

推荐 2017 年度国家自然科学奖项目公示【作为合作单位】

中国人民大学拟推荐以下成果申报 2017 年度国家自然科学奖，我所博士毕业生闫循旺作为候选人之一，特进行公示。公示期：2017 年 1 月 4 日至 2017 年 01 月 14 日，公示期内如对公示内容有异议，请您向中国科学院理论物理研究所科研处反映。

联系人及联系电话：唐欣 01062555058

附： 公示内容

推荐国家自然科学基金项目公示（2017年度）

项目名称	铁基超导体的电子结构和磁性质的理论研究
推荐单位	教育部
推荐单位意见： <p>卢仲毅教授主要从事凝聚态系统电子结构计算方法及分子动力学模拟方法的发展和应 用。长期以来，他在凝聚态物理强关联系统和材料结构与特性两个前沿研究领域取得了一系列有国际影响的重要研究成果。</p> <p>自2008年新的铁基高温超导材料发现以来，该材料奇异物理性质的研究成为国际凝聚态物理研究的热点之一。卢仲毅教授和合作者在该领域做出了多项开创性的国际领先的重要研究成果。这些研究成果澄清了铁基超导体的母体以及其电子结构和磁结构及磁相互作用机理。这对铁基高温超导体中电子配对的本质和动力学机理的研究提供了基础和帮助。他与合作者在铁基超导体研究方面发表SCI论文35篇，这些论文被他人引用1377次，其中8篇代表论文他人引用837次。因这些开创性的工作，卢仲毅教授荣获香港大学2010年度‘Daniel Tusi Fellowship’，教育部2012年度长江学者特聘教授，2015年度中国物理学会叶企孙物理奖，和2015年度教育部自然科学一等奖。此外，卢仲毅教授还是国家自然科学基金委2007年度数理学部杰出青年基金获得者和2009年度国家新世纪百千万人才工程入选者。</p> <p>我单位认真审阅了该项目推荐书及附件材料，确认全部材料真实有效，相关栏目均符合国家科学技术奖励工作办公室的填写要求。按照要求，我单位和项目完成单位都已对该项目的拟推荐情况进行了公示，目前无异议。</p> <p>鉴于卢仲毅教授在铁基超导研究方面所做出的一系列国际领先的重要研究工作，依照国家科学技术进步奖授奖条件，我单位推荐该项目申报2017年度国家自然科学基金二等奖。</p>	

项目简介:

铁基高温超导电性是凝聚态物理研究最为关切的热点之一。其核心是高温超导电子配对的机理,这也是量子多体理论研究中的一个基本问题。与铜氧化物高温超导一样,铁基超导也是通过对其母体掺杂实现的。这样要解决这个基本问题,首要澄清的是:铁基超导体母体的基态是什么,是否具有磁或其它长程有序?如果具有磁性,磁性相互作用的机理是什么?自从铁基超导体最初发现以来,该项目一直围绕着这两个首要问题系统地开展理论研究,做出了有国际影响的成果。该研究团队主要的发现点有:

1. 预言了铁基超导体母体是反铁磁半金属,并被实验所证实,这为铁基超导机理的研究提供了正确的出发点。铁基超导体发现的初期,由于样品质量不是很好,实验上没有发现任何与磁相关的迹象。通过理论计算,该团队在国际上第一个预言了铁基超导体的母体是一个反铁磁半金属【代表论文1,他引182次,ESI高被引论文】,随后被中子散射实验所证实【Nature 453, 899(2008)】;基于此,进一步预言了FeTe的基态具有一种新型的双共线反铁磁长程序【代表论文3,他引153次,ESI高被引论文】,随后也被中子散射实验所证实【PRB 79, 054503(2009)】;他们还预言三元铁硒超导体 $KyFe_{2-x}Se_2$ 的母体是反铁磁半导体,并给出了在不同组分下磁有序的结构和电子结构【代表论文5和6,他引80次和78次】,随后也被ARPES实验【PRX 1, 021020(2011)】和中子散射实验【PRL 109, 267003(2012)】所分别证实。
2. 提出砷或硒传递的反铁磁超交换作用是主要的磁相互作用,也是实验所观测到的晶体结构相变的驱动力,并提出相应的反铁磁涨落是导致铁基超导电子配对的主要原因,这已成为研究人员对铁基超导体磁机制的主要认识。既然铁基超导的母体具有磁序,那么磁相互作用产生的机理是什么?通过系统的计算和理论分析,该团队提出铁基超导体中磁性相互作用的本质是铁离子的涨落局域磁矩之间存在通过砷或硒原子传递的超交换作用,这个图像也被称之为洪德耦合增强的磁交换机制,同时提出相应的反铁磁涨落是引起铁基超导电子配对的主要原因【代表论文2,他引179次,ESI高被引论文】。为此,他们提出了描述铁基超导电子相互作用的t-JH-J1-J2模型,这个模型在铁基超导的理论研究中得到广泛的应用【代表论文4,他引99次】。

