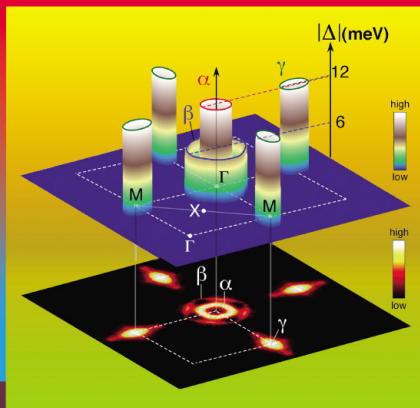


物理

第 38 卷 第 9 期 2009



- 铁基超导体专题
- 纪念叶企孙先生诞辰 110 周年
- “无理”的物理

物理

(WULI)

月刊·1972年创刊

国家科技部“中国科技论文统计源期刊”
(中国科技核心期刊)

国家自然科学基金委员会数理学部资助
中国科协精品科技期刊工程资助

主 管 中国科学院
主 办 中国物理学会
中国科学院物理研究所
协 办 国家自然科学基金委员会
数理科学部
中国工程物理研究院

主 编 冯世平
出 版 《物理》编辑部
地 址 北京 603 信箱,100190
电 话 (010)82649470,82649266
传 真 (010)82649029
广告业务 (010)82649266

Email:physics@iphy.ac.cn

Http://www.wuli.ac.cn

印刷装订 北京科信印刷厂

国内统一刊号 CN 11-1957/O4

国内邮发代号 2-805

国内定价 20.00 元

总 发 行 北京报刊发行局

订 购 处 全国各地邮局

国际标准刊号 ISSN 0379-4148

国外代号 M51

国外总发行 中国国际图书贸易总公司
(北京 399 信箱 100044)

广告经营许可证 京海工商广字
第 0335 号

出版日期 2009 年 9 月 12 日

© 2009 版权所有

第 38 卷

第 9 期

2009 年 9 月

目 次

铁基超导体专题

- 铁基高温超导体研究进展 陈仙辉(609)
铁基超导体体系中的竞争序 王楠林(617)
铁新超导材料的合成研究
..... 闻海虎 牟刚 祝熙宇 韩飞 程鹏 沈冰 曾斌(624)
铁基高温超导体的超导能隙和自旋涨落:核磁共振研究 郑国庆(632)
铁基超导体的角分辨光电子能谱研究进展 丁洪 董靖(639)
铁基超导体中的长程反铁磁序 李世亮 戴鹏程(644)
第一原理计算在铁(镍)基超导体中的应用
..... 徐刚 戴希 方忠(651)

纪念叶企孙先生诞辰 110 周年

- 纪念叶企孙先生 叶铭汉(661)
大音希声,大象无形——纪念叶企孙老师 110 周年诞辰 李政道(669)
实践叶企孙先生教育思想 朱邦芬 王青(671)

物理学咬文嚼字

- 物理学咬文嚼字之二十七:熵非商—the Myth of Entropy 曹则贤(675)

学生园地

- “无理”的物理 罗会仟(681)

中国物理学会通讯

- 2008—2009 年度胡刚复、饶毓泰、叶企孙、吴有训、王淦昌、谢希德、
周培源物理奖获奖者获奖成果介绍 (687)

书评和书讯

- 科学出版社物理类重点书推荐 (616)
北京大学建校 110 周年物理人物图书系列 (660)
《北京大学物理学丛书》书目 (691)

招生招聘

- 法国国家科研中心 CEMES-CNRS 研究所招收博士信息(692) Louisiana State
University Energy Frontier Research Center 招聘博士后信息(692) 香港中文大学
物理系招生信息(693) 北京大学物理学院 2009 年度招聘启事(694) 半导体超晶
格国家重点实验室诚聘英才(695) 首都师范大学太赫兹光电子学省部共建教育
部重点实验室诚聘英才(695) 中国科学院物理研究所 2009 年度人才招聘启事
(696) 南京大学固体微结构国家重点实验室诚聘英才(696)

物理新闻和动态

- 由冷原子云产生激光(云中客,638) 利用激光测量晕核半径(树华,643) 新
一代中子装置将建在瑞典(树华,670) 噪声的随机共振(云中客,690)

读者和编者 更正(631) 《物理》第九届编委会(698)

封面故事 (623)

- 广告 青岛大一隔振设备有限公司(封底) 大恒新纪元科技有限公司(封二)
FEI 香港有限公司(封三) 北京汇德信科技有限公司(插 1) 先锋科技
股份有限公司(插 2) 科艺仪器有限公司(插 3) 大连齐维科技发展有限
公司(插 4、插 5) 北京优赛科技有限公司(插 6) 北京卓立汉光仪器有
限公司(插 7) Stanford Research Systems(插 8) 顾特服剑桥有限公司(插
9) 第十四届中国国际激光、光电子及光电显示产品展览会(插 10) 慕尼
黑上海激光·光电展(插 11) 相干(北京)商业有限公司(插 12) 美国量
子设计公司(夹插) 北京赛凡光电仪器有限公司(倒插 1) 上海格奥光电
技术有限公司(倒插 2) 北京欧普特科技有限公司(第 686 页) 镭宝光电
技术有限公司(第 697 页)

铁基超导体中的长程反铁磁序*

李世亮^{1,†} 戴鹏程^{1,2,3,††}

(1 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)

