle-resolved photoemission spectroscopy we investigate CrSiTe₃ single crystals and unveil the pivotal role played by the strong electronic correlations at both high- and low-temperature regimes. Above the Curie temperature (T_C), Coulomb repulsion (U) drives the system into a charge transfer insulating phase. In contrast, below T_C the crystal field arranges the Cr-3d orbitals such that the ferromagnetic superexchange profits, giving rise to the bulk ferromagnetic ground state with which the electronic correlations compete. The excellent agreement between theory and experiment establishes CrSiTe₃ as a prototype low-dimensional crystal with the cooperation and interplay of electronic correlation and ferromagnetism.

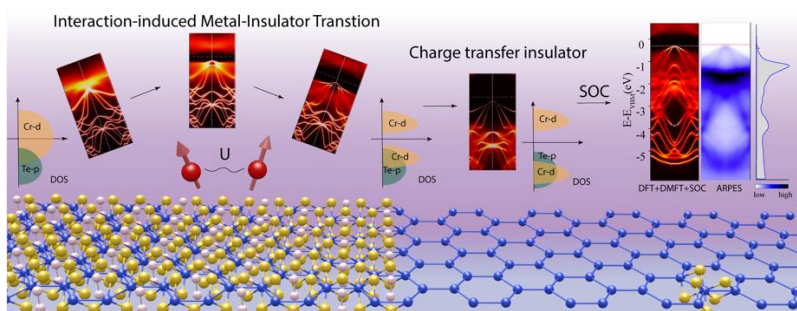


Figure 1. Interaction-induced Metal-Insulator Transition

【1】 Jiaxin Zhang, Xiaochan Cai *et al.*, Unveiling Electronic Correlation and the Ferromagnetic Superexchange Mechanism in the van der Waals Crystal CrSiTe₃, *Phys. Rev. Lett.* 123, 047203 (2019)

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11674229, NO. 11874263)

I43

专题代号：I

磁性拓扑绝缘体 MnBi₂Te₄ 单晶的高压调控研究

程金光

北京市海淀区中关村南三街 8 号 中国科学院物理研究所 100190

jgcheng@iphy.ac.cn

摘要：磁性拓扑绝缘体可以实现许多奇特的拓扑量子态，例如量子反常霍尔效应和轴子绝缘体态[1]。最近的理论和实验研究表明，MnBi₂Te₄是第一个本征的反铁磁拓扑绝缘体[2]，其层状晶体结构可以认为是由 MnTe 磁性层与 Bi₂Te₃ 拓扑绝缘体层沿着 c 轴堆垛而成的天然异质结构，很容易通过机械剥离方式获得少层样品。对于少层样品，人们已在较小磁场下观察到量子化的反常霍尔效应[3]，并实现了轴子绝缘体到 Chern 绝缘体的量子相变[4]。对于单晶样品，常压下降温会在 $T_N = 24$ K 形成 A 型反铁磁结构（层内铁磁-层间反铁磁），造成金属性电阻率在 T_N 处呈现小尖峰然后快速降低；当沿着 c 轴方向施加外磁场时会造成自旋重取向，分别在 $H_{c1} \sim 3.3$ T 和 $H_{c2} \sim 7.8$ T 转变为倾斜反铁磁和铁磁结构，造成磁电阻和霍尔电阻出现异常[5]。本报告中，我将汇报近期我们利用六面砧高压装置对

MnBi₂Te₄ 单晶进行高压调控研究取得的一些进展[6]。我们发现：随着压力增加， T_N 首先略微升高然后逐渐降低，大约在 7 GPa 时消失；同时，电阻率随压力逐渐升高，并伴随 T_N 的消失从金属行为转变为半导体型的激活行为。霍尔电阻率测试表明电子型载流子仍占主导，载流子浓度随压力逐渐增加，而自旋重取向临界磁场 H_{c1} 也逐渐增加。基于以上结果，我们提出层内反铁磁作用在高压下会增强，其与层内铁磁作用的竞争会阻碍长程磁有序的形成，而增强的磁涨落会造成电荷局域化，这可以解释高压下反铁磁序的消失和电阻率的增加。

关键词：MnBi₂Te₄，磁性拓扑绝缘体，高压调控

致谢：感谢陈科宇、王铂森、J.-Q. Yan、D. S. Parker、J.-S. Zhou、Y. Uwatoko 等合作者。感谢科技部重点研发计划项目(2018YFA0305700)、国家自然科学基金(11574377, 11834016, 11874400)、中国科学院先导 B 项目(XDB25000000)、中国科学院前沿科学重点项目(QYZDB-SSW-SLH013)的支持。

参考文献

- [1] J. H. Li, Y. Li, S. Q. Du, et al., Sci. Ad. 5, eaaw5685 (2019).
- [2] M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann, et al., ArXiv: 1809.07389 (2018)
- [3] Y. J. Deng, Y. J. Yu, M. Z. Shi, et al., ArXiv: 1904.11468 (2019)
- [4] C. Liu, Y. C. Wang, H. Li, et al., ArXiv: 1905.00715 (2019)
- [5] J.-Q. Yan, Q. Zhang, T. Heitmann, et al., Phys. Rev. Mater. 3, 064202 (2019).
- [6] K. Y. Chen, B. S. Wang, J.-Q. Yan, et al., ArXiv: 1907.01760 (2019).

I44

专题代号：I

Sr(Fe_{1-x}Mn_x)₂As₂ 多临界点相图中不可混溶性及本征反铁磁格里菲斯效应研究

陈龙^{1, 2}、曹程^{1, 2}、陈洪祥^{1, 2}、王刚¹、马杰³、胡江平¹、陈小龙¹

¹中国科学院物理研究所，北京 100190

²中国科学院大学，北京 100049

³上海交通大学，上海 200240

Email: chenlongxy@outlook.com

Abstract: The crystal structure, magnetic and electronic properties of Mn-doped SrFe₂As₂ single crystals have been systematically investigated. A miscibility gap is found in the system from $x \sim 0.4362(4)$ to $x \sim 0.9612(9)$, out of that single crystals hold two distinct structures, $I4/mmm (139)$ for Fe-rich side and $P-3m1(164)$ for Mn-rich side, respectively. For Fe-rich side, single crystals have a continuously enlarged lattice parameter c for $x < 0.2055(2)$, followed by a phase separation with the crystals holding different structures up to $x = 0.4362(4)$. Magnetic and electronic transportation measurements demonstrate the suppression of spin density wave from $x = 0$ to $x = 0.0973(1)$ and the following abnormal increase of the ordering temperature, which is attributed to the intrinsic anti-ferromagnetic Griffith phase [1-2]. The heat capacity further confirms these novel phenomenon. Finally, a phase

diagram with multi-critical points covering the whole composition range of Mn-doped SrFe₂As₂ system is established accordingly.

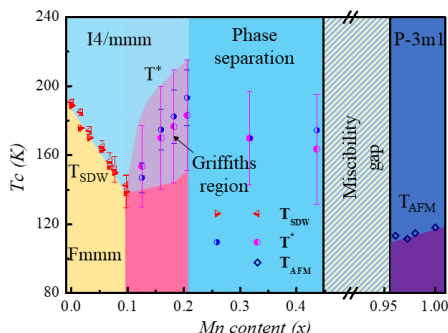


图 1 Sr(Fe_{1-x}Mn_x)₂As₂ 相图

Keywords: miscibility gap, intrinsic anti-ferromagnetic Griffith phase, phase separation

- 【1】 R.B. Griffiths, Nonanalytic behavior above the critical point in a random Ising ferromagnet, *Physical Review Letters*, 23 (1969), 17.
- 【2】 D. Inosov *et al.*, Possible realization of an antiferromagnetic Griffiths phase in Ba(Fe_{1-x}Mn_x)₂As₂, *Physical Review B*, 87 (2013) 224425.

基金项目：国家自然科学基金 (No. 51832010、No. 51572291)、国家重点研究开发计划 (No. 2018YFE0202600、2017YFA0302902)、中国科学院前沿科学重点研究项目 (No. QYZDJ-SSW-SLH013)

I45

I : 强关联与超导物理

Pressure-induced Structural Phase Transition and a Special Amorphization Phase of 2D Ferromagnetic Semiconductor

Zhenhai Yu^{1,*}, Wei Xia¹, Ming Xu², Jinggeng Zhao³, Lin Wang⁴, and Yanfeng Guo¹

¹School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China

²Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China

³Department of Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150080, China

⁴Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research, Shanghai, 201203, China

Email: yuzhh@shanghaitech.edu.cn

Layered transition-metal trichalcogenides have become one of the research frontiers as two-dimensional magnets and candidate materials used for phase-change memory devices. Herein we report the high pressure synchrotron X-ray diffraction and resistivity measurements on Cr₂Ge₂Te₆ (CGT) by using diamond anvil cell techniques, which reveal a mixture of crystalline-to-crystalline and crystalline-to-amorphous transitions taken place concurrently at 18.3-29.2 GPa. The polymorphic transition could be interpreted by atomic layer reconstruction and the amorphization could be understood in connection with randomly flipping atoms into van der Waals gaps. The amorphous (AM) phase is quenchable to ambient conditions. Interestingly, the high-pressure AM phase exhibits metallic resistance with the magnitude comparable with that of high-pressure crystalline phases, whereas resistance of the AM phase at ambient pressure fails to exceed that of the crystalline phase, indicating that the AM phase of CGT appeared under high pressure is quite unique and the similar behavior has never been observed in other phase-change materials. The results definitely would have significant implications for the design of new functional materials.

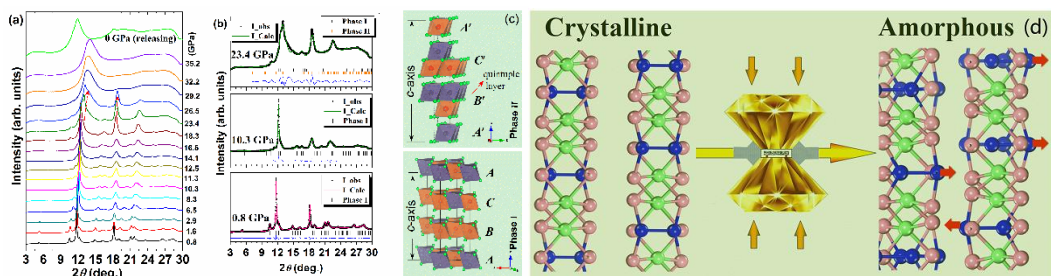


Figure 1 (a) Selected AD-XRD patterns of CGT at room temperature, (b) Refined XRD patterns at different pressures, (c) Schematic views of crystal structures of phases I and II of CGT, (d) The screenshot of Ge flipping in the Ge-Te₃ tetrahedrons by pressure.

ACKNOWLEDGMENT

The authors acknowledge the support by the Natural Science Foundation of Shanghai (No. 17ZR1443300), and the Shanghai Pujiang Pro-program (No. 17PJ1406200).