这些理论工作澄清了铁基超导体中电子结构和磁结构及磁相互作用机理,对铁基高温超导体中电子配对的本质和动力学机理的研究提供了正确的出发点和帮助,得到国际同行的广泛引用和高度评价,特别是8篇代表性论文被他引837次,其中3篇为ESI高被引论文,18篇核心论文共被他引1180次,其中单篇论文最高他引182次,完成人在重要国际会议上做邀请报告26次。期间因这些研究成果,第一完成人获得了香港大学‘Daniel Tusi Fellowship’,2012年度长江学者特聘教授,2015年度叶企孙物理奖,同时第一、二完成人还受邀在赵忠贤院士和于渌院士主编的‘铁基超导体物性基础研究’一书中撰写‘概论’和‘电子结构’两章。

客观评价:

自从铁基高温超导体发现以来该团队在国际上始终处于铁基超导理论研究的最前沿,取得了有国际影响及领先的重要研究成果,其中他们8篇代表性的理论工作被他人引用837次,论文的引文主要发表在 Science, Nature 及其子刊, Advances in Physics, Reviews of Modern Physics, Reports on Progress in Physics, Physical Review Letters, JACS, Advanced Materials 等重要的学术刊物上。如下摘入在重要的实验文章以及在阶段性研究总结的代表性综述文章中对该团队的研究论文的引用,这些引用充分肯定和高度评价了他们的研究成果,特别是他们的理论预言被实验证实或实现。请参阅附件中所带的八篇引文,其中引用和评述处都用黄色特别标出。

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

The parent 1111 and 122 compounds exhibit apparently coupled structural and commensurate antiferromagnetic (AF) transitions, also called 'spin density wave' (SDW) transitions, at ~100–200 K. These transitions result in distinct changes in the magnetic, thermal and electrical properties as illustrated for BaFe₂As₂ in Figure 4 where these transitions are both at the same temperature of 138 K [24]. An AF ground state of LaFeAsO was predicted theoretically early on from first-principles electronic structure calculations [31].

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

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

[31] F. Ma and Z.-Y. Lu, Phys. Rev. B 78 (2008), p. 033111

[175] F.-J. Ma, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, Front. Phys. China 5 (2010), p. 150

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

Therefore one also expects a significant reduction in $M(E_F)$ at low temperatures compared with the bare nonmagnetic values, consistent with the data in Figure 60 for the nonsuperconducting FeAs-based parent compounds. Indeed, electronic structure calculations by Ma *et al.* [175] give $M(E_F)$ values in the nonmagnetic (stripe-ordered AF) state of 3.95 (1.22), 3.27 (1.92), and 3.93 (2.41) states/(eV Γ_0) for both spin directions for CaFe₂As₂, SrFe₂As₂, and BaFe₂As₂, respectively. On the other one sees that the antiferromagnetic diagonal double stripe structure has the lowest energy for FeTe, and the (single) stripe structure as in the 1111-, 111- and 122-type FeAs-based compounds has the lowest energy for FeSe. Due to the lack of Fermi surface nesting in the \mathbf{Q}_{AF} direction and the success of the local moment model in explaining the observed magnetic structure of FeTe, the authors concluded that the local moment model is the most viable model to explain the observed antiferromagnetic structure of FeTe [271]. In addition to the results described in their paper, Ma *et al.* also calculated the wave vector dependent susceptibility $\chi(\mathbf{Q})$ of the itinerant electrons and found that it peaks at the nesting wave vector(s) $\mathbf{Q} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ r.l.u. in tetragonal reciprocal lattice units, as in Figure 4) above for LaFeAsO, but not at the observed diagonal double stripe wave vector $\mathbf{Q} = (\frac{1}{2}, 0)$ r.l.u., thus confirming their local moment magnetism interpretation (Z.-Y. Lu, private communication). As noted above in Section 3.1.4, ARPES data for FeTe are consistent with local moment magnetism rather than itinerant magnetism.

