

Effect of Local Density of States on the Gap Symmetry in the Fe-Based Superconductors

Xiaoshan Ye, Xing Ma, Yongjun Liu

College of Physics Science and Technology, Yangzhou University, Yangzhou

Email: xsye@yzu.edu.cn

Received: Mar. 8th, 2011; revised: Mar. 30th, 2011; accepted: Apr. 6th, 2011.

Abstract: We present a scenario for the gap symmetry observed in newly discovered unconventional superconductivity of Fe-based layered compound. The scenario is explored in Hubbard model including electron-electron couplings mediated by antiferromagnetic(AFM) spin fluctuation. We find that the superconducting gap symmetries are different on different Fermi surfaces and the gap node emergence depends on the local density of states(LDOS) of quasi-particles. This mechanism explains the controversial experiment results observed in the ARPES and some transport experiments.

Keywords: Gap Symmetry; Spin Fluctuation; Local Density of States

局域态密度对铁基超导体能隙对称性的影响

叶晓山, 马 幸, 刘拥军

扬州大学物理科学与技术学院, 扬州

Email: xsye@yzu.edu.cn

收稿日期: 2011 年 3 月 8 日; 修回日期: 2011 年 3 月 30 日; 录用日期: 2011 年 4 月 6 日

摘 要: 我们对解释新发现的铁基化合物中的超导体能隙对称性提出一个方案。这个方案是在赫伯德模型中研究反铁磁(AFM)自旋涨落调制的电子-电子耦合。我们发现在不同的费米面上超导能隙的对称性是不相同的, 并且能隙节点的出现依赖准粒子的区域态密度(LDOS)。这个发现解释了 ARPES 和一些其他实验中的有争议的实验结果。

关键词: 能隙对称性; 自旋涨落; 局域态密度

1. 引言

在一些铁基化合物中发现超导性已经引起了广泛的关注^[1,2]。和铜氧化物高温超导体相似, 这类化合物也是层状结构, 在低温情况下, 它相变图中的反铁磁相和超导相相邻^[3,4]。为了进一步的认识这类化合物的超导性, 确定其能隙的配对对称性是很重要的。虽然到目前为止已做了大量的实验来研究其能隙的对称性, 但是不同实验得出的结论却不尽相同。有些实验认为它是常规超导体^[5,6], 有些实验认为它是非常规超

导体^[7,8]。最具代表性的两个例子是最近的 ARPES 实验表明在不同的费米面上超导能隙幅度值几乎是个常数^[9,10], 然而热输运实验的数据却表明超导能隙应该有节点^[8,11]。因此, 仍然有一些令人困惑的实验结果需要我们探究: 如何解释 ARPES 的实验结果和热输运的实验结果? 在费米面上有没有能隙节点? 如果有, 什么情况下出现? 如果电子费米面上的超导能隙不同于空穴的费米面上的超导能隙相, 如何检测到它呢? 在这篇文章, 我们将对于前两个问题进行详细的讨论, 对第三个问题给出一个实验测量能隙相位的

简易方法。

尽管有些学者提出电子-声子相互作用可能解释铁基物质的超导性，但是，对于这些化合物，计算出的电子-声子谱函数 $\alpha^2 F(\omega)$ 和耦合系数 λ 不能解释 $T_c > 26\text{K}$ [12] 这个事实。我们假设在这些物质中的电子-声子相互作用不是其超导性的原因。首先，从相图上我们看到超导相和反铁磁相相邻，所以我们假设这里的超导相是由反铁磁自旋涨落引起的。其次，由于两能带模型可以给出局域态密度泛函(LDA)计算的能带特征，在这篇文章，我们将用两能带模型的哈密顿量来探究自旋涨落导致的超导电性。有些研究者用多带模型研究其超导对称性。我们可以把我们的研究方法扩展到这种情况。第三，有些学者认为在这些物质中的反铁磁自旋涨落是由带间库伦排斥，带内库伦排斥和洪德耦合引起的，为了简单起见，我们将只考虑带间库伦排斥对结果的影响，因为我们这篇文章的主要目的是探究局域态密度(LDOS)对能隙对称性的影响。