REFERENCES

- [1] Y. Sun *et al.* Appl. Phys. Lett. 2018, 112, 072409.
- [2] Z. H. Yu, *et al.* J. Phys. Chem. C 2019, 123, 13885–13891

氢对量子自旋液体候选材料 $\text{H}_3\text{LiIr}_2\text{O}_6$ 磁性的调控

李颖^{1, 2}、Stephen M. Winter²、Roser Valenti²

1. 西安交通大学理学院，西安 710049；
2. 德国法兰克福大学理论物理研究所，法兰克福 60438

Email: yingli1227@xjtu.edu.cn

摘要：由于在量子计算领域的潜在应用，Kitaev 自旋液体在六角晶格中提出后引起了广泛关注【1】，但是实验上却很难找到实现这一磁性态的物质。最近 $\text{H}_3\text{LiIr}_2\text{O}_6$ 【2】在实验上被提出并有望实现这一磁性态，然而实验上无法给出 H 的准确位置，且普遍认为 H 的位置对其磁性无重要影响。本项目通过结合密度泛函理论以及非微扰的精确对角化研究了 $\text{H}_3\text{LiIr}_2\text{O}_6$ 中 H 离子位置（如图 1）对其磁相互作用的影响。结果显示：(1) 层间 O-H-O 键的几何形状强烈地影响着局域磁相互作用；(2) 由于 H 的零点振动能较大，H 仍处于中间位置，所得出的磁性模型处于铁磁、锯齿形以及不相称螺旋序之间的经典三临界态；(3) 进一步，用 D 代替 H 以及扰动引起的不均匀性破坏了 H-O 或者 D-O 的稳定性，从而对局部磁耦合产生了强烈的影响。这一研究表明， $\text{H}_3\text{LiIr}_2\text{O}_6$ 中的磁响应用于样品的微观结构非常敏感，并且在类似体系中仔细处理氢的位置是非常关键的【3】。

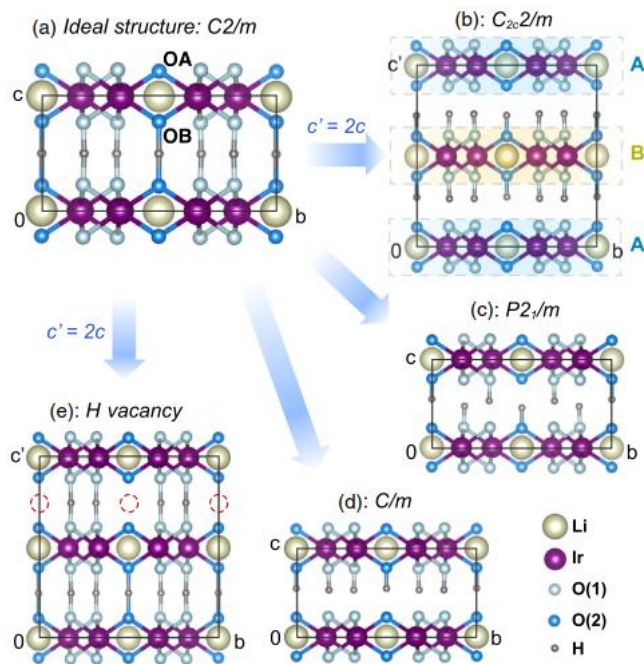


图 1 H 处于不同位置的 $\text{H}_3\text{LiIr}_2\text{O}_6$ 晶体结构【3】

关键词：自旋液体，有效自旋模型，密度泛函

参考文献

- 【1】 A. Kitaev, Anyons in an exactly solved model and beyond, *Ann. Phys.*, 2006, 321(1), 2.
- 【2】 K. Kitagawa *et al.*, A spin-orbital-entangled quantum liquid on a honeycomb lattice, *Nature*, 2018, 554, 341.
- 【3】 Y. Li *et al.*, Role of Hydrogen in the Spin-Orbital-Entangled Quantum Liquid Candidate $\text{H}_3\text{LiIr}_2\text{O}_6$, *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 121, 247202.

基金项目：德国科学基金 (NO.SFB/TR 49)，西安交通大学新教师科研启动经费

I47

专题代号：I

铁磁半金属 HgCr_2Se_4 的高压研究

孙建平、伊长江、石友国、李永庆、程金光*

中国科学院物理研究所，北京 100190

Email: jgcheng@iphy.ac.cn

摘要：尖晶石结构的 ACr_2X_4 ($\text{A}=\text{Cd}, \text{Hg}, \text{Zn}, \text{X}=\text{Se}, \text{S}$ 等)作为一类磁性绝缘体或磁性半导体至今已
有五

十多年的研究历史¹。其中， ACr_2X_4 的三价 Cr^{3+} 离子可通过超交换作用产生铁磁有序，而 A 位原子的 s

轨道会通过 s-d 交换相互作用进一步发生较大的自旋劈裂。第一性原理计算表明 n 型 HgCr_2Se_4 是一种 s

能带极性半金属，并且预言了理想化学配比的 HgCr_2Se_4 可能具有磁性外尔半金属的特性以及可能会实

现更高温度的量子反常霍尔效应²

。随后，详尽的磁性和电子输运实验研究证实了 n 型 HgCr_2Se_4 单晶样

品在居里温度(~ 105.5 K)附近出现的金属-绝缘体相变出现了 8 个数量级的电阻变化，并且在铁磁相变附

近有近 5 个数量级的庞磁电阻；同时对安德列夫(Andreev)反射谱拟合得到了高达 97% 的电子自旋极化

率，进一步为 n 型 HgCr_2Se_4 的极性半金属特性提供了实验证据³

。由于 HgCr_2Se_4 的新奇物理性质绝大

部分存在于铁磁相变附近，因此，将铁磁有序温度推到室温附近将进一步有助于实际应用。

最近，我们对高质量的 n 型 HgCr_2Se_4 单晶开展了细致的高压下磁电输运以及磁性测量，结果发现

n 型

HgCr_2Se_4 的铁磁金属基态在高压下被螺旋反铁磁绝缘基态所取代，通过施加磁场调控可以恢复其铁磁

金属基态，不同磁性基态的竞争最终导致了大约 3×10^{11}

% 的庞磁电阻，这些结果对实现一种新奇量子态

提供了新的途径，同时对探索新型磁性竞争诱导的庞磁电阻效应以及自旋电子学器件应用有重要意

义⁴

。

图 1 n 型 HgCr₂Se₄ 单晶的温度-压力相图

关键词：铁磁半金属 庞磁电阻 高压调控 参考文献：

[1] P. K. Baltzer, H. W. Lehmann, and M. Robbins, Insulating ferromagnetic spinels, *Phys. Rev. Lett.* 1965, 15, 493

[2] G. Xu et al., Chern semimetal and the quantized anomalous Hall effect in HgCr₂Se₄, *Phys. Rev. Lett.* 2011, 107, 186806

[3] T. Guan et al., Evidence for half-metallicity in n-type HgCr₂Se₄, *Phys. Rev. Lett.* 2015, 115, 087002

[4] J. P. Sun et al., Magnetic-Competition-Induced Colossal Magnetoresistance in n-Type HgCr₂Se₄ under High Pressure, *Phys. Rev. Lett.* 2019, 123, 047201

基金项目：国家自然科学基金项目、科技部重点研发计划、科学院 B 类先导专项以及博士后创新人才计划

I48

专题代号：I

高压下新型过渡金属富氢化合物的合成

Jianjun Ying^{1,2,3}, Xue Li⁴, Eran Greenberg⁵, Vitali B. Prakapenka⁵, Hanyu Liu⁴, and Viktor V. Struzhkin²

¹*Department of Physics, and CAS Key Laboratory of Strongly-coupled Quantum Matter Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China*

²*Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, Washington, DC 20015, USA*

³*HPCAT, Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, Argonne, Illinois 60439, USA*

⁴*Innovation Center for Computational Physics Methods and Software & State Key Laboratory of Superhard Materials, College of Physics, Jilin University*

⁵*Center for Advanced Radiation Sources, The University of Chicago, 5640 South Ellis Avenue, Chicago, Illinois 60637, USA*

Email: yingjj@ustc.edu.cn

摘要：

最近在高压 H₂S 样品中观察到了 200K 左右的超导电性，引起了人们广泛的兴趣。目前通过高压下结构搜索与第一性原理计算，人们发现很多富氢化合物在高压下可以稳定存在，并且发现很多富氢化合物具有非常高的超导转变温度。特别是最近人们发现在 LaH₁₀ 这一富氢体系中发现了高达 260 K 的超导转变温度。然而大多数理论预言的氢化物在实验上还没有被证实，而且目前发现的 H₂S 和 LaH₁₀ 达到超导所需的压力非常高，这就需要人们寻找新型富氢化合物，并和理论计算进行比较。

通过金刚石对顶砧高压技术，我们尝试研究了镍和钼两种过渡金属在高压富氢条件下形成的新型氢化物，并和理论计算进行比较。首先，我们在镍氢系统中发现了一种单斜的 Ni₂H₃ 新型镍氢化合物，并且与理论计算完全吻合，发现

的 Ni_2H_3 虽然没有磁性但是也没有超导。随后我们在钽氢体系中发现一种新型富氢相 TaH_3 , 由于该富氢相的结构非常罕见, 具有较大的原胞, 在早期计算中没有被发现。同时通过计算表明在 80GPa 下 TaH_3 具有 23K 的超导转变温度。

关键词: 高压 氢化物 超导

参考文献

- [1] Jianjun Ying *et al.*, Synthesis and stability of tantalum hydride at high pressures, *Phy. Rev. B* 99, 224504 (2019).
- [2] Jianjun Ying *et al.*, Synthesis of new nickel hydrides at high pressure, *Phy. Rev. Mater.* 2, 085409 (2018).

I49

专题代号: I

兼具 A 位反铁磁和 B 位亚铁磁长程序的四重钙钛矿材料 $\text{CaCu}_3\text{Co}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$

刘哲宏、龙有文

中国科学院物理研究所, 北京 100190

Email: liuzhehong@iphy.ac.cn

摘要: 具有分子式 $\text{AA}'_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (其中 A 位常被碱金属、碱土金属或是稀土金属元素占据, 而 A' 和 B 位常常被过渡金属磁性离子占据) 的 A 位有序钙钛矿材料体系由于其丰富而有趣的物理性质, 如高温铁磁、亚铁磁, 电荷歧化, 电荷转移, 磁电多铁性, 庞磁电阻, 负热膨胀等, 吸引了研究者的广泛关注, 成为了近年来研究的热点。在这一体系中, 由于 A' 位的特殊环境, 所以具有强 John-Teller 畸变的 Cu^{2+} , Mn^{3+} 离子倾向于占据在这一位置, 和最近邻的氧形成四边形结构。在 $\text{ACu}^{2+}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ 家族中, A' 位的 Cu^{2+} 离子与 B 位的磁性离子耦合常常形成一个铁磁或反铁磁长程磁序, 只有少数几种 d 轨道为空的 B 位非磁性离子情况例外; 而在 $\text{AMn}^{3+}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ 家族中, A' 位的 Mn^{3+} 离子和 B 位的磁性离子分别独立形成反铁磁长程磁序。更进一步, 在 $\text{ACu}^{2+}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ 家族中, 当 B 位被两种不同的离子等比例占据, 就有可能得到 A 位和 B 位同时有序, 分子式为 $\text{ACu}^{2+}_3\text{B}_2\text{B}'_2\text{O}_{12}$ 的四重钙钛矿材料, 在这一体系中, A' 位的 Cu^{2+} 离子与 B 位, B' 位的磁性离子耦合容易形成一个长程亚铁磁序。