[31], [175], [271]即是代表性论文 1、4、3。

这篇综述文章对铁砷化合物超导体作了全面的总结,该团队的工作被多处重点和大篇幅引用和高度评价。这里摘入四处评述(黄色标注,分别摘自期刊 810, 892, 893, 950 页)。这就是,在论文[31]中第一个预言了铁基超导体的母体 LaOFeAs 是反铁磁半金属,在论文[175]中系统地研究了'122'铁基超导体系列的电子结构和磁序,在论文[271]中预言 FeTe 处于一种新型的双共线反铁磁序,提出用 J_1 - J_2 - J_3 自旋海森堡模型描述,并指出这里的物理机制是通过 Te 或 As 传递的次近邻超交换作用,而不是费米面的嵌套。这一方案已经成为国际上对铁基超导体的反铁磁机制及结构相变驱动力认识的主要观点。

II. 引文之五: 美国加州Berkeley大学中子实验组Jun Zhao et al., "Neutron-Diffraction Measurements of an Antiferromagnetic Semiconducting Phase in the Vicinity of the High-Temperature Superconducting State of $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ ", PRL 109, 267003 (2012).

In summary, we have discovered a semiconducting antiferromagnetic phase ($\text{K}_{0.85}\text{Fe}_{1.54}\text{Se}_2$) with a rhombus iron vacancy order in the background of the 122-type structure [Figs. 2(a) and 2(b)]. The magnetic structure, iron vacancy structure, and magnetic moment ($\sim 2.8\mu_B$) of $\text{K}_{0.85}\text{Fe}_{1.54}\text{Se}_2$ are consistent with first-principle calculations that suggest a band semiconducting ground state in this system [29]. Based on the fact that this new magnetic phase is completely suppressed in the superconducting sample as well as the explicit change in the composition in going from the semiconducting antiferromagnetic to superconducting sample, we conjecture that the superconducting state is derived from the newly discovered magnetic phase upon electron doping. The discovery of a band semiconducting antiferromagnet bordering high T_c superconductivity has profound implications. Clearly, a naive Fermi surface nesting picture for the magnetism is not applicable for this system. Reference [29] suggests that the semiconducting antiferromagnetism can be viewed at the atomic level due to the exchange interactions bridged by Se between Fe local moments. We also notice that the magnetic moment

is $\text{K}_{0.85}\text{Fe}_{1.54}\text{Se}_2$. The iron moments of the stripe-type AFM order and block AFM order are $2.8(1)\mu_B$ and $3.4(1)\mu_B$, respectively. We notice that the moment and stoichiometry of the block AFM order phase in the semiconducting sample are close to those of pure 245 phase of the insulating sample, which is consistent with the fact that they have similar Néel temperatures (Table I) [14]. In a similar $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ sample, ARPES measurements also observed two different phases: an insulating phase with a 500 meV gap and a semiconducting phase with a 40 meV gap [14]. Based on the above observations, we identify the stripe AFM ordered 122 phase as the semiconducting phase discussed earlier. Remarkably, a first-principle calculation has predicted the essentially correct magnetic structure and iron vacancy order in a 122-type structure in $\text{KFe}_{1-x}\text{Se}_2$ [29]. The same calculation also suggests that

[28] M. Wang *et al.*, Phys. Rev. B 84, 094504 (2011).

[29] X.-W. Yan, M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, Phys. Rev. Lett. 106, 087005 (2011).

[30] J. T. Park *et al.*, Phys. Rev. Lett. 107, 177005 (2011).

[29]即是代表性论文 5

这篇实验文章就是用中子散射来确定四分之一铁空位下的晶体结构和磁结构，实验结果是完全证实了该团队的计算结果以及理论预言，即该母体是反铁磁半导体，该文章大篇幅重点引用他们的代表性论文 5，就如该文章题目和文章最后总结所强调那样（标为黄色）。

III. 引文之六：国际知名量子多体和高温超导学者 Igor Mazin, “Trends: Iron superconductivity weathers another storm” *Physics* 4, 26 (2011).

plaquette [13], thus making their combined moment about $13 \mu_B$. These supermoments then order to form a checkerboard. This ordered structure corresponds to a chemical formula $K_2Fe_4Se_5$, or $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$, using a more familiar notation. Interestingly, density functional calculations reproduce this result, and give more insight into it [20]. It appears that iron-iron bonds inside the plaquettes are shorter than those between them (Fig. 2), and this is not a magnetoelastic effect: the calculations predict such a bond contraction even without spin polarization. With the large iron moment also reproduced, the calculated antiferromagnetic state is, most interestingly, a band insulator. In the experiment, the nominal composition $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ is metallic. However, nearby in the phase diagram, an insulating phase does appear. Early publications identify this phase as a Mott insulator, but in view of these calculations it will more likely prove to be a band insulator.