(2 田纳西大学物理与天文系 田纳西 美国 37996-1200)

(3 橡树岭国家实验室中子散射中心 田纳西 美国 37831-6393)

摘要 文章回顾了用中子散射技术对铁基超导体中所存在的三维长程反铁磁序进行研究的进展。大多数铁基超导体母体的晶体结构在温度降低时都经历了从四方相变化到正交相或单斜相的结构相变。在此相变温度之下,自旋系统也从顺磁变化到三维长程反铁磁。在掺杂之后,结构相变和磁相变都被压制,而超导则最终出现。文章详细介绍了各种母体中的三维反铁磁结构及其自旋波频谱,并讨论了掺杂对反铁磁相变和晶格相变的影响。

关键词 铁基超导体, 中子散射, 反铁磁

Long-range antiferromagnetism in Fe-based superconductors

LI Shi-Liang^{1,†} DAI Peng-Cheng^{1,2,3,†}(1 *Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)(2 *Department of Physics and Astronomy, The University of Tennessee, Knoxville, Tennessee 37996-1200, USA*)(3 *Neutron Scattering Science Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831, USA*)

Abstract We review neutron scattering studies on the long-range antiferromagnetism in Fe-based superconductors. On cooling from room temperature, most parent compounds of these materials exhibit a tetragonal to orthorhombic/monoclinic structural transition. The system also changes from paramagnetism to a long-range antiferromagnetism. Doping holes or electrons suppresses both transitions and leads to the appearance of superconductivity. We describe the structure and spin wave spectra of various undoped materials, and discuss how the structural and magnetic transitions are affected by the doping.

Keywords Fe-based superconductors, neutron scattering, antiferromagnetism

1 引言

超导体中磁有序和自旋涨落的现象一直都是凝聚态物理学中的研究热点之一,尤其是在高温超导体发现之后。高温超导体的母体是三维反铁磁的莫特绝缘体,而其铜氧面上的短程自旋关联在超导区域也一直存在^[1]。在对于这种自旋关联的起源以及在多大程度上它和铜氧化合物的超导机理相关联的这些问题上,当我们的认识仍然模糊不清和充满争议的时候,一年前新发现的铁基超导体则似乎让我们看到了新的希望^[2]。表面上看来,大部分铁基超导体的母体也存在着反铁磁长程序,而在超导态中也存在着短程自旋关联。然而,这种表面的相似

是否真正反映了这一新的超导体体系和原有的高温超导体之间的本征关联却仍然还有争议。例如,铁基超导体的母体呈现金属性,而不是绝缘体^[2]。其 d 电子的 5 个能带都被部分占据并和费米面相交^[3],强烈暗示了这一系统的巡游电子特性,因此阐述铁基超导体的性质也就必然无法离开多轨道理论,而不像高温超导体那样可以采用单轨道近似来理解。从中子散射的实验角度来讲,目前铁基超导体母体

* 美国国家自然科学基金(批准号:DMR-0756568)、美国能源部基础能源科学研究基金(批准号:DE-FG02-05FR46202)、中国科学院资助项目

2009-07-17 收到

† 通讯联系人, Email: laoliang@gmail.com

†† 通讯联系人, Email: daip@ornl.gov

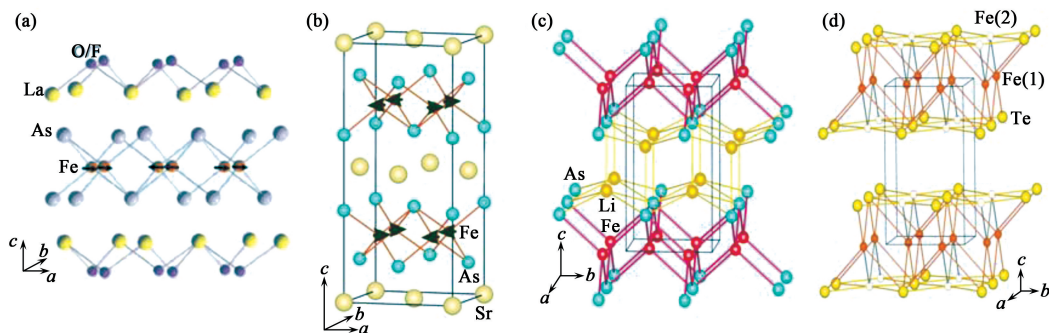


图1 四种铁基超导体的典型晶体结构: (a) LaFeAsO ; (b) SrFe_2As_2 ; (c) LiFeAs ; (d) Fe_{1+x}Te . 在从正方相到正交相的结构相变发生之后, 母体也会进入到反铁磁态, (a)和(b)中也包含了这种反铁磁结构. 注意 Fe_{1+x}Te 中额外的 x 的铁在 $\text{Fe}(2)$ 的位置, 并未填满

的磁结构已经探明, 而对于非弹性散射, 尤其是在超导态中自旋涨落的特性来说, 仍然还需要大量的工作.

本文将介绍迄今为止采用中子散射技术对铁基超导体中的磁有序进行研究的进展. 首先详细介绍母体中的晶格相变以及磁有序. 其次介绍母体中自旋波能谱的研究, 表明其主要特征可以用海森伯模型描述. 最后将介绍反铁磁相变和晶格相变在轻度掺杂下的改变及其变化机理. 由于中子散射应用于铁基超导体超导态的自旋动力学研究方兴未艾, 还存在着很多争议和不明之处, 因此本文将不涉及到超导态中的自旋动力学. 需要说明的是, 本文部分内容已经在另外一篇文章中发表^[4].

