

铁基超导体的角分辨光电子能谱研究进展

丁洪[†] 董靖

(中国科学院物理研究所 北京凝聚态物理国家实验室 北京 100190)

摘要 最近发现的超导转变温度高达 55K 铁基高温超导体结束了铜氧化物在超导转变温度高于 40K 的领域一统天下的局面. 与铜氧化物高温超导体一样, 超导配对对称性对于理解这一新的体系有着重要的作用. 文章利用角分辨光电子能谱实验手段, 全面地研究了铁基材料的能带结构和费米面以及它们随载流子掺杂浓度变化的演化过程, 发现了铁基超导体中依赖费米面的无节点的超导能隙, 指出了费米面间的相互作用对超导配对起着关键作用.

关键词 铁基超导体, 超导能隙, 配对对称性, 费米面嵌套

Angle resolved photoemission spectroscopy of iron pnictides

DING Hong[†] DONG Jing

(Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract The recently discovered iron pnictide compounds (critical temperature $T_c = 55$ K) ended the monopoly of cuprates in the family of high- T_c superconductors. As with cuprates, the pairing mechanism is important for understanding the new system. In this article, we employ high-resolution angle-resolved photoelectron spectroscopy to characterize the band structure and Fermi surface topology of iron pnictides, as well as their evolution with dopant concentration. We observe isotropic but Fermi-surface-dependent superconducting gaps in this system, and propose that inter-Fermi-surface interactions play an important role in the pairing mechanism.

Keywords iron pnictides, superconducting gap, pairing symmetry, Fermi surface nesting

1 引言

1.1 背景介绍

最近发现的铁基高温超导体结束了铜氧化物在超导转变温度高于 40K 的领域一统天下的局面, 目前发现的铁基超导体最高超导转变温度达到了 55K^[1]. 与铜氧化物高温超导体一样, 超导配对对称性对于理解这一新的体系有着重要的作用. 但与铜氧化物高温超导体不同, 铁基超导体母体材料为自旋密度波半金属^[2,3], 可以通过元素替换引入电子或空穴载流子或施加压力, 形成超导体. 母体材料在低温下会发生结构相变和磁相变, 这种相变的驱动力可能来源于位于布里渊区中心和边角的两个不同费米面的嵌套, 这两个费米面由 (π, π) 反铁磁特征波矢连接. 随着对多个铁基材料体系研究的进一步深入, 人们更加迫切地想要了解此类材料最重要的问题, 那就是如何通过载流子的引入实现从反铁磁半金属母体到超导体的演化, 以及超导形成的驱动力是什么.

1.2 实验原理

角分辨光电子能谱 (angle resolved photoemission spectroscopy, ARPES) 是利用光电效应来研究物质电子结构的最直观实验手段之一. 1887 年德国物理学家赫兹发现一束光照射在样品表面, 当入射光频率高于特定阈值 (功函数) 时, 表面附近的一些电子会脱离样品, 成为自由电子, 这就是光电效应. 角分辨光电子能谱实验是利用惰性气体灯或同步辐射光作为光源, 照射到样品上, 通过探测出射光电子的能量及角度分布来表征固体电子结构 (见图 1). 图 1(a) 为实验示意图, 一束光打出的光电子被探测器收集, 探测器通过采集出射光电子的能量和角度分布信号, 就可以分析得到不同能量的电子在动量空间的分布, 这样也就可以了解能带的色散关系 (图 1(b)).