2. 计算结果及讨论

我们所用的两带模型的哈密顿量[13]为：

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(k) \left[(\varepsilon_{+}(k) - \mu) I + \varepsilon_{-}(k) \tau_3 + \varepsilon_{xy}(k) \tau_1 \right] \Psi_{\sigma}(k) \quad (1)$$

$$\Psi_{\sigma}^{\dagger}(k) = (d_{x\sigma}(k) d_{y\sigma}(k)), \quad \varepsilon_{\pm}(k) = \frac{1}{2} [\varepsilon_x(k) \pm \varepsilon_y(k)]$$

$$\varepsilon_x(k) = -2t_1 \cos k_x - 2t_2 \cos k_y - 4t_3 \cos k_x \cos k_y$$

$$\varepsilon_y(k) = -2t_2 \cos k_x - 2t_1 \cos k_y - 4t_3 \cos k_x \cos k_y$$

$$\varepsilon_{xy}(k) = -4t_4 \sin k_x \sin k_y$$

τ_i 为泡利矩阵。经一标准变换

$$\Psi_{\sigma}(k) = \sum_{v=\pm} \mu_v^{\gamma}(k) a_{v\sigma}(k)$$

其中

$$\mu_{+}^x(k) = \mu_{-}^y(k) = \text{sgn}(\varepsilon_{xy}(k)) \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_{-}(k)}{2\sqrt{\varepsilon_{-}^2(k) + \varepsilon_{xy}^2(k)}}},$$

$$\mu_{+}^y(k) = -\mu_{-}^x(k) = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\varepsilon_{-}(k)}{2\sqrt{\varepsilon_{-}^2(k) + \varepsilon_{xy}^2(k)}}}, \text{ 我们得到}$$

$$H_0 = \sum_{v=\pm,\sigma} E_v(k) a_{v\sigma}^{\dagger}(k) a_{v\sigma}(k)$$

$$E_{\pm}(k) = \varepsilon_{\pm}(k) \pm \sqrt{\varepsilon_{-}^2(k) + \varepsilon_{xy}^2(k)} - \mu$$

在我们计算中，我们取 $t_1 = -1$ ， $t_2 = 1.3$ ， $t_3 = t_4 = -0.85$ 。我们定义自旋极化函数

$$\chi_{st}(q, i\Omega) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\Omega\tau} \langle T_{\tau} S_s(-q, \tau) \cdot S_t(q, 0) \rangle$$

s, t 是轨道指标。 $S_s(q) = \frac{1}{2} \sum_k \Psi_{sa}^{\dagger}(k+q) \sigma \Psi_{s\beta}(k)$ 。实际的物理测量自旋极化率为

$$\chi_s(q, i\Omega) = \sum_{s,t} \chi_{st}(q, i\Omega)$$

我们这里取单圈近似，

$$\chi_s(q, i\Omega) = -\frac{T}{2N} \sum_{k, \omega_n} \text{Tr} [G(k+q, i\omega_n + i\Omega) G(k, i\omega_n)]$$

格林函数

$$G(k, i\omega_n) = \frac{(i\omega_n - \varepsilon_{+}(k)) \hat{I} - \varepsilon_{-}(k) \hat{\tau}_3 - \varepsilon_{xy}(k) \hat{\tau}_1}{(i\omega_n - E_{+}(k))(i\omega_n - E_{-}(k))}$$

在 $\chi_s(q_c, 0)$ 附近静态自旋极化率显示很大的强度。这表明在一定条件下会发生反铁磁相变。这与最近的中子散射实验一致。考虑电子-电子带间相互作用，我们可以得到 RPA 自旋极化率为

$$\chi_s^{RPA}(q, i\Omega) = \chi_s(q, i\Omega) (1 - \Gamma \chi S(q, i\Omega))^{-1}$$

Γ 是相互作用矩阵。我们发现在 $(\pi, 0)$ 处，自旋极化率强度会有很大的提高，但主要的特征没有大的变化。

为了讨论超导配对对称性，简单起见，我们将对于带间相互作用为 U 的情况进行讨论。单沟道的有效配对势为

$$V^S(q, \omega_l) = U + \frac{3}{2} U^2 \chi_s^{RPA}(q, \omega_l) - \frac{1}{2} U^2 \chi_c(q, \omega_l)。$$

当 $U > 0$ 时，自旋涨落起主要作用，我们将忽略电荷涨落的作用。用这个相互作用，超导能隙函数可以通过求解线性 Eliashberg 方程可得到：

$$\begin{aligned} \lambda \Delta_1(k) &= -\sum_{k'} V^S(k-k', 0) \frac{\tanh(\beta E_2(k')/2)}{2E_2(k')} \Delta_2(k') \\ \lambda \Delta_2(k) &= -\sum_{k'} V^S(k-k', 0) \frac{\tanh(\beta E_1(k')/2)}{2E_1(k')} \Delta_1(k') \end{aligned} \quad (2)$$