this system is a band semiconductor with a 121 meV gap [29]. Therefore, we believe that the $K_{0.85}Fe_{1.54}Se_2$ phase with the 122 structure discovered here is an antiferromagnetic band semiconductor, in contrast to the Mott insulating cuprates and metallic iron pnictides. We note that the refined potassium concentration deviates slightly from the [19] F. Han, B. Shen, Z.-Y. Wang, and H.-H. Wen, arXiv:1103.1347. [20] X.-W. Yan, M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, arXiv:1102.2215.

[20]即正式发表的：Xun-Wang Yan, Miao Gao, Zhong-Yi LU, Tao Xiang, “Ternary iron selenide $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ is an antiferromagnetic semiconductor”, *Phys. Rev. B* 83, 233205 (2011), 即是代表性论文 6

该团队关于插层三元铁硒化合物超导体的研究预言了其母体是反铁磁半导体而不是 Mott 绝缘体，先放在 arXiv 上，很快就被同行高度关注，如同铁砷化合物超导体情形，在正式发表之前，就已被大量重点引用。这里作者 Mazin 着重指出他们的理论计算工作表明该母体是反铁磁半导体而不是 Mott 绝缘体（标为黄色）。这随后被各种实验如 ARPES，特别是中子散射所证实。

IV. 引文之七：国际著名量子多体和高温超导专家 Elbio Dagotto, “Colloquium: The unexpected properties of alkali metal iron selenide superconductors”, *Reviews of Modern Physics* 85, 849 (2013).

insulator (Cao and Dai, 2011a). For $y = 1$, the Fermi level is near the top of the band gap of $y = 0.8$, leading to a metallic state with a ~ 400 – 550 meV gap slightly below the Fermi energy. Other *ab initio* calculations by Xun-Wang Yan *et al.* (2011) agree with these results, and band structure calculations for $K_xFe_2Se_2$ can also be found in Shen and Ivanovskii (2010) and Yan *et al.* (2011a). The block-AFM ground-state band structure is shown in Fig. 15. In addition, via studies of $K_{0.7}Fe_{1.6}Se_2$ and $K_{0.9}Fe_{1.6}Se_2$, i.e., varying the concentration of K to affect the valence of iron and the associated carrier concentration, it was found that the band structure and magnetic order almost do not change in that range of doping. Then $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ could be considered as a parent compound

which becomes superconducting upon electron or hole doping (Xun-Wang Yan *et al.*, 2011). This is relevant since in (Tl, K)Fe₂Se₂ superconductivity already occurs at $x = 1.7$ or higher (M. H. Fang *et al.*, 2011). However, the issue of phase separation discussed in Sec. III renders the identification of the parent compound far more complicated than naively anticipated.

Recently another possibility was presented. Using neutron diffraction techniques for $K_xFe_{2-y}Se_2$, Zhao *et al.* (2012) proposed the state in Fig. 3 (left panel), with a rhombus-type iron-vacancy order, as the parent compound of the SC state. In this state the iron spins have parallel (antiparallel) orientations along the direction where the iron vacancies are separated by four (two) lattice spacings. This state has ideal composition $KFe_{1.5}Se_2$, iron magnetic moments $2.8\mu_B$, and an AFM band-semiconductor character, as in the first-principles calculations by Yan *et al.* (2011b). FS nesting is not applicable in this state and the large moments suggest that correlation effects cannot be neglected. The semiconducting nature of this state is also compatible with ARPES experiments (F. Chen *et al.*, 2011) that also proposed a semiconductor as the parent compound.

Yan, X.-W., M. Gao, Z. Y. Lu, and T. Xiang, 2011a, *Phys. Rev. B* 84, 054502.

Yan, X.-W., M. Gao, Z.-Y. Lu, and T. Xiang, 2011b, *Phys. Rev. Lett.* 106, 087005.

Yan, Xun-Wang, Miao Gao, Zhong-Yi Lu, and Tao Xiang, 2011, *Phys. Rev. B* 83, 233205.