2009-07-13 收到

[†] 通讯联系人, Email: dingh@aphy. iphy. ac. cn

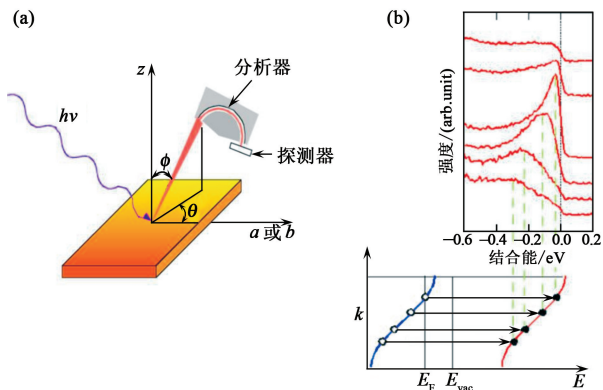


图1 角分辨光电子能谱原理图

2. 铁基材料的角分辨光电子能谱研究

2.1 能带结构和费米面

根据理论计算,铁基材料费米面附近的电子态主要由Fe的3d电子提供,Fe的5个3d轨道全部参与导电,因此,铁基超导体是一个多带复杂系统.在布里渊区中心 Γ 点和边角 M 点,分别有空穴型费米面和电子型费米面^[4].角分辨光电子能谱实验观察到了最佳掺杂的 $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ 样品在正常态时的能带结构,发现了4条跨越费米能的能带,其中两条为围绕着 Γ 点的空穴型费米面,两条为围绕着 M 点的电子型费米面^[5],见图2.图2(a)为50K时沿 $\Gamma-M$ 方向的能量分布曲线,可见在 $\Gamma-M$ 方向上,能带有明显的色散.当温度降到更低(15K)时,在 Γ 点附近能清楚地看到靠近费米面处有两个类空穴型能带(见图2(b));图2(c)为费米能附近 $\pm 10\text{meV}$ 处积分强度在二维布里渊区投影的费米面(黄色到黑色表示强度由强到弱),蓝色点表示能带跨越费米能的点;图2(d)为实验曲线(圆圈)与紧束缚模型计算结果(实线)的对比,可见小的空穴型费米面与两个相互杂化的电子型费米面有较好的嵌套,其嵌套波矢正是 (π, π) 反铁磁自旋密度波波矢.

2.2 超导能隙的对称性

除了能带结构,超导体的配对称性和与轨道的依赖关系也是我们关心的重点.随着温度降低到超导转变温度以下,能看到最佳掺杂的 $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($T_c = 37\text{K}$) 在费米波矢附近的能量分布曲线的前端边随着温度降低在移动(见图3(a)),说明有超导能隙打开.为了更清楚地研究超导能隙的情况,我们扣掉了费米分布函数的影响,将 α 能带的能量分布曲线对称化,得到图3(b),从其中能够清楚

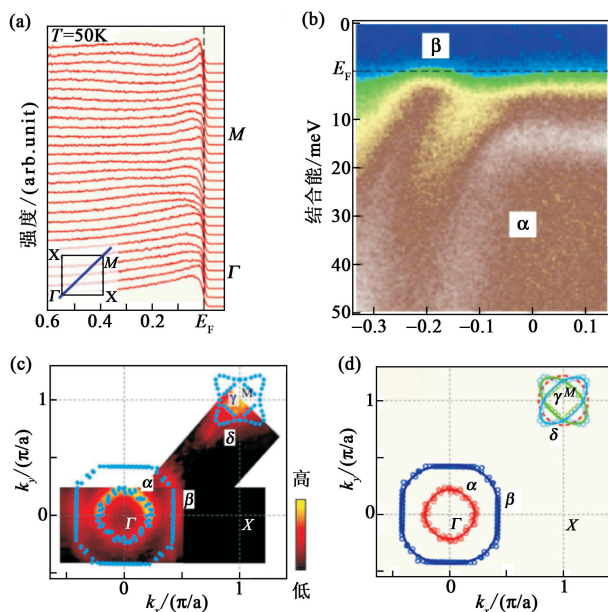


图2 $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ 能带结构 (a) 50K时沿 $\Gamma-M$ 方向的能量分布曲线;(b)15K时 Γ 点附近的强度曲线,能清楚地看到靠近费米面处有2个类空穴型能带;(c)费米能附近 $\pm 10\text{meV}$ 处积分强度在二维布里渊区投影的费米面以及跨越费米能的点(蓝色);(d)实验曲线与紧束缚模型计算结果的对比,可见小的空穴型费米面与2个电子型费米面有较好的嵌套(虚线圆圈为 α 费米面经过 (π, π) 的平移,其嵌套波矢是 (π, π) 自旋密度波波矢