近期, 我们课题组团队采用高温高压淬火的方法成功制备了 A 位和 B 位均有序的四重钙钛矿材料 $\text{CaCu}_3\text{Co}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$, 其电荷组态为 $\text{CaCu}^{2+}_3\text{Co}^{2+}_2\text{Re}^{6+}_2\text{O}_{12}$ 。出乎意料的是, 这种材料形成了兼具 A 位反铁磁和 B 位亚铁磁长程序的磁结构, 相变的温度分别为 $T_N = 27\text{ K}$, $T_C = 20\text{ K}$, 这和以往发现的 $\text{ACu}^{2+}_3\text{B}_2\text{B}'_2\text{O}_{12}$ 家族的其他材料磁性均不一样。这一现象与磁材料中 A' 位 Cu^{2+} 离子和 B 位以及 B' 的 Co^{2+} , Re^{6+} 离子的电荷组态和三种离子之间的磁相互作用密切相关。

关键词: A 位和 B 位有序钙钛矿 反铁磁序 亚铁磁序

参考文献

- 【1】 W. T. Chen et al., A half-metallic A- and B-site-ordered quadrupleperovskite oxide $\text{CaCu}_3\text{Fe}_2\text{Re}_2\text{O}_{12}$ with large magnetization and a high transition temperature, *Nat. Commun.*, 2014, **5**, 3909.
- 【2】 Y. W. Long et al., Temperature-induced A-B intersite charge transfer in an A-site-ordered $\text{LaCu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ perovskite, *Nature* 2009, **458**, 60.
- 【3】 Z. Zeng et al., Large Low-Field Magnetoresistance in Perovskite-type $\text{CaCu}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}$ without Double Exchange, *Phys. Rev. Lett.* 1998, **82**, 3164.
- 【4】 C. C. Homes et al., Optical response of high-dielectric-constant perovskite-related oxide, *Science*, 2001, **293**, 673.

基金项目 : National Key R&D Program of China (Grant No. 2018YFA0305700, 2018YFE0103200), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51772324, 11574378), and the Chinese Academy of Sciences (Grant No. QYZDB-SSW-SLH013, GJHZ1773).

I-P01

专题代号: I

Pressure-induced metal-insulating transition and phase transition in

$\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$

Chunhua Chen, Yonghui Zhou, Chao An, Ying Zhou, Xuliang Chen, Bowen Zhang, Yifang Yuan, Zhaorong Yang
(High Magnetic Field Laboratory, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

Abstract : We have investigated the transport properties and the structural evolution of $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ under high pressure via electrical transport, x-ray diffraction and Raman experiments in diamond anvil cells. Our results show the metal-insulator transition at ~ 9 GPa, together with the abnormality of c/a and the abnormal red-shift of the Raman peaks at ~ 11 GPa. Synchrotron x-ray diffraction measurements unveil a pressure-induced first order structural transition at ~ 52 GPa. Besides, the Raman spectra demonstrate the new peaks at ~ 18 GPa. These results suggest the abnormal metal-insulator transition of $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ under high pressure may strongly correlated with the inhomogeneous compression of crystal structures. Our finding will shed light on the understanding of anomalous insulation in pressurized 4d/5d Ruddlesden-Popper oxides.

Key words : $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$, high pressure, phase transition, XRD, Raman

Reference

1. C. Donnerer et al., Pressure dependence of the structure and electronic properties of $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$, *Phys. Rev. B* 2016 **93**, 174118.
2. P. Rivero et al., Revealing out-of-equilibrium hidden phases in $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ by applying stress, *Phys Rev B* 2018 **97**, 134116.

Financial support: (Grant Nos. 2018YFA0305700, 2016YFA0401804)

I-P02

Kagome 纳米结构超导体中人工涡旋冰的研究

陈星宏¹, Victor V. Moshchalkov², 葛军饴^{1*}

1. 上海大学, 材料基因组工程研究院, 上海 200444, 中国

2. INPAC–Institute for Nanoscale Physics and Chemistry, KU Leuven, Celestijnenlaan 200D, B–3001
Leuven, Belgium

Email: junyi_ge@t.shu.edu.cn

摘要: 自旋冰是一类具有几何阻挫的磁性材料, 它表现出许多奇特的物理现象, 比如大量低能的简并态, 剩余熵和磁单极子激发态等。然而目前自旋冰材料的实验研究有两个重要的局限。首先是材料参数(如晶格常数)不容易调整。其次, 对单个自旋的成像非常困难。基于纳米磁体的人工自旋冰体系克服了这两个缺点。人工自旋冰可用来模拟自然界中难以被调控的物理体系, 为研究磁阻挫等行为开辟了一条新的途径。然而, 由于纳米磁体之间的较弱的相互作用, 使得该体系存在大量的激发态, 长程有序的基态难以获得。

在该研究中, 我们利用纳米结构超导体设计并制备出了具有结构阻挫的 Kagome 结构。并利用扫描霍尔显微镜直接观测磁通涡旋物质, 同时利用磁场和温度调控磁通涡旋之间的相互作用, 探索该体系基态、激发态结构及其演变。该研究结果为具有结构阻挫的人工冰研究提供了新的思路。

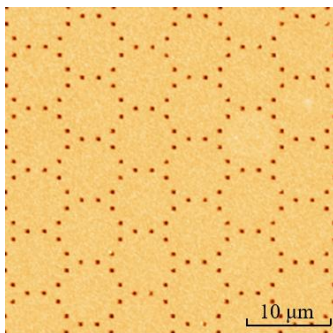


图 1 人工涡旋冰的原子力显微镜图像

关键词: 人工涡旋冰 Kagome 结构

- 【1】 Xue C , Ge J Y , He A , et al. Tunable artificial vortex ice in nanostructured superconductors with frustrated kagome lattice of paired antidots[J]. Physical Review B, 2017, 97(13):134506.
- 【2】 Ge J Y , Gladilin V N , Tempere J , et al. Direct visualization of vortex ice in a nanostructured superconductor[J]. Physical Review B, 2017, 96(13):134515.

基金项目: 该研究得到了上海市高校特聘教授(东方学者)计划和国家自然科学基金(No.11804217)的支持。

I-P03

Giant temperature dependence of the Mott gap size in 1T-TaS₂: a molecular dynamics study

Li Cheng,^{1,2} Shunhong Zhang,³ Shuang Qiao,⁴ Lizhao Liu,^{1,*} and Zheng Liu^{2,5,*}

¹*School of Mathematical and Physical Sciences, Panjin Campus, Dalian University of Technology, Panjin 124221, China*

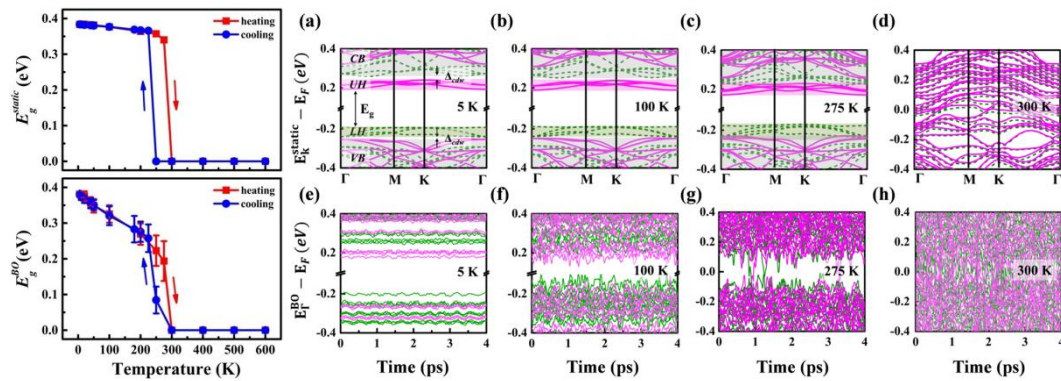
²*Institute for Advanced Study, Tsinghua University, Beijing 100084, China*

³*International Center for Quantum Design of Functional Materials (ICQD), Hefei National Laboratory for Physical Sciences at the Microscale, and Synergetic Innovation Center of Quantum Information and Quantum Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China*

⁴*Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100193, China*

⁵*State Key Laboratory of Low-Dimensional Quantum Physics, Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*

The lattice thermodynamics of 1T-TaS₂, e.g. the spontaneous formation of periodic distortion and vibrations around the equilibrium position, is calculated by ab initio molecular dynamics. Based on that, the finite-temperature electronic structure is examined within the Born-Oppenheimer approximation. We show that the Mott gap shrinks by half when the temperature raises from 0 K to 200 K. The gap size reduction is one order of magnitude larger than the temperature variation in energy. This giant temperature dependence arises from the interplay between the electronic correlation and electron-phonon coupling, and is expected to strongly affect the spin interactions.



References: <https://arxiv.org/abs/1908.04455>

I-P04

专题代号 : I

CeCu₂Ge₂ 的高场比热

董超 1, 2, 王俊峰 1, S. Imajo², Y. Kohama², A. Matsuo², K.

Kindo², T. Ebihara³

1

华中科技大学 国家脉冲强磁场科学中心 武汉 430074

2

Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, 5-1-5 Kashiwanoha,
Kashiwa, Chiba, Japan

3
Department of Physics, Shizuoka University, Suruga, Shizuoka, 422-8529, Japan
Email: dongchaotd@163.com

摘要：CeCu₂Ge₂ 是铈基重费米子化合物，该体系中存在着近藤效应和 RKKY 相互作用之间的强竞争。在零场下，这种竞争关系导致了一个有着高有效质量的反铁磁的基态。（从早期的低至 0.5K 的低温比热数据中，估算出 γ 值较大为 0.2 JK⁻²mol⁻¹，这表明该系统有较大的有效质量[1]。磁场能够调节这种相互作用间的微妙平衡，当磁场平行于 ab 平面时候，此时磁场成功的诱导了相变。目前为止，为了弄清该材料的每一个磁场诱导相变的电子结构，研究者们已经做了量子振荡测量，其磁场强度达到了 30T 的高场[2]。但是这对于该材料的磁场诱导的相变的电子结构的研究来说仍然不够。因此，我们利用高场比热的方式来研究其磁场诱导相变的电子结构。我们测量了该样品的更高磁场下的比热数据，分别测量了磁场沿着不同方向（a 和 c）的该材料的比热。图 1，是磁场平行于 c 方向的 Cp/ T 数据，从该图中我们可以估算出不同场下的 γ 值。低场相下， γ 值基本与参考文献 1 中的比热数据得到的 γ 值相同，而高场相下， γ 值几乎为零。也就是说，此时电子比热受到了很强的抑制。结合 a 方向的数据，我们会讨论 CeCu₂Ge₂ 样品中，这种抑制效应可能的机制。