2 晶格和磁结构

铁基超导体可以大致分为 4 个类型: RFeAsO ($R = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \dots$, “1111”体系)^[2,5], AFe_2As_2 ($A = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$, “122”体系)^[6], MFeAs ($M = \text{Li}, \text{Na}$, “111”体系)^[7], $\text{Fe}_{1+y}\text{Se}_x\text{Te}_{1-x}$ 或 FeSe_x (“11”体系)^[8]. 一些更加复杂的材料可以看作是上述 4 种类型的一个变种. 这些不同体系的铁基材料在室温下都属于正方晶系, 其结构如图 1 所示. 所有的材料都包含着四方结构的 Fe^{2+} 离子层. $\text{Fe}-\text{Fe}$ 之间的直接相互作用也导致了该体系中的金属性. 大多数材料的母体的晶格结构在降低温度时都会发生微小的改变, 导致其正方对称性被破坏. 与此同时, 系统在低温下会形成长程的三维反铁磁序. 需要指出的是, 反铁磁相变的温度 T_N 和晶格相变的温度 T_s 在某些体系中是相同的, 而在其他一些体系中 $T_N < T_s$.

2.1 “1111”体系

RFeAsO (“1111”)体系是最早被中子散射所研究的对象^[9-13]. 然而目前为止, 由于该系统的大块单晶仍然不能生长, 因此目前的结果都是通过粉末散射所获得的. 图 1(a)给出了“1111”体系的晶体结构图. 随着温度的降低, “1111”体系的晶体结构从室温的正方相变成低温的正交相. 实际上, 各原子在相变时的位移很小. 对于铁离子来说, 相当于正方相下对角的铁离子沿着一个方向收缩, 另一个方向拓展, 也就是正交相的 a, b 轴实际上是沿着正方相 $a-b$ 面内晶胞的对角方向.

“1111”体系中反铁磁相变的温度 T_N 则要比结构相变的温度 T_s 低. 尽管其结构相变看起来类似于一级相变, 但是其反铁磁布拉格峰的强度却随着温度的降低而逐渐增加, 看起来更像是二级相变. 实验上发现, $a-b$ 面内的自旋结构是被称为“共线”的反铁磁结构: 磁矩在沿着长轴 (即 a 轴) 方向为反铁磁 (即反平行) 排列, 而在沿着短轴 (即 b 轴) 方向为铁磁 (即平行) 排列, 如图 2(b) 所示. 沿着 c 方向的最近邻的自旋可以是反平行的 (如 $\text{La}^{[9]}$ 和 $\text{Nd}^{[11]}$ - “1111”体系) 或是平行的 (如 $\text{Ce}^{[10]}$ 和 $\text{Pr}^{[12,13]}$ - “1111”体系). 需要指出的是, 该结构在正方相下是不允许存在的. 这一结构和费米面嵌套的结果一致, 尽管根据详细的第一性计算原理计算而获得的磁矩大小比实验上的测量值要大很多^[14]. “1111”体系中已经被测量过的样品的易磁化轴 (即自旋磁矩方向) 的方向是沿着 a 轴. 其磁矩大小小于 $1\mu_B$, 并在不同体系中有非常不同的值. 实际上, 由于在某些体系中磁矩很小, 而测量的磁布拉格峰强度正比于磁矩的平方, 所以暂时还无法决定这些体系中磁矩的具体方向.

在“1111”体系中, 稀土元素的存在导致了一些

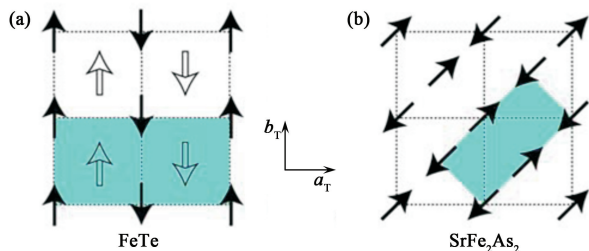


图2 (a) $\text{Fe}_{1.068}\text{Te}$ 的磁结构. 空心箭头所表示的自旋和实心箭头所表示的自旋之间到底是平行或反平行的关系目前还无法确定; (b) SrFe_2As_2 的磁结构. 其他“122”体系和“1111”体系的晶面内磁结构与此相同

有趣的现象. 稀土元素 4f 电子的晶格场在反铁磁相变以下会发生劈裂^[15]. 在更低温度下, 稀土元素的磁矩会首先和铁的自旋发生耦合, 而在很低温度下, 稀土元素的磁矩之间的耦合变强, 会形成自己的反铁磁序. 对于 Ce 和 Nd-“1111”体系来说, 其稀土元素的反铁磁转变温度分别是 4 K 和 2 K. 但是在 Pr-“1111”体系中, Pr 自旋的有序温度却高达 17 K, 类似于 Pr-123 铜氧化物高温超导体中所发生的情形. 图 3 给出了 Ce, Nd 和 Pr-“1111”体系中稀土元素自旋的磁结构. 可以看到, Pr 自旋形成了比较复杂的磁结构: 在氧离子层之上和之下构成三角形的 Pr 自旋以铁磁方式相关联, 而相邻的三角形之间的自旋则是反铁磁排列的. 所有的自旋都沿着 c 方向, 沿着 c 方向的相邻层是完全一样的, 因此其磁单胞和晶格单胞相同, 其磁波矢为 $[1, 0, 0]$. Nd 系统有类似的自旋结构, 但是磁矩的方向却是在三个方向都有分量的. 对于 Ce-“1111”体系来说, 其 Ce 自旋主要在局限在 $a-b$ 平面内, 具有类似于铁磁矩的链状结构, 但是相邻的链之间的自旋方向近乎垂直而不是反平行的. Ce 自旋在 c 方向也可能存在着一个较小的分量. 沿着 c 方向, 最近邻的自旋方向也是(近似)垂直的而不是反平行的, 因此, 其磁单胞是晶格单胞的双倍, 而其磁波矢是 $[1, 0, 1]$.