地看到准粒子峰位从7K到30K基本不变,大约为 12meV ;当温度从35K升到40K时,准粒子峰迅速向费米能移动并最终消失^[6],也就是说,在 T_c 附近很小的温度区间内,超导能隙迅速消失.实验表明, $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ 样品具有2个不同的超导能隙:较大的能隙($\Delta \sim 12\text{meV}$)处在小的类空穴和类电子费米面上;较小的能隙($\Delta \sim 6\text{meV}$)位于一个大的类空穴费米面上^[6].后续的实验还发现,布里渊区 M 点周围还有一个大的电子型费米面,其能隙的大小约为 11meV ,与内电子费米面和内空穴费米面上的能隙大小相当^[7].图3(c)为超导能隙在 α 和 β 费米面不同角度上的分布,可见 α 和 β 费米面上的超导能隙的大小基本为各向同性的,并且没有节点.图3(d)显示了超导能隙在 γ 和 δ 费米面不同角度上的分布,这两个费米面上的超导能隙同样也是各向同性的.

2.3 费米面间相互作用对超导配对和能隙的影响

2.3.1 最佳空穴掺杂

对于最佳空穴掺杂样品 $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$,计算不同能带上耦合系数 $2\Delta/k_B T_c$,得到 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ 四个能带上的耦合系数分别为7.7, 3.6, 7.7, 7.2,

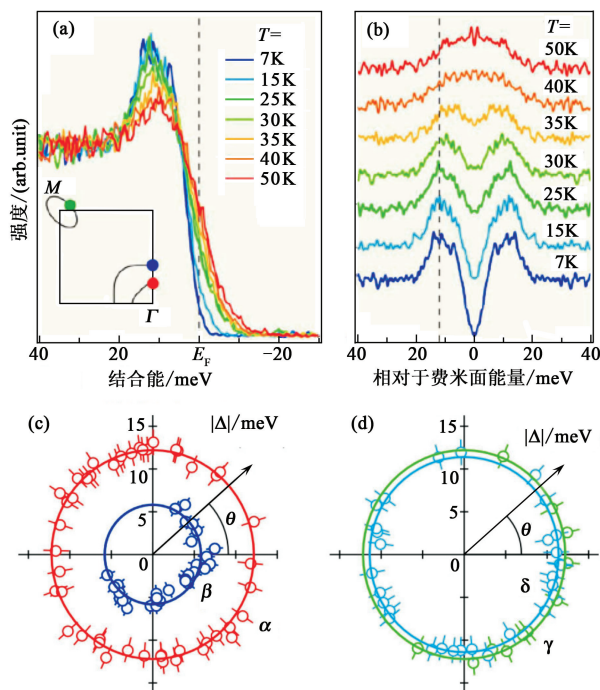


图3 (a) $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ 能量分布曲线; (b) 对称化的能量分布曲线; (c), (d) 为超导能隙在费米面不同位置上的大小

除了 β 能带上的耦合系数较小外, 其他三个能带的 $2\Delta/k_B T_c$ 值均超过 BCS 理论预期值. 图 4 示意地画出了 $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ 单晶样品中的电子结构和能隙大小: 首先, 这是一个多能带系统; 其次, 当温度降低到低于体材料超导转变温度时, 不同费米面上同时打开了大小不等但各向同性的超导能隙. 注意到分别位于 Γ 点和 M 点周围的 α 和 γ, δ 费米面, 若将 α 平移一个 (π, π) 特征波矢, 则 α 与 γ 或 δ 能够较好地发生嵌套, 见图 2(d), 而这个特征波矢也是母体样品中反铁磁自旋密度波不稳定性产生的特征波矢. 由此可见, 对于空穴型铁基超导体来说, 配对强度随着不同费米面的嵌套而增加 (α 与 γ, δ), 而对于非嵌套的费米面 (β), 其配对强度则较弱.