-1，这表明该系统有较大的有效质量[1]。磁场能够调节这种相互作用间的微妙平衡，当磁场平行于 ab 平面时候，此时磁场成功的诱导了相变。目前为止，为了弄清该材料的每一个磁场诱导相变的电子结构，研究者们已经做了量子振荡测量，其磁场强度达到了 30T 的高场[2]。但是这对于该材料的磁场诱导的相变的电子结构的研究来说仍然不够。因此，我们利用高场比热的方式来研究其磁场诱导相变的电子结构。我们测量了该样品的更高磁场下的比热数据，分别测量了磁场沿着不同方向（a 和 c）的该材料的比热。图 1，是磁场平行于 c 方向的 Cp/ T 数据，从该图中我们可以估算出不同场下的 γ 值。低场相下， γ 值基本与参考文献 1 中的比热数据得到的 γ 值相同，而高场相下， γ 值几乎为零。也就是说，此时电子比热受到了很强的抑制。结合 a 方向的数据，我们会讨论 CeCu₂Ge₂ 样品中，这种抑制效应可能的机制。

效质量[1]。磁场能够调节这种相互作用间的微妙平衡，当磁场平行于 ab 平面时候，此时磁场成功的诱导了相变。目前为止，为了弄清该材料的每一个磁场诱导相变的电子结构，研究者们已经做了量子振荡测量，其磁场强度达到了 30T 的高场[2]。但是这对于该材料的磁场诱导的相变的电子结构的研究来说仍然不够。因此，我们利用高场比热的方式来研究其磁场诱导相变的电子结构。我们测量了该样品的更高磁场下的比热数据，分别测量了磁场沿着不同方向（a 和 c）的该材料的比热。图 1，是磁场平行于 c 方向的 Cp/ T 数据，从该图中我们可以估算出不同场下的 γ 值。低场相下， γ 值基本与参考文献 1 中的比热数据得到的 γ 值相同，而高场相下， γ 值几乎为零。也就是说，此时电子比热受到了很强的抑制。结合 a 方向的数据，我们会讨论 CeCu₂Ge₂ 样品中，这种抑制效应可能的机制。

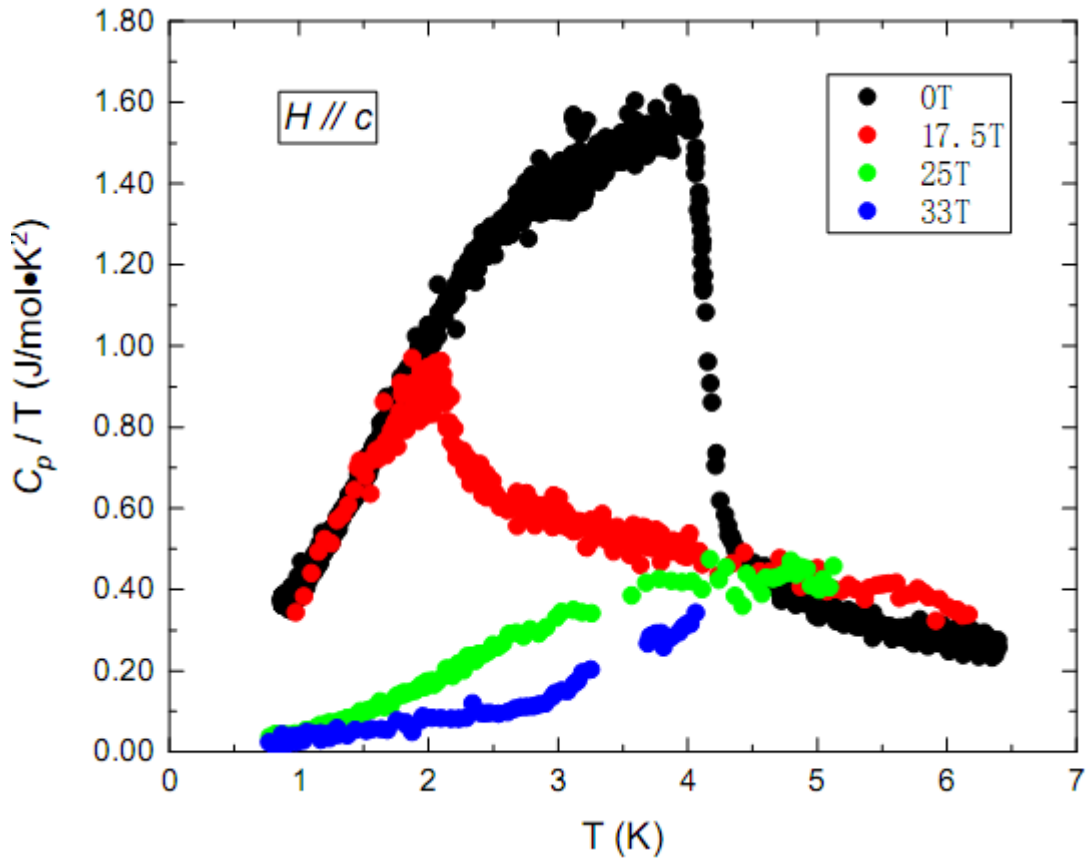


图 1 C_p/T 同温度 T 在不同场下的变化曲线

关键词：强磁场，比热，重费米子

参考文献

[1] Fisher, R. A., et al. "The low-temperature specific heat of $CeCu_2Ge_2$ at 0 and 9.5 kbar." *Physica B: Condensed Matter* 194 (1994): 459-460.
 [2] Zeng, Bin, et al. " $CeCu_2Ge_2$: Challenging our understanding of quantum criticality." *Phys. Rev. B* 90.15 (2014): 155101.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11574098) 等

I-P05

专题代号：X

铁基超导体 $KCa_2Fe_4As_4F_2$ 的磁通钉扎机制以及上、下临界场各向异性

何修德¹、陈星宏¹、肖祁陵¹、陈飞¹、冯振杰¹、曹世勋¹、张金仓¹、牟刚²、葛军饴

1*

1. 上海大学材料基因组工程研究院，上海 200444
 2. 中科院上海微系统与信息技术研究所，上海，200050
 Email: junyi_ge@t.shu.edu.cn

摘要：超导体载流能力的大小取决于内部的钉扎。缺陷密度的分布导致电子运动的平均自由程在空间有涨落，因此能够影响到超流电子的动能项，从而起到钉扎的作用，此类钉扎称为 δl 钉扎，即平均自由程涨落钉扎。我们在 $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 单晶的磁性研究中发现，温度低至 5 K 时，它的临界电流密度大于 1 MA/cm^2 ，远高于超导体实用阈值 (10^5 A/cm^2)。应用集体钉扎理论，我们发现， δl 钉扎在 $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 单晶中扮演了非常重要的角色。此外，在 $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 单晶中还发现了第二峰效应。

在超导体应用中，上临界场也是一个极为重要的值。 $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 单晶具有极高的上临界场且其各项异性度 $\Gamma_{\text{Hc}2} = H_{\text{c}2//\text{ab}}/H_{\text{c}2//\text{c}}$ 随温度的降低而减小。超导体下临界场的确定对于研究它的能隙对称性以及多带特性都有重要的作用，我们通过测量单晶的起始磁化率计算得出 $H//\text{c}$ 和 $H//\text{ab}$ 的下临界场，发现其各向异性度 $\Gamma_{\text{Hc}1} = H_{\text{c}1//\text{c}}/H_{\text{c}1//\text{ab}}$ 在 $<20 \text{ K}$ 时 ~ 14 ，并随着温度的升高而减小。 $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 单晶高临界电流密度以及高的上临界场的特性使其成为潜在的实用超导体材料。

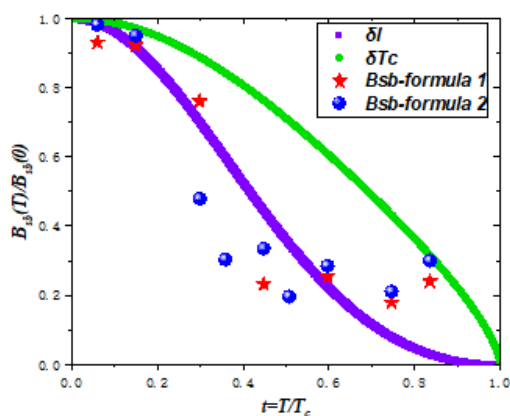


图 1 $B_{\text{sb}}(T)/B_{\text{sb}}(0)$ 与温度关系图

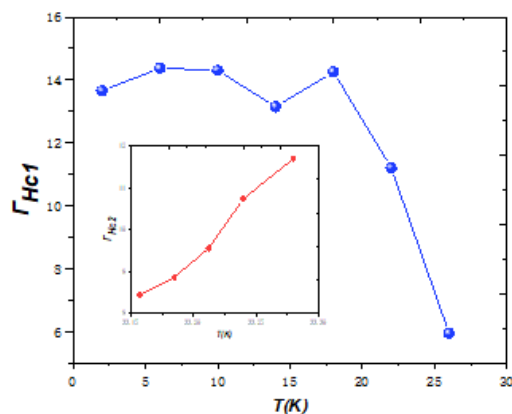


图 2 各向异性参数 $\Gamma_{\text{Hc}1}$ 和 $\Gamma_{\text{Hc}2}$ 与温度关系图

关键词： $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 临界电流密度 磁通钉扎 临界场 各向异性

参考文献

- [1] Teng Wang, Gang Mu, *et al.* Single-Crystal Growth and Extremely High $H_{\text{c}2}$ of 12442-Type Fe-Based Superconductor $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ [J]. The Journal of Physical Chemistry C 2019 123 (22), 13925-13929

基金项目：该研究得到了上海市高校特聘教授（东方学者）计划和国家自然科学基金（No. 11804217）的支持。

I-P06

专题代号：I

新型一维链氯化碲酸铜化合物的自旋单态行为

李锦阳、何长振*

中科院福建物质结构研究所，福州 350002

Email: hezz@fjirsm.ac.cn

由于自旋量子涨落效应的存在，一维链在绝对零度下可能不会出现长程磁有序现象。近些年来人们在一维链体

系中发现了如自旋单态、spin-Peierls 相变、Haldane 能隙等有趣的磁现象，因此探索新型的一维链体系并研究其磁性基态性质成为当前的研究热点。

本研究通过水热法合成了两例新型的一维链化合物 $\text{KCu}_4(\text{TeO}_3)_2\text{Cl}_5(\text{H}_2\text{O})_2$ (**1**)和 $\text{CsCu}_4(\text{TeO}_3)_2\text{Cl}_5(\text{H}_2\text{O})$ (**2**)。如图所示，在一个不对称单元中，化合物 1 和 2 都具有两个不等价的 Cu^{2+} 离子，分别是 Cu1 和 Cu2。沿着 b 轴方向，化合物 1 和 2 均通过以 Cu^{2+} 离子为中心的四方锥共边连接的形式形成了一维 zig-zag 链。不同的是，化合物 1 的 zig-zag 链是由 Cu1 二聚体和 Cu2 二聚体交替排列形成，而在化合物 2 中 Cu1 和 Cu2 则各自分别形成了一条 zig-zag 链。磁性测试结果表明，两个化合物的磁化率曲线都在 200K 左右出现鼓包，随着温度下降，磁化率迅速下降，除去低温下由晶格缺陷或者杂质引起的顺磁后，磁化率趋于零，以此可以看出两个化合物均存在自旋单态行为。