在掺杂的情况下, 当铁自旋的相变温度随着氟的掺杂而降低到零的时候, Ce 自旋从 $a-b$ 面旋转到 c 方向. 这对于 Ce 自旋的磁相变温度影响很小, 但是在 Pr-“1111”体系中, Pr 自旋的磁相变温度则随着掺杂而迅速下降.

需要指出的是, 由于稀土自旋和铁自旋之间会发生耦合, 从而会影响精修粉末衍射数据时所获得的磁结构和相关的磁矩结果. 另外, 由于信号强度的关系, 也没有足够的磁布拉格峰来进行更精确的

拟合. 因此, 在拟合稀土元素磁结构时, 是假设铁自旋的结构是和稀土自旋磁相变温度之上的时候一样的, 而其磁矩则被允许自由变化. 对于 Ce 和 Nd 系统, 这样会导致铁的磁矩大小在稀土自旋有序排列的温度以下比仅有铁自旋有序的时候的值要大, 但是现有的数据却无法分辨清楚这种增加是真的现象, 还是仅仅是由于有限的数据和一些伴随的假设而导致的假象. 尽管更多的样品或者测量时间可能会在一定程度上帮助我们理解这一疑问, 但是最终的解决可能还是必须要依赖于将来能够生长出的大块单晶.

2.2 “122”体系

由于“122”体系的大块单晶很容易生长, 因此目前很多研究都集中在该体系当中^[16-18]. “122”体系的磁性质在很大程度上和“1111”非常接近. 其晶体结构随着温度降低也经历了从正方相到正交相的相变, 其磁有序的结构也和 La-“1111”体系一致, 而其磁矩方向也是沿着 a 轴的, 尽管其磁矩大小没有像在“1111”体系中在不同的样品里面非常不同, 而是维持在 $1\mu_B$ 左右.

“122”体系和“1111”体系最大的不同也许体现在磁相变上. 首先, 该系统的磁相变温度和晶格相变温度是相同的. 其次, 磁布拉格峰强度的温度依赖关系暗示着其磁相变很可能是一级相变, 尽管在此问题上还有一定的争议^[19].

需要指出的是, 尽管早期发现的 Ca, Sr, Ba-122 样品都无需考虑碱土元素的影响, 对于 Eu-“122”体系样品来说, Eu 自旋仍然会在 19 K 以下变成反铁磁序^[20]. 而在 50% 钾掺杂的情况下 ($T_c = 33$ K), 在 13 K 以下仍然存在着 Eu 的短程反铁磁序. 这些 Eu 磁性和超导态之间的关联很可能类似于 Ho- $\text{Ni}_2\text{B}_2\text{C}$ 中所呈现的 Ho 磁有序和超导之间的竞争^[21].

2.3 “111”体系

“111”体系最开始被发现的时候被认为不存在类似于“1111”和“122”体系中的结构相变和反铁磁相变^[22]. 相反, 一些研究结果建议它很可能在未掺杂的情况下就已经处于超导态. 然而对于 NaFeAs 粉末和单晶的中子散射实验表明^[23], NaFeAs 样品 ($T_c = 23$ K) 仍然存在着正方相到正交相的结构相变以及与“122”体系具有相同磁结构的反铁磁相变, 而后者比前者的转变温度要低超过 10 K. 但是无

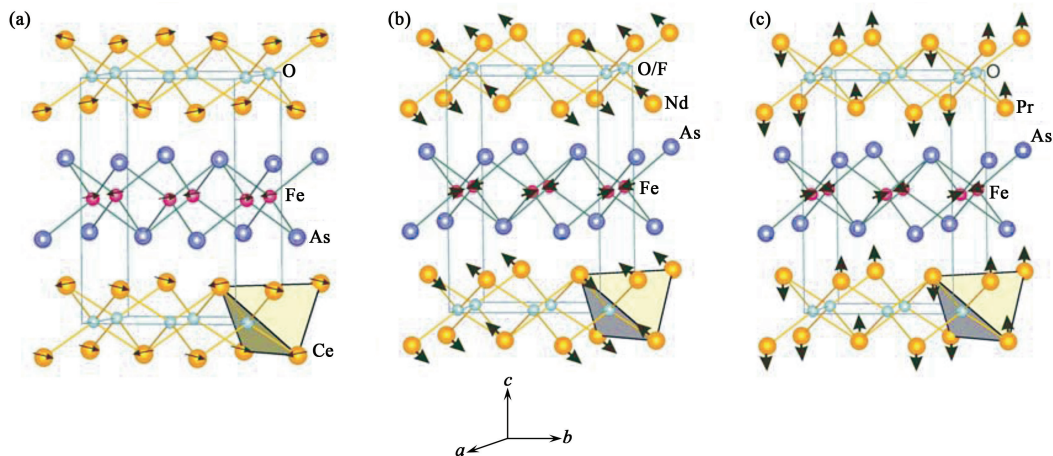


图3 低温下(a) CeFeAsO, (b) NdFeAsO, (c) PrFeAsO的稀土元素自旋的磁结构(其中铁的自旋结构是假设和稀土元素自旋未变成有序结构时是一样的)