2.3.2 最佳电子型掺杂

以上讨论了空穴型铁基超导材料的电子结构和能隙情况, 那么对于另一个方向的掺杂样品, 即电子型铁基超导体又是怎样的情况呢? 以 $\text{BaFe}_{1.85}\text{Co}_{0.15}\text{As}_2$ 样品 ($T_c = 26\text{K}$) 为例^[8], 对于最佳电子型掺杂的样品, 其费米面变化情况应该和空穴型的样品相反, 也就是说, 位于布里渊区中心的空穴型费米面随着电子的掺杂变小, 而位于布里渊区边角的电子型费米面应该随着电子的引入而变大, 那么此时原来与 γ 或 δ 发生嵌套的费米面 α 不再满足嵌套条件, 而变小的 β 则变得满足与 γ 或 δ 发生嵌套的条

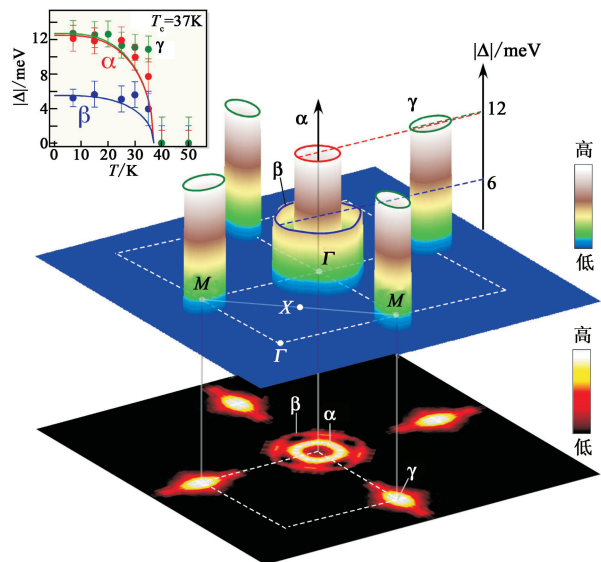


图4 三维超导能隙在不同费米面上的分布(大图)及其随温度的演化(小图)

件, 其配对强度 $2\Delta/k_B T_c$ 也从原来的 3.6 变成了 6. 图 5 给出了电子型超导体的超导能隙及费米面的情况. 图 5(a) 为 β 费米面费米波矢处 (插图红点处) 能量分布曲线随温度的变化, 在超导转变温度前后能够看到谱线前端边的移动, 意味着超导能隙的打开. 图 5(b) 显示了空穴和电子费米面上超导能隙随温度的变化, 在空穴掺杂样品中, 较小的 β 费米面上的能隙在电子掺杂的样品中变得较大 (约 6.7 meV). 图 5(c) 显示了 ARPES 得到的电子型铁基超导体费米面分布情况. 图 5(d) 为 8K 时空穴和电子型费米面上打开的超导能隙随角度的变化, 仍然为各向同性的.

2.3.3 对过掺杂样品的研究

基于以上对空穴和电子掺杂两个方面样品的讨论, 我们认为, 费米面嵌套导致了强的配对相互作用, 这两种情况可以用图 6 示意地给出. 当空穴掺杂到达一定浓度时, 布里渊区中心 Γ 点周围的较小空穴型费米面 α , 通过 (π, π) 特征波矢与布里渊区边角 M 点周围的 γ 或 δ 发生嵌套, 见图 6 下半部分红色图; 随着空穴浓度的减小, 电子掺杂浓度的增加, 布里渊区中心的空穴型费米面逐渐的减小, M 点周围的电子型费米面逐渐增大, 到达一定程度时, 布里渊区中心较大的费米面 β 满足了与 γ 或 δ 发生嵌套的条件, 形成了电子型的超导体, 见图 6 上半部分蓝色图. 由此推断, 无论是在电子掺杂端, 还是在空穴掺杂端, 当电子或空穴的掺杂浓度足够高时, 必定会有某一个或两个费米面消失. 为此, 我们又对过掺杂样