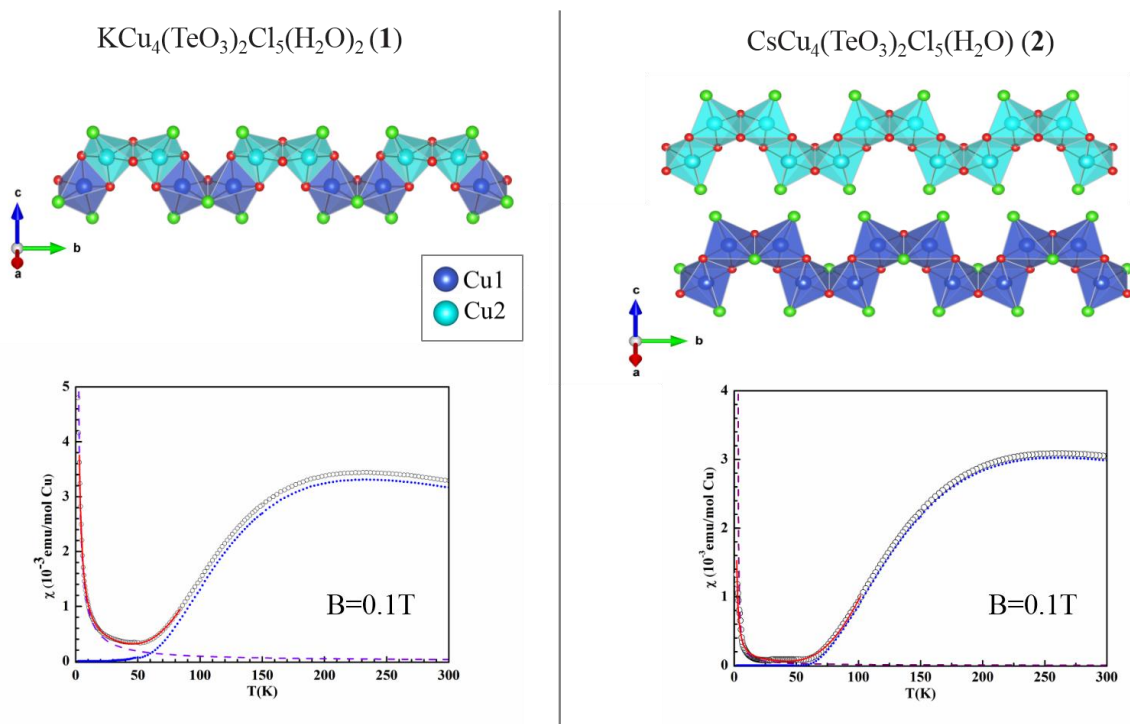


图 1. 化合物 1 和 2 的一维链结构及磁化率曲线

关键词：一维链 自旋能隙

基金项目：国家自然科学基金项目 (No.21875249)

I-P07

12442 型铁基超导体 $\text{CaCs}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 的 Nernst 效应研究

李妙聪 王志成 陶前 李宇鹏 曹光早 许祝安

摘要：铁基超导体因其独特的高温超导特性而一直备受广泛的关注。近期，一种新型的 12442 型层状结构铁基超导体被发现。其结构中存在着双层的 Fe_2As_2 层，且两者之间被绝缘的 Ca_2F_2 层隔开，因而显示出更强的各向异性，超导电性是否具有二维的特性是一个值得研究的问题。本工作中我们设想通过对 12442 型铁基超导体 $\text{CaCs}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ 的能斯特效应以探测是否存在强烈的超导涨落行为。我们的研究发现在超导 T_c (30K) 以上直到 100K 的一个宽的温度范围内，能斯特信号保持着较大的值，形成一个缓慢变化的鼓包，与通常最佳掺杂的铁基超导体不同。在超导临界温度以上的超导涨落并不是非常明显，也可能是被掩盖在太强正常态的背景信号中。由此我们猜测，由于结构中 1111 型结构层的影响，此类 12442 型超导体尚未达到最佳掺杂，可能还存在母相中的反铁磁序(SDW)的残余，从而导致能斯特信号在高于 T_c 的温区存在鼓包。这一猜测得到相应的热电势数据的支持。

关键词：铁基超导体，热电势，能斯特效应，SDW 相变

I-P08

专题代号：I

Spectroscopic imaging of quasiparticle bound states induced by strong nonmagnetic scatterings in one-unit-cell FeSe/SrTiO₃

Chaofei Liu,¹ Ziqiao Wang,¹ Yi Gao,² Xiaoqiang Liu,¹ Yi Liu,¹ Qiang-Hua Wang,³ and Jian Wang¹

¹International Center for Quantum Materials, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China

²Center for Quantum Transport and Thermal Energy Science, Jiangsu Key Lab on Opto-Electronic Technology, School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China

³National Laboratory of Solid State Microstructures & School of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China

Email: cfliu@pku.edu.cn

摘要： The absence of hole-like Fermi pockets in the heavily electron-doped iron selenides (HEDISs) challenges the s_{\pm} -wave pairing originally proposed for iron pnictides, which consists of opposite signs of the gap function on electron and hole pockets. While the HEDIS compounds have been investigated extensively, a consistent description of the superconducting pairing therein is still lacking. Here, by *in-situ* scanning tunneling spectroscopy and theoretical calculations, we study the effects of strong scatterings from nonmagnetic Pb adatoms on epitaxially grown HEDIS, one-unit-cell FeSe/SrTiO₃(001). Systematic tunneling spectra measured upon the Pb adatoms show comprehensive signals of quasiparticle bound states, which can be well explained theoretically within the sign-reversing pairing scenarios. The finding implies that, in addition to previously detected phonons, spin fluctuations play an important role in driving the Cooper pairing in FeSe/SrTiO₃(001). The sign reversal in the gap function we revealed here is a significant ingredient in a unified understanding of the high-temperature superconductivity in HEDISs.

关键词： one-unit-cell FeSe/SrTiO₃, quasiparticle bound states, high-temperature superconductivity, scanning tunneling spectroscopy, sign-reversing pairing

参考文献

- 【1】 Q.-Y. Wang *et al.*, Interface-induced high-temperature superconductivity in single unit-cell FeSe films on SrTiO₃, *Chin. Phys. Lett.* 2012, 29 (3), 037402.
- 【2】 A. V. Balatsky, I. Vekhter, and J.-X. Zhu, Impurity-induced states in conventional and unconventional superconductors, *Rev. Mod. Phys.* 2006, 78 (2), 373.

基金项目： National Natural Science Foundation of China (No.11888101), National Key R&D Program of China (No. 2018YFA0305604, No. 2017YFA0303302 and No. 2016YFA0300401), National Natural Science Foundation of China (No. 11774008 and No. 11574134).

Doping dependence of electromagnetic response in cuprate superconductors

Yiqun Liu, Yingping Mou and Shiping Feng

Beijing Normal University, Beijing, 100875

Email: liyiqun@mail.bnu.edu.cn

It has been proved that charge-spin separation is an effective method to deal with the single occupancy constraint $\sum_{\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} \leq 1$ in strong coherent electron systems, and this operation on an electron operator will produce a holon operator which characters the charge degree of freedom of electron and a spin operator which characters the spin degree of freedom of electron [1]. Under the theoretic framework of the kinetic energy driven superconductivity [1], the self-energy corrections of holon and spinon can be obtained, and then the holon Green' s function and spinon Green' s function are obtained. However, we cannot determine a full electron Green' s function through the methods above. To derive the full electron Green' s function, we assume that the self-energy of an electron should have the same form with the holon self-energy, thus the full electron Green' s function is obtained, this is the so-called full charge-spin recombination scheme [2]. With the help of this full electron Green' s function, we employ the linear response theory and calculate the Meissner effect of cuprate superconductors. We demonstrate that the paramagnetic part of the response kernel function vanishes when temperature decreased to zero, the charge carriers all condense to the superconducting state, but at the superconducting transition temperature T_c , the paramagnetic part of response kernel function cancels the diamagnetic part of response kernel function exactly, therefore supercurrent vanishes and the Meissner effect disappears in the system. Our calculation results indicate that the local magnetic field decays exponentially when going deep into the superconductor from its surface. Moreover, in the underdoped regime, the local magnetic field decays more slowly with a smaller doping level than that with a larger doping level. Accordingly, the superfluid density at zero temperature increases while doping level is increased in the underdoped regime and achieves a peak at about doping level $\delta=0.16$, then when doping level increased continuously, the superfluid density decreases. Besides these, superfluid density decreases linearly with temperature among a wide temperature range, and vanishes at $T=T_c$, however, in the extremely low temperature region, superfluid density shows a non-linear temperature dependent relationship.

Key words: Meissner effect, superfluid density, local magnetic field, penetration depth

Reference:

[1] S. P. Feng *et al.*, Kinetic-energy driven superconductivity in cuprate superconductors, *Int. J. Mod. Phys. B* 2015, 29, 1530009.

[2] S. P. Feng *et al.*, Electronic structure of cuprate superconductors in a full charge-spin recombination scheme, *Physica C* 2015, 517, 5.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11574032)

Doping and momentum dependence of coupling strength in cuprate superconductors

Yingping Mou, Yiqun Liu, Shuning Tan, and Shiping Feng

Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

Email: yingpingmou@mail.bnu.edu.cn

摘要 : The mechanism induce superconductivity in cuprate superconductors is still under debate, but the electrons strongly interact with some bosonic excitations has been widely accept [1]. However, the glue forming electron pairs is manifested itself by the coupling strength of the electrons to bosonic excitations. Within the framework of the kinetic-energy-driven superconductivity, the electron self-energies originate from the interaction of electrons with spin excitations [2,3]. The normal self-energies in the particle-hole channel and pairing self-energy in the particle-particle channel are employed to extract the coupling strengths of the electrons to spin excitations [4]. It's shown that below T_c , both the coupling strength in the particle-hole and particle-particle channels around the antinodes consist of two peaks, with a sharp low energy peak located at 5 meV around the optimally doped regime, and a broad-band with a weak peak centred at 40 meV. In particular, this two-peak structure in the particle-hole channel can persist into the normal state, while the coupling strength in the particle-particle channel vanishes at the nodes. As a nature consequence of doped mott insulator, the coupling strength of electrons to spin excitations is also doping dependent, where the position of the peaks in the underdoped regime shift towards to higher energies with the increase of doping. More specifically, the coupling strength is anisotropic along the Fermi surface with the positions of peaks move to lower energies and the weight of the peaks decrease from the antinode to the hot spot, and fade away at the hot spots.