其中, $\beta = 1/k_B T$, 这个方程常被用来计算铜氧化物超导体的能隙函数^[14]。在计算中, 我们通过逐渐的降低温度来寻找超导态。在图 1 中, 我们给出自洽的能隙解。从图中我们可以看出能隙的对称性是相位符号相反的扩展 s 波。能隙解表现出三个特点: (1) 在整个费米面, 能隙没有节点(图上的圆点线是费米面)。(2) Δ_1 和 Δ_2 的相位是反相的。(3) 能隙的幅值在不同的费米面上是不相同的。以上能隙对称性的结果和一些研究者的结论是一致的。下面我们对这一结果进行一些讨论。有效配对势 V^S 主要由静态自旋极化率 $\chi_S^{RPA}(q, \omega=0)$ 决定, $\chi_S^{RPA}(q, \omega=0)$ 的峰值出现在 $(\pi, 0)$ 处。因此, 配对相互作用在散射波矢 $q = (\pi, 0)$ 时最强。由 Elishberger 方程可以看出, 能隙函数 Δ 这时有最大幅值并且其相位是反号的。这就是我们看到的上面能隙解的情况。从图上我们也发现 Δ_1 和 Δ_2 的能隙的幅值是不同的。这种结果的一种解释如下, 从 Elishberger 方程我们看到能隙的幅值和体系的 LDOS 是成比的, 这一点在常规的 BCS 理论中最为明显的。在我们的研究体系中, LDOS 为 $N(k) = 1/|\nabla_k \varepsilon(k)|$ 其中 $\varepsilon(k)$ 为准粒子色散关系。从准粒子色散关系我们可以看出电子费米面附近的 LDOS 和空穴费米面附近的

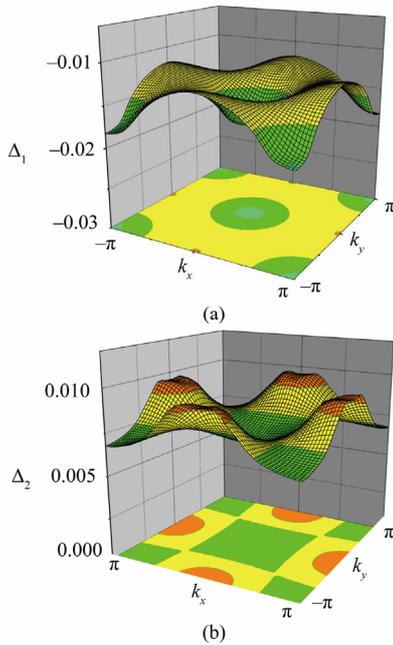


Figure 1. Pairing gap functions for $U = 3.0$ with $T = 0.01$ for $\mu = 1.45$
 (a) For electron Fermi surface (b) For the hole Fermi surface
 图 1. $U = 3.0$, $T = 0.01$, $\mu = 1.45$ 时计算出的能隙函数。图(a)为空穴费米面上的能隙, 图(b)为电子费米面上的能隙

LDOS 是不同的。因此, Δ_1 和 Δ_2 的能隙的幅值是不同的。

另外一个需要探讨的问题是一些热输运实验表明能隙应该有节点^[8,11], 但是, 许多 ARPES 实验表明在费米面附近的能隙幅值变化是非常小的。从我们的计算结果来看, 在同一费米面附近的能隙是不变的。Yao^[15]认为如果带内自旋涨落比较强的话, 那么 d_{xy} 对称性能隙解是最可能的。这时带内库伦作用引起的带内自旋极化率的峰值在 $(0.5\pi, 0.5\pi)$ 处。据我们所知这样自旋极化不是这类超导材料的共有性质。下面, 我们用上面运用的同样的理论来研究 LDOS 对节点的影响。铁基超导体的中子散射实验观察到自旋波的峰值在 $(\pi, 0)$ 处。因此, 我们仍然认为这一自旋涨落导致的电子-电子耦合作用是主要的。在最近的研究中, 一些铁基化合物的 ARPES 实验^[16,17]表明在布洛赫区, M 点附近的费米面出现四重对称性。理论上, 在不同掺杂情况下使用 FLEX 方法^[15]研究显示重整化的准粒子色散也表现出四重对称性。因此, 研究准粒子色散的对称性对能隙对称性的影响是必要的。在本篇文章中, 我们模拟准粒子的色散分布。图 2 是在费米面上归一化的准粒子分布的 LDOS。从图上可以看到 LDOS 出现四重对称性, 这与紧束缚色散的 LDOS 不同。利用这些准粒子分布和有效对称势, 我们发现超导配对对称是 $d_{x^2-y^2}$ (图 3)。这个结果很容易从费米面 nesting 来理解。从图 2, 我们看到这些费米面的 LDOS 出现四重对称。配对电子应主要出现在费米面附近大的 LDOS 区域。当配对相互作用波矢为 $q = (\pi, 0)$ 表现最