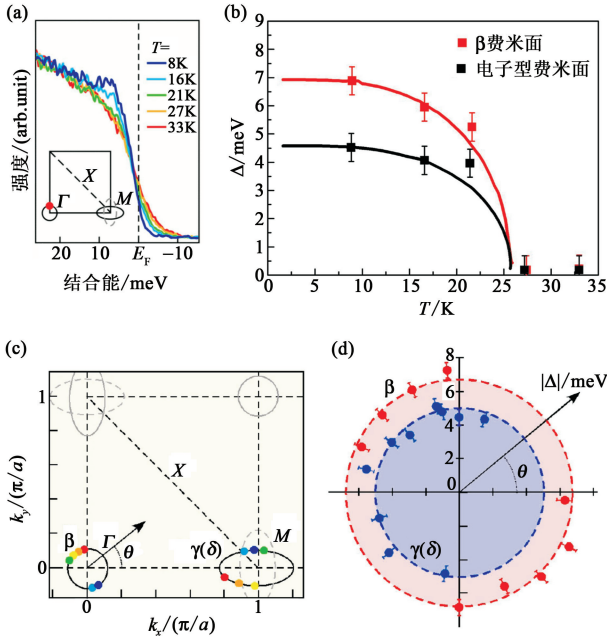


图 5 BaFe_{1.85}Co_{0.15}As₂ (a)M 点周围能量分布曲线边随温度的变化; (b) 空穴和电子费米面上超导能隙随温度的变化; (c) ARPES 得到的费米面情况; (d) 8K 时空穴和电子型费米面上打开的超导能隙随角度的变化。

品进行了角分辨光电子能谱的测量^[9,10], 图 7 给出了过掺杂样品的电子结构图. 图 7(a) 显示了空穴型过掺杂样品的情况, 对于 KFe₂As₂ 样品 ($T_c \sim 3$ K), 布里渊区中心的 2 个空穴型费米面变大, 布里渊区边角处的电子型费米面消失, 取而代之的是一个新发展出来的空穴型费米面; 图 7(b) 所示为过掺杂电子型超导体的电子结构, 当 BaFe_{2-x}Co_xAs₂ 样品中 Co 的掺杂含量到达 0.3 时 ($T_c \sim 0$ K), M 点附近的电子型费米面膨胀而布里渊区中心的空穴型费米面则沉到了费米能级以下. 以上两种情况, 费米面不再满足发生嵌套的条件, 因此超导也就不再发生. 这表明电子和空穴费米面的嵌套与超导配对有着密切的联系, 费米面间的相互作用对于超导配对起着重要的作用。

3 结论

以上结果可用图 8 示意表示; 对于母体样品(见图 8(a)), 位于布里渊区中心周围的 2 个空穴型费米面和位于布里渊区边角的 2 个电子型费米面, 都能够较好地被 (π, π) 反铁磁特征波矢连接, 发生嵌套, 此时会发生自旋密度波不稳定性; 进行掺杂后, 随着费米能的移动, 能带也相应地随之发生变化, 对于空穴掺杂, 费米能下移, 位于布里渊区中心的空穴型费米面变大, 位于布里渊区边角的电子型费米面