关键词 : Cuprate superconductors, Coupling strength, Normal self-energy, Pairing self-energy

- [1] W. Meevasana *et al.*, Doping Dependence of the coupling of Electrons to Bosonic Modes in the Single-Layer High-Temperature $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ superconductor, *Phys. Rev. Lett.* 2006, 96, 157003
- [2] S. Feng, Kinetic energy driven superconductivity in doped cuprates, *Phys. Rev. B* 2003, 68, 184501
- [3] See, *e.g.*, the review, S. Feng *et al.*, Kinetic-energy-driven superconductivity in cuprate superconductors, *Int. J. Mod. Phys. B* 2015, 29, 1530009
- [4] Y. Mou *et al.*, Doping and momentum dependence of coupling strength in cuprate superconductors, arXiv:1903.00803

基金项目 : 国家自然科学基金项目 (Nos. 11574032)

I-P11

专题代号 : I

二维方格子上 Hubbard 模型相图的研究

阮则, 姜秀财, 宋泽毅, 张宇钟

同济大学物理科学与工程学院, 上海 200092

摘要：强电子关联系统是凝聚态领域的重要研究方向，哈伯德 (Hubbard) 模型是研究强关联问题的基本模型[1-3]。自铜氧基高温超导被发现以来，两维正方格子上的哈伯德模型得到了广泛关注 [1-6]。在只考虑最近邻格点间的电子跃迁项 t_1 的情况下，在位库仑相互作用 U 会导致系统形成奈尔 (Néel) 反铁磁序 (CAF) [3,4]。当次近邻电子跃迁 t_2 与最近邻电子跃迁 t_1 同时存在时，几何阻挫效应会使相图变得非常丰富：一方面在 U/t_1 较小的情况下会形成顺磁金属相；另一方面随着在位格点内库仑相互作用 U 的增强，不仅会发生由顺磁金属到 CAF 绝缘体的相变，还会在相变边界附近产生磁性金属态；此外，增强近邻电子跃迁 t_2 ，会导致条纹状反铁磁序 (SAF) 的能量比 CAF 更低；随着在位库仑相互作用 U 的增强，系统会发生从顺磁金属到 SAF 金属、再到 SAF 绝缘体的相变[4]。

这里，我们利用平均场近似重新研究了二维正方格子上的哈伯德模型，通过考虑次近邻电子跃迁 t_2 ，我们不仅得到了与前人一致的结果，还发现了新的有序相。首先，在 U 较大的情况下，我们在 $0.7 < t_2/t_1 < 0.8$, $4.4 < U/t_1 < 10$ 范围内发现了新的反铁磁 (N-CAF) 绝缘相，这个相位于 CAF 绝缘相和 SAF 绝缘相之间。其次，在 $0.6 < t_2/t_1 < 0.8$, $2.9 < U/t_1 < 4.4$ 区间内，还观察到了被 CAF 绝缘相、N-CAF 绝缘相、SAF 磁性金属相和顺磁金属相所包围的双条纹反铁磁 (DAF) 金属相。

通过本次研究，我们发现了新的有序相，这不仅进一步丰富了二维正方格子哈伯德模型的相图，还能为理解有机分子材料等具有几何阻挫的材料磁性提供帮助，对其母体的磁性做出定性的解释[5,6]。

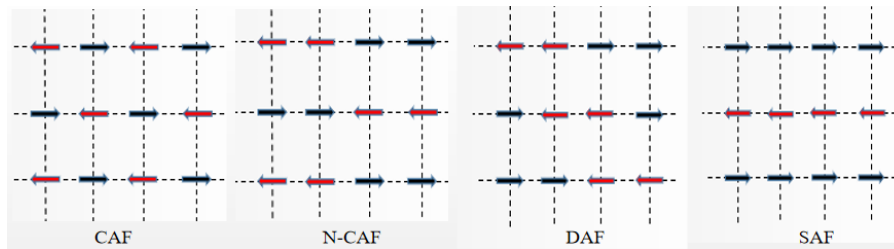


图 1 各种磁性状态示意图

关键词：强关联电子系统，两维哈伯德模型，平均场，几何阻挫，反铁磁性

参考文献:

- 【1】 J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963). 【2】 H. Q. Lin and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **35**, 3359 (1987). 【3】 S. Yamaki, K. Seki, and Y. Ohta Phys. Rev. B **87**, 125112(2013). 【4】 Zeng-Qiang Yu and Lan Yin Phys. Rev. B **81**, 195122(2010). 【5】 R. Chitra and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **83**, 2386 (1999). 【6】 J. Kokalj and Ross H. McKenzie Phys. Rev. Lett. **110**, 206402 (2013).

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11774258), 中国博士后科学基金项目 (No. 1370229038)

I-P12

专题代号：I

ARPES Autocorrelation in Electron-Doped Cuprate Superconductors

Shuning Tan¹, Yingping Mou¹, Shiping Feng¹

¹Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

Email: tanshuning@mail.bnu.edu.cn

摘要：The angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) autocorrelation [1,2] in the electron-doped cuprate superconductors is studied based on the kinetic-energy driven superconducting (SC) mechanism [3]. In order to explain the joint density of states distribution of autocorrelation, we studied the characteristics of quasi-particle excitation spectral intensities [4]. It is shown that the quasiparticle excitation spectral weight on the constant energy contours is gapped out by the strong electron correlation, leaving behind the quasiparticle excitation spectral weight only locate at the four disconnected segments around the nodal region in the first Brillouin zone (BZ). And the highest density points are located exactly around the tips of these disconnected segments called ‘hot spot’. These eight hot spots are connected by wave vectors \mathbf{q}_i ($i=1-7$) which

directly correlated to the sharp peaks in autocorrelation. In particular, these sharp peaks are weakly dispersive in momentum space which is similar with hole-doped case [5]. However, in contrast to hole-doped cuprates, the characteristic wave vector q_1 which matches well with the corresponding charge-order wave vector Q_{CD} is increase with increasing doping. Additionally, we believe that there must be an intrinsic connection between the ARPES autocorrelation and quasiparticle scattering interference in the electron-doped cuprate superconductors [6,7].

关键词: ARPES Autocorrelation, Quasiparticle excitation spectral, Electron-doped cuprate superconductors

- J. Hoffman et al., Imaging Quasiparticle Interference in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, Science 297, 1148 (2002).
- U. Chatterjee et al., Anomalous dispersion in the autocorrelation of angle-resolved photoemission spectra of high-temperature $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ superconductors, Phys. Rev. B 76, 012504 (2007).
- S. Feng, Kinetic energy driven superconductivity in doped cuprates, Phys. Rev. B 68, 184501 (2003); See, e.g., the review, S. Feng et al., Kinetic energy driven superconductivity in cuprate superconductors, Int. J. Mod. Phys. B 29, 1530009 (2015).
- S. Tan et al., ARPES autocorrelation in electron-doped cuprate superconductors, unpublished.
- D. Gao et al., Autocorrelation of quasiparticle spectral intensities and its connection with quasiparticle scattering interference in cuprate superconductors, Phil. Mag. 99, 752 (2019).
- Q. Wang et al., Quasiparticle scattering interference in high-temperature superconductors, Phys. Rev. B 67, 020511(2003).
- K. McElroy et al., Relating atomic-scale electronic phenomena to wave-like quasiparticle states in superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, Nature 422, 592 (2003).

基金项目: 国家自然科学基金项目 (Nos. 11574032)

I-P13

The Photoinduced Dynamic Process in Hidden State of 1T-TaS_2

王子潇、刘巧梅、时立宇、张思捷、林桐、吴东、王楠林

北京大学物理学院, 北京 100871

Email: zixiaowang@pku.edu.cn

摘要: The dynamical properties of single crystal 1T-TaS_2 are investigated both in commensurate charge density wave state (CCDW state) and hidden charge density wave state (HCDW state). We develop a useful criterion in time-domain transmission terahertz measurement to judge whether the compound is driven into a metastable state or still in its virgin state. An increase of terahertz conductivity by two orders of magnitude from CCDW state to HCDW state is obtained by taking account of the penetration depth mismatch, which agrees with reported dc transport measurement. Upon weak pumping, only transient processes with rapid decay dynamics are triggered in both CCDW and HCDW states. We compare the conductivity increases in terahertz frequency range between transient and HCDW states and suggest that fluctuated metallic domain walls may

develop in the transient states.

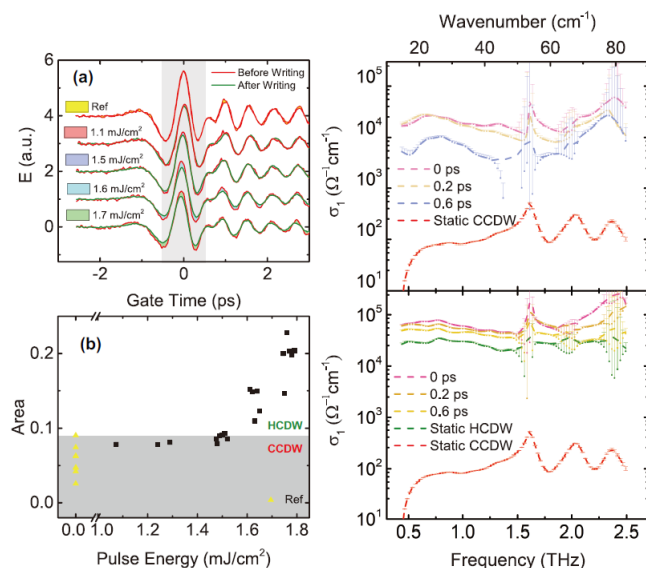


Figure 1: Two processes on different time scales.

关键词：CDW, Hidden State

参考文献

- 【1】 L. Stojchevska *et al.*, Ultrafast Switching to a Stable Hidden Quantum State in an Electronic Crystal, *Science*. 2014, 344, 177.
- 【2】 N. Dean *et al.*, Polaronic Conductivity in the Photoinduced Phase of 1T-TaS₂, *Phys. Rev. Lett.* 2011, 106, 016401.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11120101003, 11327806)，国家重点基础研究发展计划 (973 计划) (2012CB821403)。

I-P14

专题代号：I

高质量 GdBCO 超导块材的制备和性能研究

杨芃焘¹、孙建平¹、杨万民²、程金光¹

1 中国科学院物理研究所，北京 110190

2 陕西师范大学，西安 710119

Email: ptyang@iphy.ac.cn

摘要：顶部籽晶熔融织构生长法 (TSMG) 和顶部籽晶熔渗生长法 (TSIG) 制备的 REBCO 超导块材中主要包含两种粒子：超导的 RE-123 相粒子和非超导的 RE-211 相粒子，其中非超导的 RE-211 相粒子可以作为磁通钉扎中心提高超导块材在磁场下的载流能力，而 RE-211 粒子的钉扎效果取决于粒子的分布情况和尺寸，因此细化 RE-211 粒子的尺寸并使其分布均匀可以提高超导块材的钉扎性能。RE+011 TSIG 制备的 REBCO 超导块材中，YBCO 的最大磁悬浮力和捕获磁场可以达到 40.85 N (77 K, B_{pm}=0.5 T) 和 0.35 T (77 K, B_{app}=0.5 T)，相对于同样方法制备的

GdBCO 超导块材, 其性能更好, 通过观察发现 YBCO 超导块材中 Y-211 粒子的直径约为 1~5 μm , 这明显低于 GdBCO 超导块材中 Gd-211 粒子的直径 (5~25 μm), 因此为了提高 GdBCO 超导块材的性能, 细化 GdBCO 中的 Gd-211 粒子至关重要。本文在 Gd+011 TSIG 法中通过向固相源中添加适量的 CeO_2 , 研究了 CeO_2 掺杂对 GdBCO 超导块材宏观形貌、微观结构、磁悬浮力以及捕获磁场的影响, 发现 CeO_2 掺杂可以使 Gd-211 粒子的尺寸明显降低, 并在 Gd-123 相基体中产生了均匀分布的纳米粒子, 显著提升了 GdBCO 超导块材的磁悬浮力和捕获磁场, 在 77 K 下, 直径 20 mm 的单畴 GdBCO 超导块材磁悬浮力达到了 54.5 N, 其最大捕获磁场也达到了 1.12 T, 直径 32 mm 的样品最大磁悬浮力为 131.1 N, 表现出了优异的钉扎性能。

关键词: 顶部籽晶熔渗生长法, GdBCO 超导块材, 捕获磁场, 磁悬浮力

参考文献 (中文小五号宋体, 其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

1. X.-Q. Su, *et al.*, A novel method to fabricate single domain YBCO bulk superconductors without any residual liquid phase by Y+011 TSIG technique, *J. Alloy Comp.*, 2017, 692, p. 95-100.
2. Y. Kim, *et al.*, Interaction mediated by size differences between Y_2BaCuO_5 and CeO_2 particles in melt-textured YBCO superconductors, *Cryogenics*, 2011, 51(6), p. 247-252.
3. M. Muralidhar, *et al.*, (Nd, Eu, Gd)-Ba-Cu-O superconductors with combined addition of CeO_2 and Pt, *Supercond. Sci. Technol.*, 2000, 13(6), p. 693-697.
4. W. Zhai, *et al.*, Processing and Properties of Bulk Y-Ba-Cu-O Superconductors Fabricated by Top Seeded Melt Growth from Precursor Pellets Containing a Graded CeO_2 Composition, *Cryst. Growth Des.*, 2015, 15(2), p. 907-914.