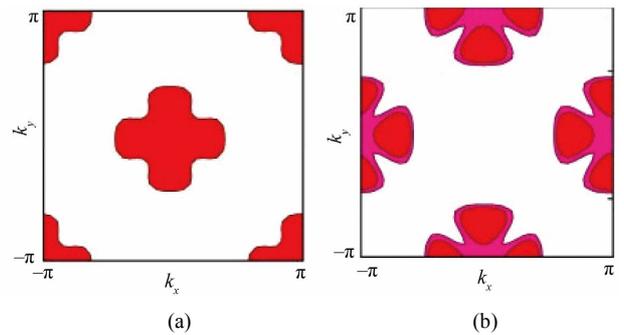


Figure 2. The LDOS of the quasi-particle dispersion on the Fermi surfaces (a) The LDOS of the quasi-particle dispersion on the hole Fermi surface (b) The LDOS of the quasi-particle dispersion on electron Fermi surface

图 2. 费米面处的准粒子局域态密度(LDOS)。图(a)为空穴费米面处的准粒子局域态密度, 图(b)为电子费米面处的准粒子局域态密度

强时, 这个矢量是电子费米面处具有最大 LDOS 的和空穴费米面处具有最大 LDOS 的散射矢量。这就导致这两处的能隙的幅值最大, 两处的能隙的相位也要相反。按照这样的组合, 能隙函数就可以表现出 $d_{x^2-y^2}$ 的对称性。我们的计算结果也确实如此(图 3)。我们要强调的是最近的角分辨热测量实验给出的实验结果是和我们的结论相一致的^[18]。

对铁基超导体, 理论上除了提出位相相反的扩展 s 波, d 波的能隙对称性外, 还提出无相位变化的扩展 s 波。为了确定在铁基超导体中序参量的对称性, 另一个重要的问题就是如何确定费米面上不同点的能隙的相位变化。在识别能隙对称性的方法中, SQUID 是测量相位变化的一个好的方法。这种方法已经在确定高温铜氧化物超导体的能隙对称中成功地使用。但是, SQUID 技术在铁基超导体中应用的不是很成功。在我们的研究中, 我们提出一个新的可行的方法来检测铁基超导体的能隙的相位变化。这种方法运用了下面的原理^[19]: 当声子动量大于倒相干长度时, 在准二维费米面上, 波矢为 q 的声子衰变成两个准粒子。声子衰变成两个准粒子的最小能量是动量的函数。我们注意到声子的线宽与密度 - 密度关联函数的虚部成正比, 密度关联函数的虚部为:

$$\begin{aligned} \text{Im } p(q, \omega) = & \frac{\pi}{N} \sum_k M_{oe}^{vv'} \left\{ \left[1 + \frac{\varepsilon_k^o \varepsilon_{q-k}^e - \Delta_k^o \Delta_{q-k}^e}{E_k^o E_{q-k}^e} \right] \right. \\ & \times \left[f(E_{q-k}^e) - f(E_k^o) \right] \delta(\omega - E_{q-k}^e + E_k^o) \\ & + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_k^o \varepsilon_{q-k}^e - \Delta_k^o \Delta_{q-k}^e}{E_k^o E_{q-k}^e} \right] \\ & \left. \times \left[f(E_{q-k}^e) + f(E_k^o) - 1 \right] \delta(\omega - E_k^o - E_{q-k}^e) \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