所标注的三篇文章分别是代表性论文 7、5、6。

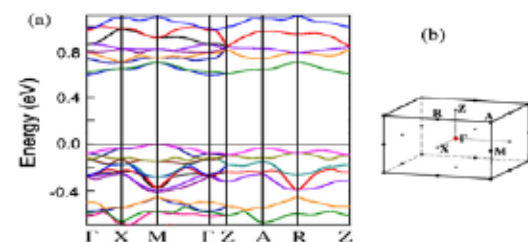


FIG. 15 (color online). (a) Electronic band structure of $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ in the ground state with the 2×2 block-AFM order. The top of the valence band is set to zero. (b) Explanation of the convention followed to label points of the Brillouin zone. These theoretical calculations are carried out in a tetragonal structure with lattice parameters in excellent agreement with experiments. From Xun-Wang Yan *et al.*, 2011.

这篇综述文章对插层所形成的三元铁硒化合物超导体作了全面的总结，该团队的工作被多处重点和大篇幅引用和高度评价。这里摘入两处评述（黄色标注，分别摘自期刊 853 和 858 页）。这就是，在上面三篇论文(Yan, Gao, Lu, and Xiang)中系统地研究了插层三元铁硒超导化合物，预言其母体是反铁磁半导体而不是 Mott 绝缘体，相应计算的电子能带以及带隙宽度被随后的 ARPES 实验所证实(Feng’s group at Fudan)；他们的理论计算进一步给出了相应的磁结构，特别是复杂的根号五乘根号五的区块化棋盘反铁磁序结构，并指出超导是通过对这样的反铁磁半导体的掺杂而实现的；再则，他们所计算的电子能带图被该文引用后，已成为一个标准。

代表性论文专著目录：（按照推荐书表格列出主要内容，不需再做表格）

序号	论文专著 名称/刊名 /作者	影响 因子	年卷页 码 (xx年 xx卷 xx页)	发表时间年 月	通讯作 者	第 一 作 者	国内 作者	SCI 他 引 次 数	他 引 总 次 数	知 识 产 权 是 否 归 国 内 所 有
1	Iron-based layered compound LaFeAsO is an antiferromagnetic semimetal /PHYSICAL REVIEW B / Ma, FJ (Ma, Fengjie); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi)	3.736	2008年 78卷 033111 页	2008年6月	卢仲毅	马 锋 杰	马 锋 杰, 卢 仲 毅	162	182	是
2	Arsenic-bridged antiferromagnetic superexchange interactions in LaFeAsO/PHYSICAL REVIEW B/Ma, F (Ma, Fengjie); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	3.736	2008年 78卷 224517 页	2008年12 月	卢仲毅, 向涛	马 锋 杰	马 锋 杰, 卢 仲 毅, 向 涛	158	179	是

3	First-Principles Calculations of the Electronic Structure of Tetragonal α -FeTe and α -FeSe Crystals: Evidence for a Bicolinear Antiferromagnetic Order/PHYSICAL REVIEW LETTERS/Ma, FJ (Ma, Fengjie); Ji, W (Ji, Wei); Hu, JP (Hu, Jiangping); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	7.512	2009年 102卷 177003页	2009年 5月	卢仲毅, 向涛	马锋杰	马锋杰, 季威, 卢仲毅, 向涛	141	153	是
4	Electronic structures of ternary iron arsenides AFe_2As_2 ($A = Ba, Ca, \text{ or } Sr$)/FRONTIERS OF PHYSICS IN CHINA/Ma, FJ (Ma, Feng-jie); Lu, ZY (Lu, Zhong-yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	2.086	2010年 5卷 150页	2010年 6月	卢仲毅, 向涛	马锋杰	马锋杰, 卢仲毅, 向涛	89	99	是
5	Electronic Structures and Magnetic Order of Ordered-Fe-Vacancy Ternary Iron Selenides $TiFe_{1.5}Se_2$ and $AFe_{1.5}Se_2$ ($A = K, Rb, \text{ or } Cs$)/PHYSICAL REVIEW LETTERS/Yan, XW (Yan, Xun-Wang); Gao, MA (Gao, Miao); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	7.512	2011年 106卷 087005页	2011年 2月	卢仲毅, 向涛	闫循旺	闫循旺, 高淼, 卢仲毅, 向涛	67	80	是