论是结构畸变的大小还是反铁磁布拉格峰的强度都很弱. 实际上, 其铁自旋的磁矩只有 $0.09 \pm 0.04 \mu_B$. NaFeAs 与极度欠掺杂的“122”体系有很多相似之处, 这也暗示着其超导相和反铁磁相的共存很可能来源于某种自掺杂, 例如 Na 缺陷.

需要指出的是, 这一结果并未排除 LiFeAs 仍然不存在结构和反铁磁相变的可能, 尤其是考虑到它具有所有体系中最短的 Fe—Fe 键长, 从而很可能导致其 Fe—Fe 之间的相互作用非常强烈, 抑制反铁磁的形成^[24]. 而最终可能还是需要 LiFeAs 单晶样品才能够成功地解决这一问题.

2.4 “11”体系

$Fe_{1+y}Se_xTe_{1-x}$ 系统实际上很早就被发现并被研究, 但是其超导性在铁基超导体被发现之后才发现. 一般认为非超导的 $Fe_{1+y}Te$ 可以视为“11”体系的母体. 和其他体系的大部分母体一样, 它也在存在着结构相变和反铁磁相变, 而且这些相变被严格证明了是一级相变^[25–27]. 不过, 它的结构相变是从高温的正方相 $P4/nmm$ 变成低温的单斜相 $P2_1/m$. 其反铁磁结构也和其他系统不同. 尽管仍然保持着“共线”的反铁磁结构, 但是其方向和其他体系的反铁磁结构旋转了 45 度, 导致其反铁磁峰的位置及元胞大小都与其他体系不同, 如图 3 所示. 这一结果和费米面嵌套的结果并不吻合^[28]. 需要指出的是, $Fe_{1+y}Te$ 磁矩的方向在三个轴都有分量. 对于 $Fe_{1+y}Te$ 来说, 并没有按照化学计量比组成样品存在, 而是一直存在着一定的额外铁. 而磁矩的方向则看起来是受到了这些额外铁自旋的影响, 随着后者的增多而导致 c 方向的分量越来越多. 在额外铁

的含量超过一定数值时, 整个系统实际上变成了非公度的反铁磁结构.

有意思的是, 该系统在超导态的自旋涨落看起来仍然处于和其他体系相同的位置, 即 $(\pi, 0)$ 点, 而不是和母体的 (π, π) 保持一致^[29]. 而对于极度欠掺杂区域, 自旋涨落是如何从 (π, π) 转移到 $(\pi, 0)$ 点的仍然还不清楚.

2.5 其他系统以及一些特例

在 LaFeAsO 发现以前, LaFePO 已经被发现是超导的. 其发表的 T_c 值从 3 K 到 7 K^[30,31], 以及高压下的 14 K^[32]. 但是也有数据表明, 按照化学计量比组成的 LaFePO 应该是金属性而不是超导的^[33]. 随后, 替代了其他稀土元素 (Ce, Pr, Nd...) 的样品也被一一发现^[34]. 它们中的一些体系体现出超导性, 而另外一些则没有. 在所有样品中, 都没有发现结构相变或者反铁磁相变的存在. 有意思的是, 这一体系的 T_c 也相对较低, 其费米面也可能存在着节点, 暗示它们的超导电性的来源可能和 FeAs 体系的并不相同^[35].

另外, 还有一些体系的材料, 如 $AFeAsF$ ($A = Ca, Sr, Eu \dots$)^[36] 等, 这些材料可以被看作“1111”体系的变种, 即把 $(RO)^+$ 层换成了 $(AF)^+$ 层. 中子散射和其他实验表明, 其母体的反铁磁相与“1111”中的反铁磁相是一致的^[37].

具有更多元素的超导体也被陆续发现, 例如“42622”(包括 $Sr_4Sc_2O_6Fe_2P_2$, $Sr_4V_2O_6Fe_2As_2$ 等) 和“32522”(包括 $(Sr_3Sc_2O_5)Fe_2As_2$)^[38], 这些材料可以看作是将“122”体系中的碱土元素替换成复杂的化合物, 从而极大地扩张了 c 方向的晶格常数.

而其中一些样品中反铁磁相变的缺失也可能来源于这种强烈的二维特性. 对于这些系统中是否存在着自旋涨落, 则需要将来大块单晶的生长.