I-P15

专题代号: I

Ising Superconductivity and Quantum Phase Transition in Macro-Size Monolayer NbSe_2

Ying Xing, Kun Zhao, Shuaihua Ji, Qi-Kun Xue, and Jian Wang et al.

International Center for Quantum Materials, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China. et al.

Email: jianwangphysics@pku.edu.cn; shji@mail.tsinghua.edu.cn

ABSTRACT: Two-dimensional (2D) transition metal dichalcogenides (TMDs) have a range of unique physics properties and could be used in the development of electronics, photonics, spintronics, and quantum computing devices. The mechanical exfoliation technique of microsize TMD flakes has attracted particular interest due to its simplicity and cost effectiveness. However, for most applications, large-area and high-quality films are preferred. Furthermore, when the thickness of crystalline films is down to the 2D limit (monolayer), exotic properties can be expected due to the quantum confinement and symmetry breaking. In this paper, we have successfully prepared macro-size atomically flat monolayer NbSe_2 films on bilayer graphene terminated surface of 6H-SiC(0001) substrates by a molecular beam epitaxy (MBE) method. The films exhibit an onset

superconducting critical transition temperature (T_c^{onset}) above 6 K and the zero resistance superconducting critical transition temperature (T_c^{zero}) up to 2.40 K. Simultaneously, the transport measurements at high magnetic fields and low temperatures reveal that the parallel characteristic field $B_{c//}(T=0)$ is above 5 times of the paramagnetic limiting field, consistent with Zeeman protected Ising superconductivity mechanism. Besides, by ultralow temperature electrical transport measurements, the monolayer NbSe₂ film shows the signature of quantum Griffiths singularity (QGS) when approaching the zero-temperature quantum critical point.

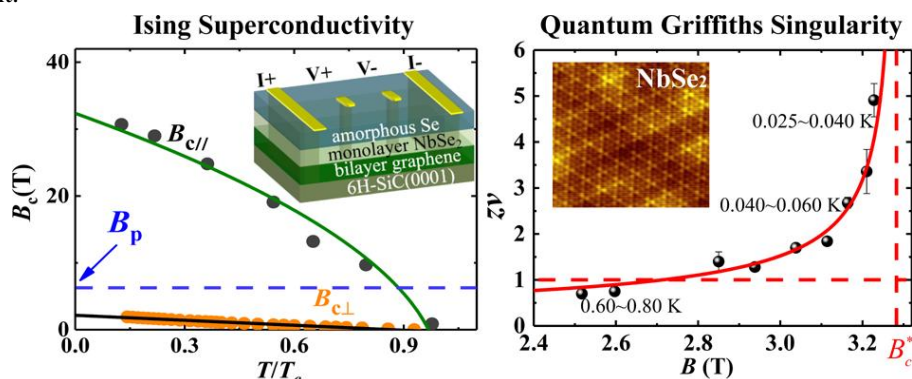


Figure 1 Electrical transport measurements of monolayer NbSe₂ film

KEYWORDS: NbSe₂, transition-metal dichalcogenides, macro-size monolayer film, ultralow temperature and high magnetic field electrical transport, Ising superconductivity, quantum phase transition (QPT)

REFERENCES: [1] Ying Xing *et al.*, Ising Superconductivity and Quantum Phase Transition in Macro-Size Monolayer NbSe₂, *Nano Lett.* 2017, 17, 6802-6807.

ACKNOWLEDGMENTS: The National Basic Research Program of China (grants nos.2013CB934600 and 2017YFA0303302) *et al.*

I-P16

专题代号：I

人工孔洞钉扎磁通涡旋拓扑结构的演变

张安蕾¹, Vladimir N. Gladilin², Victor V. Moshchalkov², 葛军饴^{*1}

1. 上海大学材料基因组工程研究院, 上海 200444, 中国

2. INPAC–Institute for Nanoscale Physics and Chemistry, KU Leuven, Celestijnenlaan 200D, B–3001 Leuven, Belgium

Email: junyi_ge@t.shu.edu.cn

摘要：磁通涡旋由直径大小为 2ξ (ξ : 相干长度) 的正常态芯子和围绕该芯子的环形超导电流所构成。其中环形电流的分布由穿透深度 λ 所决定。磁通涡旋的磁场分布受到相干长度和穿透深度的共同影响。而在具有实际应用价值的超导体中, 磁通涡旋往往被随机的或者人为引入的钉扎源所钉扎, 因而在钉扎源处, 其磁场的分布还将显著受到钉扎源的影响。由此, 钉扎磁通涡旋拓扑结构的研究对基于涡旋钉扎的应用具有重要意义。在该研究中, 我们通过在超导体薄膜中引入不同大小的孔洞, 并通过温度改变相干长度、穿透深度与孔洞之间的比例, 在实空间微纳尺度研究磁通涡旋拓扑结构的演变。同时, 我们结合 Ginzburg-Landau 理论对相关结果进行了拟合, 并与未被钉扎的磁通涡旋形貌随温度的演变行为进行了详细对比。该研究将帮助更好地认识纳米结构超导体中磁通涡旋物质, 并为利用纳米结构超导体设计基于磁通涡旋的量子化器件提供了参考。

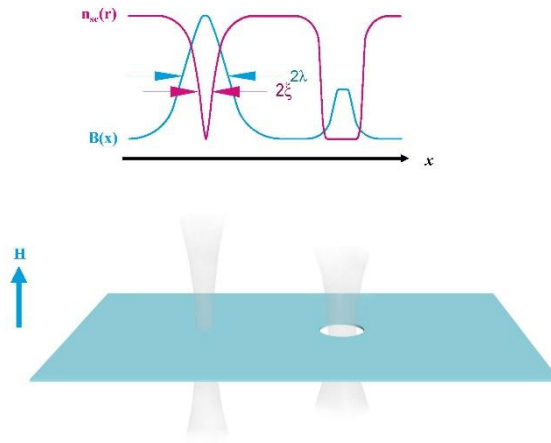


图 1 未被钉扎涡旋和钉扎涡旋示意图

关键词：人造孔洞 涡旋 拓扑结构

参考文献

- [1] A. M. Chang *et al.*, Scanning Hall Probe Microscopy, *Appl. Phys. Lett.* 1992, 61 (16), 1974.
 [2] J. R. Kirtley *et al.*, Variable Sample Temperature Scanning Superconducting Quantum Interference Device Microscope, *Appl. Phys. Lett.* 1999, 74 (26), 4011.

基金项目：该研究得到了上海市高校特聘教授（东方学者）计划和国家自然科学基金（No. 11804217）的支持。

I-P17

专题代号：I

门控对 Sr_2IrO_4 薄膜在真空和大气下电学性质的调控

张静娴、梁根豪、陆勤雯、翟晓芳

合肥微尺度国家实验室，中国科学技术大学，合肥 230026

Email: zjx3039@mail.ustc.edu.cn, xfzhai@ustc.edu.cn

摘要：5d 过渡金属氧化物由于强自旋-轨道耦合和库伦作用，引导了大量关于新型电子相的预测，一直是最近关注的主题之一。5d 过渡金属氧化物的一个显著特征是它们比 3d 和 4d 化合物更加延伸的 d 轨道。较大的电子-晶格耦合，强 p 轨道和 d 轨道杂化以及库仑能 U 的降低使得该系统对小扰动更加的敏感，其中 Sr_2IrO_4 是一个 5d 过渡金属氧化物的代表性材料，吸引了广泛的关注。 Sr_2IrO_4 是 Ruddlesden Popper 系列的单层钙钛矿氧化物，是有着强自旋-轨道相互作用（spin-orbit interaction, SOI）及 $J_{\text{eff}}=1/2$ 的莫特绝缘体。

在本项研究中，我们使用脉冲激光沉积系统（pulsed laser deposition, PLD）在（001） SrTiO_3 衬底上沉积 Sr_2IrO_4 薄膜，之后将样品做成 hall bar 进行门控实验，探究在真空及大气下水分对电阻测试的影响。将样品放入真空腔内并于 120°C 烘烤 48h 除去离子液体中的水分后进行测试 loop，发现电阻变化很小；将样品于大气下进行测试 loop，发现电阻变化大约有 10 倍。证明在大气下测试，大气中的水分及离子液体中的水对测试结果有显著的影响。针对水分影响电阻测试结果，值得进行更深一步的探究。

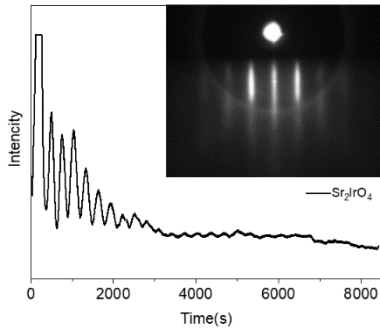


图 1 RHEED 及振荡

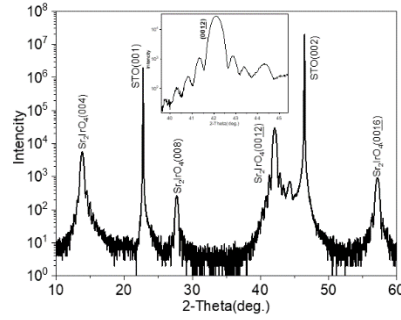


图 2 XRD

关键字: Sr_2IrO_4 , 门控, 自旋轨道耦合

参考文献:

【1】 Lu, C *et al.*, Dual gate control of bulk transport and magnetism in the spin-orbit insulator Sr_2IrO_4 , *Physical Review B*. 2015, 91(10).

【2】 Lu, C *et al.*, Crossover of conduction mechanism in Sr_2IrO_4 epitaxial thin films, *Applied Physics Letters*. 2014, 105(8).

【3】 Ravichandran, J *et al.*, Ambipolar transport and magneto-resistance crossover in a Mott insulator, Sr_2IrO_4 , *J Phys Condens Matter*.

2016, 28(50), 505304.