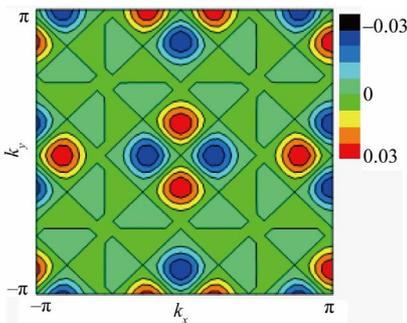


Figure 3. Pairing gap functions for the quasi-particle dispersion exhibiting fourfold symmetry
图 3. 准粒子局域态密度(LDOS)为四度对称性时计算出的能隙函数

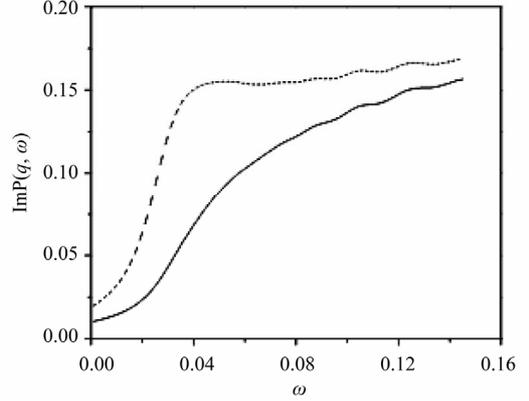


Figure 4. The linewidth of phonon with momentum $q = (\pi, 0)$ as a function of frequency for anisotropic s-wave with no phase change (dashed) and the sign-reversal extended s-wave(solid)
图 4. $q = (\pi, 0)$ 的声子线宽随频率的变化曲线。虚线为能隙函数无相位变化, 实线为能隙函数有相位变化

这里的 ε_k^o 是电子和空穴的正常色散。 $M_{oe}^{vv'} = \mu_v^o(q+k) \mu_{v'}^o(k) \mu_v^e(q+k) \mu_{v'}^e(k)$ 。 $f(\varepsilon)$ 是费米分布函数。 $\Delta^{e,o}$ 是与动量相关的能隙函数。 $E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}$ 。方括号中是 BCS 相干因子。当在费米面上产生两个准粒子时, 相干因子可以简化为:

$$1 - \frac{\varepsilon_k \varepsilon_{q-k} - \Delta_k \Delta_{q-k}}{E_k E_{q-k}} = 2 \cos^2 \left(\frac{\Delta \phi}{2} \right) \quad (4)$$

$\Delta \phi$ 是在准粒子间的相对相位。在低温情况 ($T < T_c$) 下, 我们考虑动量 $q = (\pi, 0)$ 的声子线宽。结果如图 4 所示, 从图上我们可以看出动量 $q = (\pi, 0)$ 的声子线宽是频率的函数, 与有相位变化的扩展 s 波相比, 无相位变化的扩展 s 波的线宽在 $\omega \cong 1.5\Delta$ 有一个很强的拐点。这个拐点是是由于在这个声子波矢的始末端点之间有相位变化造成的。对于无相位变化的扩展 s 波, 这个声子波矢的始末端点之间的相位差为 0, 对于有相位变化的扩展 s 波, 这个声子波矢的始末端点之间的相位差为 π 。从方程(4)我们可以看出, 有相位变化的扩展 s 波的相干因子为 0, 而无相位变化的扩展 s 波的相干因子为 2。这就给出了一个完全不同的线宽随频率变化的关系。以上讨论对检测费米面上其他不同点间的相对位相也是成立的。因此, 我们提出检测声子线宽的拐点也是探究能隙的其他对称性的有用方法, 例如要检测我们上文中提到的 $d_{x^2-y^2}$ 波, 我们也可以用这样的方法, 只是检测的声子的动量改变了。

3. 总结

我们首先利用双带模型研究了铁基化合物中由反铁磁自旋涨落导致的超导能隙的对称性，我们发现这种对称性明显依赖不同费米面的 LDOS。能隙的幅值与费米面的(LDOS)密切相关。这也提供了一种解释了 ARPES 实验和热输运实验的理论方法。其次，为了探究费米面上超导能隙的位相变化，我们提出了利用测量声子线宽的方法来检测费米面上不同点间的位相变化。

4. 致谢

这篇文章得到了中国自然科学基金(No.10947158)和江苏省自然科学基金(No.08KJB140012)的大力支持。在此表示感谢。

参考文献 (References)