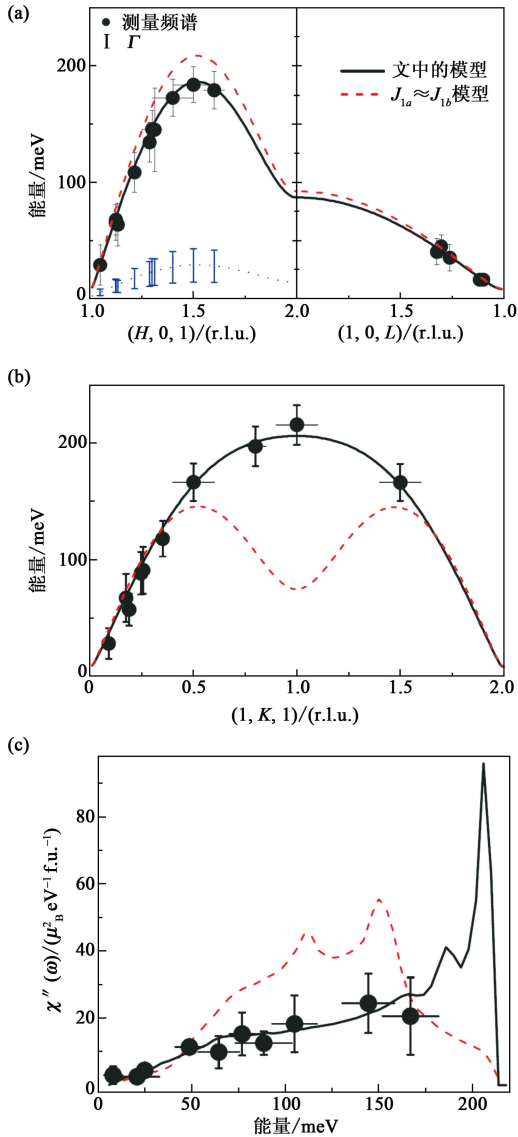


图4 (a)自旋波沿着 $(H, 0, 1)$ 和 $(1, 0, L)$ 方向的频谱;(b)自旋波沿着 $(1, K, 1)$ 方向的频谱;(c) χ'' 与能量的依赖关系. 以上个图中的实心圆点是实验数据, 其水平误差表示 $E(Q)$ 的积分区间, 实线为按着文中给出的模型拟合的结果, 而虚线则是 $J_{1a} \approx J_{1b}$ 的模型预言结果. 可以看到, 在高能区域, 后者在 $(1, K, 1)$ 方向和 χ'' 的能量依赖关系上都和实验数据产生了很大偏移. (图4(a)的 Γ 为频谱在能量方向的宽度)

3 母体中的反铁磁自旋波频谱

目前对于母体中反铁磁自旋波的研究主要集中在“122”系统. 而目前唯一成功地获得了整个布里渊区自旋波频谱的材料是 CaFe_2As_2 ^[39]. 图4给出

了在 ISIS 的 MERLIN 谱仪上对于 CaFe_2As_2 自旋波的研究结果. 令人惊奇的是, 整个频谱都可以采用有效海森伯模型来描述:

$$H = J_{1a} \sum_{i,j} S_i \cdot S_j + J_{1b} \sum_{i,j} S_i \cdot S_j + J_2 \sum_{i,j} S_i \cdot S_j + J_z \sum_{i,j} S_i \cdot S_j - J_s \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1)$$

其中 J_{1a} 和 J_{1b} 为最近邻沿着 a 方向和 b 方向的交换能, J_2 为次近邻交换能, J_z 为 c 方向交换能, 而 J_s 为单离子的不对称常数. 该模型给出的色散关系为

$$E(q) = \sqrt{A_q^2 - B_q^2}, \quad (2)$$

$$A_q = 2S[J_{1b}(\cos(\pi K) - 1) + J_{1a} + J_c + 2J_2 + J_s], \quad (3)$$

$$B_q = 2S[J_{1a} \cos(\pi H) + 2J_2 \cos(\pi H) \cos(\pi K) + J_c \cos(\pi L)], \quad (4)$$

其中 q 是偏离反铁磁布里渊区中心的转化波矢. 中子的散射截面可以写做:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{k_f}{k_i} \left(\frac{\gamma r_0}{2} \right)^2 g^2 f^2(Q) e^{-2W} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - Q_\alpha Q_\beta) S^{\alpha\beta}(Q, E), \quad (5)$$

其中 $(\gamma r_0/2)^2 = 72.65 \text{ mb/sr}$, g 是电子顺磁共振因子 (≈ 2), $f(Q)$ 是 Fe^{2+} 离子的形状因子, e^{-2W} 是德拜-沃勒因子 (在 10 K 下, $e^{-2W} \approx 1$), Q_α 是 Q 波矢沿着 α 方向的单位波矢, $S^{\alpha\beta}(Q, E)$ 是描述 $\alpha\beta$ 自旋关联的响应函数, 而 k_i 和 k_f 分别是中子的入射和出射波矢. 假设只有横向关联才对自旋波散射截面有贡献, 而且有限激发寿命可以采用倒寿命 Γ 的简单减幅阻尼谐振子来描述的话, 那么,

$$S^{yy}(Q, E) = S^{zz}(Q, E) = S_{\text{eff}} \frac{(A_q - B_q)}{E_0 (1 - e^{-E/k_B T})} \frac{4}{\pi} \frac{\Gamma E E_0}{(E^2 - E_0^2)^2 + 4(\Gamma E)^2}, \quad (6)$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数, E_0 是自旋波能量, 而 S_{eff} 是有效自旋. 采用 ISIS 实验室所提供的 Tobyfit 程序和上述公式, 可以很好地拟合整个布里渊区的自旋波. 需要注意的是, 在比较反射截面的时候, 应当考虑低温下正交相而导致的孪晶结构.