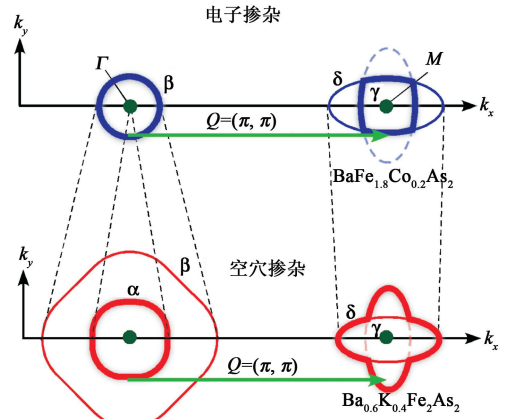


图 6 费米面嵌套条件随掺杂不同的变化情况(Q 为特征波矢)

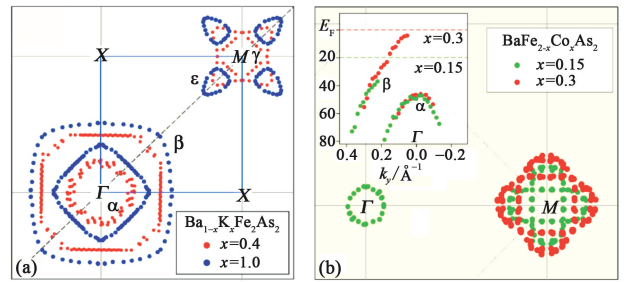


图 7 过掺杂样品的电子结构

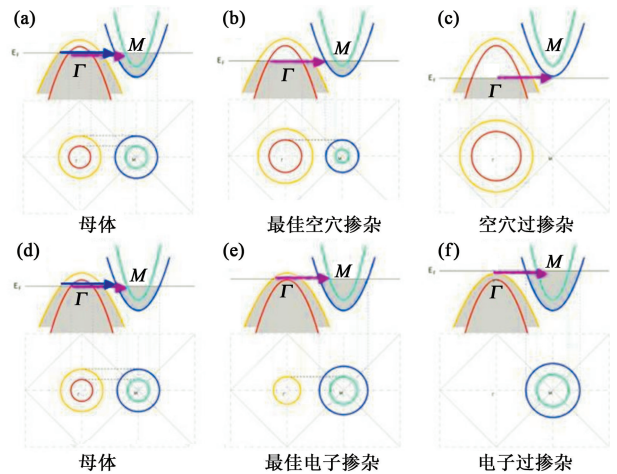


图 8 铁基材料随载流子掺杂的能带演化示意图

变小, 当掺杂到一定浓度时, 布里渊区中心外部较大的空穴型费米面与布里渊区边角内部的电子型费米面满足较好的嵌套条件, 导致最佳超导(图 8(b)); 随着掺杂进一步增加, 最终电子型的费米面会消失, (π, π) 电子散射不再满足, 超导也随之消失(图 8(c)); 同样地, 对于电子掺杂, 也有类似的现象, 只不过电子掺杂导致费米能上移, 最终空穴型费米面消失, 见图 8 中的(d)–(f)。

根据上述讨论,我们认为铁基超导体的超导能隙为无节点的各向同性能隙,支持 s 波反相位配对对称性^[11]. 费米面间的相互作用对超导配对起着关键的作用,费米面的嵌套引起了强配对性.

参考文献

- [1] Ren Z A, Che G C, Dong X L *et al.* Europhys. Lett. , 2008, 83:17002
 [2] de la Cruz C, Huang Q, Lynn J W *et al.* Nature ,2008, 453:899
 [3] Dong J, Zhang H J, Xu G *et al.* Europhys. Lett. ,2008, 83: 27006
 [4] Singh D J. Phys. Rev. B, 78: 094511