- [1] C. De La Cruz, Q. Huang, J. W. Lynn, et al. Magnetic order versus superconductivity in the iron-based layered $\text{La}(\text{O}_{1-x}\text{Fx})\text{FeAs}$ systems. *Nature*, 2008, 453(7197): 899-902.
- [2] H. H. Wen, G. Mu, L. Fang, et al. Superconductivity at 25 K in hole doped $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{OFeAs}$. *Europhys. Lett.*, 2008, 82(1): 17009-17013.
- [3] J. Zhao, Q. Huang, C. De La Cruz, et al. Structural and magnetic phase diagram of $\text{CeFeAsO}_{1-x}\text{Fx}$ and its relationship to high-temperature superconductivity. *Nature Materials*, 2008, 7(12): 953-959.
- [4] Q. Huang, Y. Qiu, W. Bao, et al. Neutron-diffraction measurements of magnetic order and a structural transition in the parent BaFe_2As_2 compound of FeAs-based high-temperature superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101(25): Article ID 257003.
- [5] G. Li, W. Z. Hu, J. Dong, et al. Probing the superconducting energy gap from infrared spectroscopy on a $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ single crystal with $T_c = 37$ K. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101(10): Article ID 107004.
- [6] T. Y. Chen, Z. Tesanovic, R. H. Liu, et al. Determination of superconducting gap of SmFeAsFxO_{1-x} superconductors by andreev reflection spectroscopy. *Nature*, 2008, 453(9-12): 1224-1227.
- [7] O. Millo, I. Asulin, O. Yuli, et al. Scanning tunneling spectroscopy of $\text{SmFeAsO}_{0.85}$: Possible evidence for d-wave order-parameter symmetry. *Phys. Rev. B*, 2008, 78(9): Article ID 092505.
- [8] G. Mu, X. Zhu, L. Fang, et al. Nodal gap in Fe-based layered superconductor $\text{LaO}_{0.9}\text{F}_{0.1}\text{FeAs}$ probed by specific heat measurements. *Chin. Phys. Lett.*, 2008, 25(6): 2221-2224.
- [9] T. Kondo, A. F. Santander-Syro, O. Copie, et al. Momentum dependence of the superconducting gap in $\text{NdFeAsO}_{0.9}\text{F}_{0.1}$ single crystals measured by angle resolved photoemission spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101(14): Article ID 147003.
- [10] H. Ding, P. Richard, K. Nakayama, et al. Observation of fermi-surface-dependent nodeless superconducting gaps in $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Europhys. Lett.*, 2008, 83(4): Article ID 47001.
- [11] L. Shan, Y. I. Wang, X. Y. Zhu, et al. Point-contact spectroscopy of iron-based layered superconductor $\text{LaO}_{0.9}\text{F}_{0.1}\text{FeAs}$. *Europhysics Letters*, 2008, 83(5): Article ID 57004.
- [12] I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes et al. Unconventional superconductivity with a sign reversal in the order parameter of $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{Fx}$. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101(5): Article ID 057003.
- [13] T. A. Maier, D. J. Scalapino. Theory of neutron scattering as a probe of the superconducting gap in the iron pnictides. *Phys. Rev. B*, 2008, 78(2): Article ID 020514(R)
- [14] X. S. Ye, J. X. Li. Asymmetric d-wave superconducting gap in orthorhombic high- T_c superconductors. *Phys. Rev. B*, 2007, 76(17): Article ID 174503.
- [15] Z. J. Yao, J. X. Li, and Z. D. Wang. New J. spin fluctuations, interband coupling, and unconventional pairing in iron-based superconductors. *New J. Phys.*, 2009, 11(2): Article ID 025009.
- [16] D. H. Lu, M. Yi, S. K. Mo, et al. Electronic structure of the iron-based superconductor LaOFeP . *Nature*, 2008, 455(7209): 81-84.
- [17] D. H. Lu, M. Yi, S. K. et al. ARPES studies of the electronic structure of LaOFe(P, As) . *Physica C*, 2009, 469(9-12): 452-458.
- [18] B. Zeng, G. Mu, H. Q. Luo, et al. Anisotropic structure of the order parameter in $\text{FeSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ revealed by angle resolved specific heat. *arXiv*: 1007-3597.
- [19] M. E. Flatte, S. Quinlan, and D. J. Scalapino. Method for measuring the momentum-dependent relative phase of the superconducting gap of high-temperature superconductors. *Phys. Rev. B*, 1993, 48(14): 10626-10629.