最终的拟合结果给出: $SJ_{1a} = 49.9 \pm 9.9 \text{ meV}$, $SJ_{1b} = -5.7 \pm 4.5 \text{ meV}$, $SJ_2 = 18.9 \pm 3.4 \text{ meV}$, $SJ_c = 5.3 \pm 1.3 \text{ meV}$. 而对有效磁矩的拟合表明, $S_{\text{eff}} = 0.22 \pm 0.06$, 如果我们考虑到该系统弹性磁矩是 $0.8\mu_B$ 的话, 该结果和一个大约

是 $S=1/2$ 的量子系统一致。

由于正交相下晶格常数 a 和 b 之间的差别极小, 因此对于 J_{1a} 和 J_{1b} 之间如此巨大的差别, 而且 J_{1b} 甚至可能是较小的负数, 还很难理解. 解释这一点也许需要其他电子自由度, 例如轨道效应^[40].

尽管海森伯模型可以成功地描述整个自旋波频谱, 但是这并不意味着铁基超导体的母体可以完全用局域磁矩来理解. 实际上, 在能区自旋波的展宽可能就暗示着必须考虑由于材料的金属性而导致的磁振子和电子之间的散射. 对于这一问题的最终答案, 还需要对其他体系, 尤其是非“122”体系的自旋波进行测量.

4 欠掺杂区域的反铁磁相变

如前所述, 铁基超导体母体中反铁磁相变的温度在不同体系中有可能会和结构相变温度重合, 例如“122”体系和“11”体系, 也有可能低于结构相变温度, 例如“1111”体系. 另一方面, 当在“122”体系中引入空穴或电子时, 其反铁磁温度在下降的同时, 也开始和结构相变的温度发生分离^[41,42], 如图5所示. 对 $\text{BaFe}_{1.96}\text{Ni}_{0.04}\text{As}_2$ 自旋波激发的研究表明^[43], 在反铁磁温度和结构相变温度分开的时候, 尽管系统已经进入超导态, 但是自旋激发和超导态还没有明显的关系. 低掺杂的效果实际上降低了 BaFe_2As_2 母体的 c 方向自旋关联, 引入了准二维的自旋激发. 也就是说, 自旋波在掺杂的情况下从三维性转变成二维性, 从而也导致了结构相变和磁相变的分开.

图5(a)给出了 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 在掺杂情况下的结构相变和反铁磁相变相图, 图5(b), (c)给出了 $\text{BaFe}_{1.96}\text{Ni}_{0.04}\text{As}_2$ 中 $(1,0,1)$ 和 $(1,0,0)$ 方向的自旋隙为 2 meV 和 4 meV. 根据(1)式的海森伯模型, 我们有:

$$\Delta(1,0,1) = 2S[(J_{1a} + 2J_2 + J_c + J_s)^2 - (J_c + J_{1a} + 2J_2)^2]^{1/2}, \quad (7)$$

$$\Delta(1,0,0) = 2S[(2J_{1a} + 4J_2 + J_s)(2J_c + J_s)^2]^{1/2}. \quad (8)$$

通过比较掺杂以及母体中自旋隙的大小, 我们可以估算出 $J_c = 0.01$ meV 及 $J_s = 0.007$ meV.

这一观察和基于海森伯模型的计算基本符合^[44]. 在这种模型中, 控制结构相变和反铁磁相变温度的参数可以简单视为 J_c/J_s , 当 J_c/J_s 的值大的时候, 两个相变温度重合, 而在该值降低到 10^{-3}

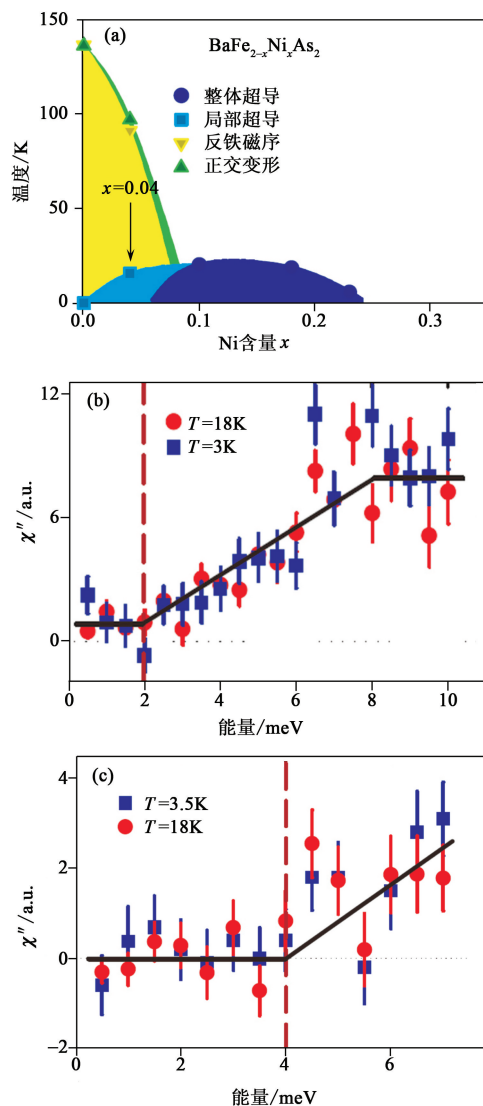


图5 (a) $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 在掺杂情况下的结构相变和反铁磁相变相图. (可以看到, 在 0.04 处, 两个相变的相变温度已经分开); (b) 和 (c) 给出了 $(1,0,1)$ 和 $(1,0,0)$ 处的自旋能隙值分别为 2 meV 和 4 meV, 明显小于母体的估计值 7.8 meV 和 20.2 meV

量级的时候, 它们会分开. 实验上获得的比值大约为 0.5×10^{-3} , 和理论的预言一致. 然而需要指出的是, 该模型预言了在结构相变和反铁磁相变之间存在着自旋涨落, 很可能来源于向列型的反铁磁序. 这一点还需要实验上进一步证明.