I-P18

专题代号：I

Photo-induced non-equilibrium response in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ probed by time-resolved terahertz spectroscopy

张思捷¹、王子潇¹、相辉²、姚忻²、刘巧梅¹、时立宇¹、

林桐¹、董涛¹、吴东¹、王楠林¹

¹ 北京大学量子材料科学中心, 北京 100871

² 上海交通大学物理与天文系, 上海 200240

Email: sjzh@pku.edu.cn

We present near- and mid-infrared pump, c-axis terahertz probe measurement on underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($x = 0.45, 0.55$) superconductors. We observe strong pump-induced spectral change in the terahertz frequency range. In the superconducting state, the Josephson edge is removed upon initial photo excitations, yielding evidence for a collapse of superconducting condensate. However, a Josephson plasma edge reappears at frequency lower than the static plasma edge within a short time delay, whose feature becomes more pronounced and shifts slightly to higher energy scale with increasing time delay. Meanwhile, incoherent quasiparticle excitations build up at energy scale above the static plasma edge. Above T_c , much smaller pump-induced-effect is detected. A weak edge-like shape develops in the reflectance spectrum and sustains even above room temperature. We elaborate that weak edge structure above T_c is unlikely to be explained by the photo-induced transient superconductivity. In addition, there is no substantial difference between the near and mid-infrared pump cases both in superconducting and normal phase, which indicates that phonon pumping as a scenario for the photo excitation effect can be excluded.

关键词：超导, 超快光谱学

参考文献

【1】 S.J. Zhang *et al*, Photo-induced nonequilibrium response in heavily underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.45}$ probed by time-resolved terahertz spectroscopy, arXiv: 1904.10381

基金项目：This work was supported by National Natural Science Foundation of China (No. 11888101), the National Key Research and Development Program of China (No. 2017YFA0302904, 2016YFA0300902, 2016YFA0300403).

I-P19

关于二维正方晶格上 dimer 模型 KT 相变机制

齐润泽, 朱津纬, 严正, 周正, 娄捷, 陈焱

复旦大学物理系, 上海复旦大学 200437

Email: 16307110191@fudan.edu.cn

摘要：dimer 模型最早由 R.H.Fowler 和 G.S.Rushbrooke¹ 提出。由于其与双原子分子体系, 阻挫磁体, Valence Bonds Solid 态, 此外, Rokhsar 和 Kivelson 提出了量子 dimer 模型, 出现了 Resonance Valence Bond 态和自旋冰态等新奇物态, 因此近年来对 dimer 模型的研究也引起了广泛兴趣。

我们采用蒙特卡洛的方法对经典 dimer 模型进行了模拟, 主要通过 loop 更新的方法, 探讨了其 Kosterlitz-Thouless 相变的机制。从热力学方面, 二维的 dimer 模型在逐渐升温过程中比热峰值不发散², 通过引入 DSB 序参量(Dimer Symmetry Breaking)的 Binder cumulant, 也可以确定相变温度为 0.65^2 。我们为了探讨其相变过程中对称性的变化, 引入了 column order parameter 这一序参量, 从而能够定量的描述其对称性和有序度随温度的变化, 通过这种方法也确定了其相变点的温度大小。此外发现 dimer 模型从高温临界相变为低 column 相的同时, 对称性也从 $U(1)$ 变为 C_4 。我们从 sine-Gordon 场论模型来理解其 KT 相变的机制, 并发现 dimer 模型与 clock 模型的共同之处。认为在相变温度以上, dimer 模型具有 emergent $U(1)$ 对称性, 通过蒙特卡洛我们研究了 dimer 之间的关联函数, 发现其在临界温度以上以幂次方衰减, 从而有力的证明了 sine-Gordon 模型的正确性。

关键词：dimer 模型 KT 相变 sine-Gordon 模型

参考文献

【1】 R.H. Fowler and G.S. Rushbrooke, Trans. Faraday Soc. 1937, **33**, 1272

【2】 F. Alet and J. L. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. 2005, 94, 235702

I-P20

铋镍双层膜系统中自旋三重态超导态的安德列夫反射谱

尚欣、刘海文、夏钊

北京师范大学物理学系，北京 100875

Email: 201531140007@mail.bnu.edu.cn

摘要：自旋三重态的 p 波超导体由于可以提供在自旋电子学中提供新的应用前景而引起了极大的研究兴趣。其中，拓扑 p 波超导体由于量子计算上的应用前景更是引起了广泛的关注。目前，拓扑 p 波超流以及超导可以分别在 3He 和 Sr_2RuO_4 中实现。对于拓扑材料而言，一个显著的特征是存在无能隙的表面态，而实验上通常采用安德列夫反射谱来测量这一表面态。最近的点接触实验[G. J. Zhao, et al, arXiv:1810.10403]表明在铋镍双层膜中存在自旋三重态的超导态。零偏压下的安德列夫电导峰进一步表明了 ABM 相 p 波超导态的存在。对于 ABM 相超导态来说，其能谱中存在两个无能隙的外尔点。然而，最近的时域 THz 光谱实验结果[Prashant Chauhan, et al, Phys. Rev. Lett. 122, 017002(2019)]表明铋镍双层膜体系的能谱中存在了一个全空间的能隙。此外，铋镍双层膜中的对称性破缺也可能引起不同形式超导态的混合。所以除了 ABM 态之外可能存在其他的超导态，表面态和体态分别对电导的贡献也值得研究。

我们采用了包括 ABM 态以及 ABM 和 S 波混合态在内的两种超导模型来计算了铁磁电极和铋镍双层膜系统间的安德列夫反射电导谱。其中，我们发现纯的 ABM 态以及 ABM 态与 S 波混合型的超导态都可以得到与点接触实验结果相近的电导谱。但是没法解释关于铋镍双层膜的时域 THz 光谱的实验结果。此外，我们发现零能附近的电导峰来源于零能附近的表面态。

关键词：安德列夫反射 自旋三重态超导体 铋镍双层膜

参考文献

- [1] G. Zhao, X. Gong, J. He, J. Gifford, H. Zhou, Y. Chen, X. Jin, C. Chien, and T. Chen, arXiv preprint arXiv: 1810.10403 (2018).
- [2] P. Chauhan, F. Mahmood, D. Yue, P.-C. Xu, X. Jin, and N. Armitage, Physical review letters 122, 017002 (2019)

基金项目：国家自然科学基金项目 (No. 11674028, No. 61774017, No. 11734004 and No. 21421003) ，中国国家重点研究和发展项目 (Grant No. 2017YFA0303300)

I-P21

自旋轨道耦合 Hubbard 模型中的宇称混合超导态及其拓扑性质的团簇动力学平均场理论 (CDMFT) 研究

Xiancong Lu (卢仙聪)¹ and D. Senechal²

¹厦门大学物理科学与技术学院, 厦门 361005

²Département de physique and Institut quantique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada
J1K 2R1

Email: xlu@xmu.edu.cn

摘要：利用团簇动力学平均场方法 (CDMFT)，我们研究了自旋轨道耦合Hubbard模型中的宇称混合超导态的稳定性及其拓扑性质。我们在较宽的掺杂区间内找到了d波和p波超导共存相的稳定CDMFT解。Rashba类型的自旋轨道耦合作用破坏了空间反射不变性，因此可能产生自旋三重态的p波超导。我们的计算表明，随着自旋轨道耦合强度的增大，d波超导序参数逐渐减小，而p波超导序参数由零逐渐增大，可以形成两者的共存相。当电子掺杂浓度大于百分之二十以后，所有超导相都消失。另一方面，我们也研究了外磁场在此系统中的作用。发现增加外磁场使两种超导态的序参数都降低，即外磁场不利于超导态的形成。但是外磁场可以产生非平庸的拓扑性质。我们根据Wang-Zhang的方法，提取了相互作用系统的零频格林函数，构造了等效的无相互作用拓扑哈密顿量，并计算了相应的拓扑不变量。发现d波和p波超导混合态在外磁场下的陈数并不为零，说明这个系统具有非平庸拓扑性质【1】。

关键词：拓扑超导、团簇动力学平均场理论、拓扑态

【1】 Xiancong Lu and David Senechal, Parity-mixing superconducting phase in the Rashba-Hubbard model and its topological properties from dynamical mean-field theory, *Phy. Rev. B*, **98**, 245118 (2018)

I-P22

专题代号：I

FeSe 中电子向列序的第一性原理计算

龙宣宇¹、张顺洪²、王堡^{3,4}、刘峥^{1,4,*}

¹ 清华大学高等研究院, 北京 100084

² 中国科学技术大学国际功能材料量子设计中心, 合肥 230026

³ 北京大学量子材料科学中心, 北京 100871

⁴ 量子物质科学协同创新中心, 北京 100084

* Email: zheng-liu@tsinghua.edu.cn

摘要：与其他铁基超导材料相比，FeSe 的一个特异性是四方对称性的破缺（向列序）和时间反演对称性的破缺（反铁磁序）没有明显的关联。这种向列序的产生机制通常被归结于复杂的非在位相互作用，因此即便在动力学平均场的层次上，第一性原理计算亦从未描述出这一重要的状态。本报告旨在阐明这种认识或应加以更正。我们发现：在具有静态轨道依赖的密度泛函理论计算框架内（如 DFT+U 及杂化泛函），结合初始试探波函数的预条件，仔细搜索可能的非磁性能量极值点，四方对称性确可自发破缺，且简单的铁性轨道序 ($n_{xz}-n_{yz}$) 并非最优解。一个更大胆的预测是：FeSe 中存在一种罕见的电荷多极矩（图 1），而向列序只是它导致的一个结果。由于电荷多极矩同时破缺空间反演，它还应在角分辨光电子谱（图 2，图 3）、中子散射和二次谐波产生实验上带来其他的可观测效应。我们将讨论一些已有实验数据与电荷多极矩的联系。

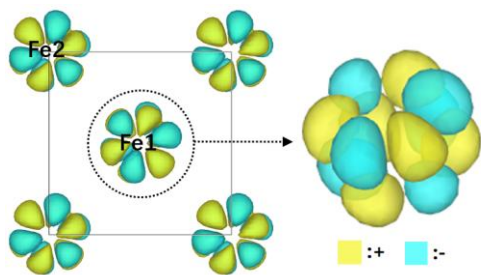


图 1 铁原子附近的电荷密度调制

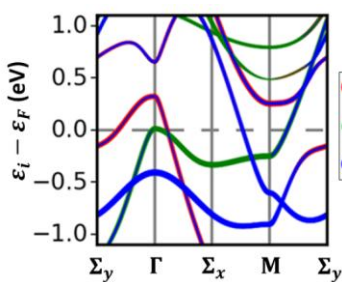


图 2 向列相的能带结构

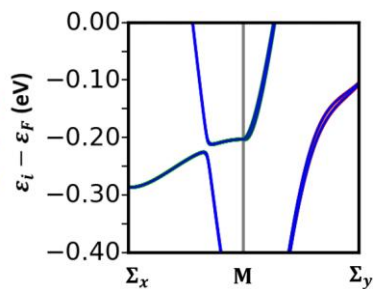


图 3 SOC 导致的能带劈裂

关键词：FeSe 密度泛函理论 向列序

参考文献

- 【1】 Long X, Zhang S, Wang F, and Liu Z. First-principles calculation of the electronic nematicity in FeSe[J]. arXiv preprint arXiv:1907.03562, 2019.

基金项目：国家自然科学基金面上项目 (NO. 11774196)，清华大学自主科研计划，国家重点研究发展计划 (No. 2017YFA0302904)