6	Ternary iron selenide $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ is an antiferromagnetic semiconductor/PHYSICAL REVIEW B/Yan, XW (Yan, Xun-Wang); Gao, M (Gao, Miao); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	3.736	2011 年 83 卷 233205 页	2011 年 6 月	卢仲毅, 向涛	闫循旺	闫循旺, 高淼, 卢仲毅, 向涛	66	78	是
7	Electronic and magnetic structures of the ternary iron selenides AFe_2Se_2 (A = Cs, Rb, K, or Tl)/PHYSICAL REVIEW B/Yan, XW (Yan, Xun-Wang); Gao, M (Gao, Miao); Lu, ZY (Lu, Zhong-Yi); Xiang, T (Xiang, Tao)	3.736	2011 年 84 卷 054502 页	2011 年 8 月	卢仲毅, 向涛	闫循旺	闫循旺, 高淼, 卢仲毅, 向涛	45	49	是
8	Surface structures of ternary iron arsenides AFe_2As_2 (A = Ba, Sr, or Ca)/PHYSICAL REVIEW B/Gao,Miao; Ma, Fengjie; Lu,Zhong-Yi; Xiang, Tao	3.736	2010 年 81 卷 193409 页	2010-05-15	卢仲毅, 向涛	高淼	高淼, 马锋杰, 卢仲毅, 向涛	16	17	是
合 计								744	837	

主要完成人情况：（摘自“主要完成人情况表”中的部分内容，公示姓名、排名、行政职务、技术职称、工作单位、完成单位、对本项目技术创造性贡献）样式如下：

1. 姓名，排名 1，主任，教授，工作单位：清华大学，完成单位：北京大学，是该项目主要负责人，对发现点 1、2、3 均有重要贡献，具体****

1. 卢仲毅，教授，工作单位：中国人民大学物理系，完成单位：中国人民大学物理系

本项目的负责人。提出了项目的总体学术思想，制定了总体研究方案，和博士生一起实施了研究方案。对《重要科学发现》中的第1、2、3、4项科学发现均做出了创造性突出贡献。全部8篇代表性论文的通讯作者。

2. 向涛，研究员，工作单位：中国科学院物理研究所，完成单位：中国科学院物理研究所

本项目的完成人之一。与第一申请人共同提出了项目的整体计划，确定研究方向和选题，参与主持了项目的总体实施和项目的主要研究工作。对《重要科学发现》中的第2、3、4项科学发现做出了创造性突出贡献。代表性论文2-8的通讯作者。

3. 马锋杰，研究员，工作单位：北京师范大学，完成单位：中国科学院理论物理研究所

本项目的完成人之一。在有关铁砷超导材料的电子结构和磁性质的计算方面开展工作。对《重要科学发现》中的第1、2、3项科学发现做出重要贡献，第1、2、3、4篇代表性论文的第1作者，第8篇代表性论文的直接合作者。

4. 闫循旺，副教授，工作单位：安阳师范学院，完成单位：中国科学院理论物理研究所

本项目的完成人之一。在有关碱金属元素插层所形成的三元铁硒化合物超导材料的电子结构和磁性质的计算方面开展工作。对《重要科学发现》中的第4项科学发现做出重要贡献，第5、6、7篇代表性论文的第1作者。

5. 高淼，副教授，工作单位：宁波大学，完成单位：中国人民大学物理系

本项目的完成人之一。在有关铁砷超导材料表面的电子结构和磁性质的计算方面以及碱金属元素插层所形成的三元铁硒化合物超导材料的电子结构和磁性质的计算方面开展工作。对《重要科学发现》中的第4项科学发现做出重要贡献，第8篇代表性论文的第1作者，第5、6、7篇代表性论文的直接合作者。

完成人合作关系说明：

卢仲毅和向涛分别作为项目的第一和第二完成人合作并作为共同通讯作者完成了代表性论文 2-8 的研究工作，包括确定代表性论文 2-8 的研究方向和选题，以及解析推导、构建物理图像、分析讨论计算结果、完成论文写作等具体工作。

马锋杰是卢仲毅的研究生，在有关铁砷超导材料的电子结构和磁性质的计算方面开展工作，完成了代表性论文 1-4 的相关计算工作和计算结果的分析。

闫循旺是卢仲毅的研究生，在有关经碱金属元素插层所形成的三元铁硒化合物超导材料的电子结构和磁性质的计算方面开展工作，完成了代表性论文 5-7 的相关计算工作和计算结果的分析。

高淼是卢仲毅的研究生，在有关铁砷超导材料表面的电子结构和磁性质的计算方面以及经碱金属元素插层所形成的三元铁硒化合物超导材料的电子结构和磁性质的计算方面开展工作，完成了代表性论文 8 的相关计算工作和计算结果的分析，参与了代表性论文 5-7 的相关计算工作和计算结果的分析。

中国科学院理论物理研究所

2017 年 1 月 4 日