5 结束语

本文简要总结了利用中子散射技术对铁基超导体中三维长程反铁磁序进行研究的进展. 实验上发现, 各种体系的母体中都普遍存在着长程反铁磁序. 除了“11”体系外, 该反铁磁序的面内结构都是共线

性的反铁磁结构. 对自选波谱的研究表明, 尽管铁基超导体作为多带体系显示出很强的巡游电子特性, 但是其自旋波谱却可以用有效的海森伯模型来很好地描述. 而且这种模型也可以解释在掺杂的情况下结构相变和自旋相变是如何分离的.

尽管实验上对铁基超导体的长程反铁磁序的研究已经基本完成, 但是在一些特别的体系中却仍然还需要进一步研究. 而更为重要的是, 这种长程反铁磁序是如何随着掺杂或者加压等手段而逐渐消失, 并且在保留短程自旋涨落的情况下是如何进入超导态的, 目前仍然还不清楚. 一方面, 反铁磁序可能作为超导态的一种竞争序而存在; 另一方面, 反铁磁自旋涨落也可能作为超导电子对结对的媒介. 对这些问题的研究, 可以帮助我们了解铁基超导体机理, 同时, 无疑也会让我们在理解高温超导体的机理方面迈出有益的一步.

参考文献

- [1] Lee P A *et al.* Rev. Mod. Phys., 2006, 78:17; Eschrig M. Adv. Phys., 2006, 55:47
- [2] Kamihara Y *et al.* J. Am. Chem. Soc., 2008, 130:3296
- [3] Singh D J. Physica C, 2009, 469:418
- [4] Lynn J W, Dai P. Physica C, 2009, 469:469
- [5] Chen X H *et al.* Nature, 2008, 453:761; Chen G F *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 247002; Chin. Phys. Lett., 2008, 25: 2215; Ren Z A *et al.* Europhys. Lett., 2008, 82:57002
- [6] Rotter M *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78: 020503(R); Phys. Rev. Lett., 2008, 101:107006; Sasmal K *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 101:107007
- [7] Wang X C *et al.* Solid State Commun., 2008, 148:538; Tapp J H *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:060505(R)
- [8] Hsu F C *et al.* Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2008, 105: 14262
- [9] Cruz C de la *et al.* Nature, 2008, 453:899
- [10] Zhao J *et al.* Nature Mater, 2008, 7:953
- [11] Chen Y *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:064515
- [12] Kimber S A J *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:140503(R)
- [13] Zhao J *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:132504
- [14] Singh D J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 100:237003
- [15] Chi S *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 101:217002
- [16] Huang Q *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 101:257003
- [17] Zhao J *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:140504(R)
- [18] Goldman A I *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:100506(R)
- [19] Wilson S D *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 79:184519
- [20] Anupam *et al.* J. Phys.: Condens. Matter, 2009, 21: 265701
- [21] Lynn J W *et al.* J. Appl. Phys., 1996, 79:5857
- [22] Pitcher M J *et al.* Chem. Commun., 2008, 5918
- [23] Li S *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 80:020504(R)
- [24] Pratt F L *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 79:052508
- [25] Fruchart D *et al.* Mater. Res. Bull., 1975, 10:169
- [26] Bao W *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 102:247001
- [27] Li S *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 79:054503
- [28] Xia Y *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 103:037002
- [29] Qiu Y *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 103:067008
- [30] Kamihara Y *et al.* J. Am. Chem. Soc., 2008, 130:3296
- [31] Tegel M *et al.* Z. Naturforsch. B: Chem. Sci., 2008, 63:1057
- [32] Hamlin J J *et al.* J. Phys.: Cond. Matt., 2008, 20: 365220
- [33] McQueen T M *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:024521
- [34] Baumbach R E *et al.* submitted to the New Journal of Physics
- [35] Kuroki K *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 79:224511
- [36] Matsui S *et al.* J. Am. Chem. Soc., 2008, 130:14428; Han F *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:180503(R); Tegel M *et al.* Europhys. Lett., 2008, 84:67007; Zhu X *et al.* Europhys. Lett., 2009, 85:17011
- [37] Xiao Y *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 79:060504
- [38] Ogino H *et al.* Supercond. Sci. Technol., 2009, 22: 075008; Zhu X *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 79:024516; Chen G F *et al.* arXiv, 2009, 0903:5273; Zhu X *et al.* arXiv, 2009, 0904:0972; Ogino H *et al.* Supercond. Sci. Technol., 2009, 22:085001; Tegel M *et al.* arXiv, 2009, 0904:0479
- [39] Zhao J *et al.* Nature Phys., 2009, 5:555
- [40] Lee C C *et al.* arXiv, 2009, 0905:2957
- [41] Ni N *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:214515; Chu J H *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 79:014506
- [42] Pratt D K *et al.* arXiv, 2009, 0903:2833; Lester C *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 79:144523; Christianson A D *et al.* arXiv, 2009, 0904:0767
- [43] Harriger L W *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 103:087005
- [44] Fang C *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 77:224509