- [5] Ding H, Nakayama K, Richard P *et al.* arXiv, 2008, 0812:0534v1
 [6] Ding H, Richard P, Nakayama K *et al.* Europhys. Lett. , 2008, 83:47001
 [7] Nakayama K, Sato T, Richard P *et al.* Europhys. Lett. , 2009, 85:67002
 [8] Terashima K, Sekiba Y, Bowen J H *et al.* Proceedings of the National Academy of Sciences,2009, 106: 7330
 [9] Sato T, Nakayama K, Sebiba Y *et al.* arXiv, 2008, 0810: 3047
 [10] Sekiba Y, Sato T, Nakayama K *et al.* New J. Phys. , 2009, 11: 025020
 [11] Mazin I I, Shngh D J, Johannes M D *et al.* Phys. Rev. Lett. , 101: 057003

• 物理新闻和动态 •

利用激光测量晕核半径

欧洲和北美的物理学家测量了一种异常的铍同位素的半径. 这种铍同位素含有一个远离核心的中子,这种核称为晕核. 虽然此前测定过其他“晕”核的半径,但这回是首次测量具有单个晕中子的核. 研究人员发现,铍-11 的晕中子平均距核心大约 7fm(7×10^{-15} m),而核心本身半径为 2.5fm 左右.

晕核是 1985 年发现的,晕核有一个普通的核心加上一个或更多的大部分时间都远离核心运动的晕中子. 例如,锂-11 晕核的直径几乎与重得多的铀核的直径一样大. 晕核的直径如此之大的原因是将晕中子束缚在核心上的能量只有 100 keV,大约是将中子束缚在普通核上的能量的十分之一.

测量晕核的大小是很困难的,这是因为晕核的寿命很短,而且中子没有电荷,晕中子不易与实验探针相互作用.

最好的测量方法是研究原子或离子中束缚在晕核上的电子能级微小的“体积移位”(volume shift),这种移位大约为电子能级能量的十亿分之一,是由于晕中子与核心相对运动,使得对于电子来说,核心像是变模糊了的正电荷. 这就意味着,含有晕核的铍-11 的铍原子的电子能级与含有一般铍-7、铍-9 或铍-10 核的铍原子的电子能级相比有微小的变化.

这种体积移位可以用来计算正电荷模糊的半径,从而可以计算晕中子与核心之间的平均距离.

虽然物理学家已经测量了氦和锂的晕同位素的这种移位,但是由于铍原子中有 4 个电子,对于铍-11 核的实验变得更为复杂.

原来电子的能级也受它所引起的“质量移位”(mass shift)的影响,部分是由于核与电子的关联运动之间的相互作用. 这种质量移位大约是体积移位的 1000 倍,而且随着电子数目的增加越来越难计算. 这一问题通过研究 Be^+ 离子(只有 3 个电子)而得到一定程度的简化.

新的研究工作是由德国 Mainz 大学的 Wilfried Nörtershäuser 及他的来自加拿大和瑞士的同事在 CERN 的 ISOLDE 装置上完成的(有关论文发表在 Phys. Rev. Lett. , 2009, 102: 062503).

实验通过用 1.4GeV 的质子束轰击碳化铀靶来产生 4 种不同的铍的同位素(Be-7,铍-9,铍-10 和铍-11). 用激光将所生成的这些同位素电离并加速到 50 keV. 再用两束紫外激光打到离子上,引起电子能级的跃迁. 其中一束激光迎着离子运动方向,另一束激光则从相反方向,即从离子后面射到离子上,以消除实验中离子动能的不确定性.

铍的电子吸收某些激光后跃迁到较高的能级上. 当电子跳回原来能级时,通过“共振荧光”过程发射与激光相同波长的光. 但是晕同位素铍-11 吸收激光后再发射的光的波长与一般铍的同位素发射的光有微小的差别. 这是由同位素移位引起的. 这种移位是质量移位与体积移位之和.

研究小组使用一种叫做频率梳的仪器测定了这种微小的移位. 通过将铍-11 的共振波长与其他铍的同位素相比较,并进行质量移位修正,得到体积移位. 从而得出结论认为,晕中子距核心大约为 7fm. 核心的直径约为 2.5fm.

(树华 编译自 PhysicsWorld News, 9 March 2009)