

铁基超导体多轨道模型中的电子关联与轨道选择

俞榕

Electron correlations and orbital selectivities in multiorbital models for iron-based superconductors

Yu Rong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 217102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.217102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.217102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I21>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一维扩展 t-J 模型中密度-自旋相互作用诱导的相分离

Phase separation induced by density-spin interaction in one-dimensional extended t-J model

物理学报.2015, 64(18): 187105 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187105>

一维扩展离子 Hubbard 模型的相图研究

Phase diagram of the one-dimensional extended ionic Hubbard model

物理学报.2015, 64(10): 107101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107101>

硅基二氧化钒相变薄膜电学特性研究

Researches on the electrical properties of vanadium oxide thin films on Si substrates

物理学报.2015, 64(1): 017102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017102>

在半导体-金属相变温度附近氧化钒 $\square \wedge$ 度 \square 灾实囊斐 1 潤

Abnormal variation of optical properties of vanadium oxide thin film at semiconductor-metal transition

物理学报.2014, 63(10): 107104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107104>

两种扩展 Harper 模型的波包动力学

Wave packet dynamics of two extended Harper models

物理学报.2011, 60(9): 097104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.097104>

专题: 超导和关联体系研究进展

铁基超导体多轨道模型中的电子关联与轨道选择*

俞榕†

(中国人民大学物理系, 光电功能材料与微纳器件北京市重点实验室, 北京 100872)

(2015年10月22日收到; 2015年10月28日收到修改稿)

大部分铁基超导体的正常态呈现坏金属行为, 这表明体系中存在较强的电子关联效应. 最近的实验与理论研究显示, 铁基超导体中的电子关联具有多轨道的特征. 本文介绍与评论铁基超导体多轨道哈伯德模型中电子关联方面理论研究的最新进展; 着重讨论以自旋技术为代表的一系列量子多体计算方法在研究多轨道系统中金属绝缘体相变的应用. 理论计算给出了铁基超导体多轨道哈伯德模型基于电子关联的基态相图. 在对应母体化合物的电子填充数时, 基态存在从金属到绝缘体的莫特转变. 临近莫特转变, 体系呈现坏金属行为; 其电子性质存在较强的轨道选择性. 轨道选择性的强弱与体系中的洪德耦合和轨道的晶体场劈裂密切相关. 对钾铁硒系统, 研究发现其基态相图存在轨道选择莫特相: 其中铁的 3d xy 轨道已被莫特局域化, 但其他 3d 轨道电子仍具有巡游性. 这一新相的发现, 对理解以钾铁硒为代表的一大类铁基超导体正常态与超导之间的联系提供了重要线索.

关键词: 铁基超导体, 多轨道哈伯德模型, 莫特转变, 轨道选择

PACS: 71.30.+h, 74.70.Xa, 71.10.Hf, 71.27.+a

DOI: 10.7498/aps.64.217102

1 引言

2008年实验发现在氟(F)掺杂的镧氧铁砷(LaOFeAs)化合物中存在转变温度(T_c)为26 K的超导电性^[1]. 这一发现开创了铁基高温超导电性这一凝聚态物理中新兴的研究领域, 并迅速引起了物理学家广泛的研究兴趣. 通过保留化合物中的FeAs层而改变其他组分的方法, 超导转变温度在数月内被提高到56 K^[2]. 在之后的几年内, 又陆续发现铁硒(FeSe)、钾铁硒($K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$)等铁硒类超导体^[3-5]. 最近在SrTiO₃衬底上生长的单层FeSe薄膜中发现 T_c 可高达60 K^[6-9]. 最新的电子输运性质测量报道 T_c 可能达到109 K^[10]. 这些实验发现使得铁基超导体成为转变温度仅次于铜氧化物超导体的高温超导体. 同时, 铁基超导材料所包含的丰富的超导态和正常态物理性质与现象背后

所隐藏的物理机理成为近年来凝聚态物理学家们研究的主要内容.

实验发现相当一部分铁基超导体转变温度高于40 K, 已经超过常规电声子耦合机理给出的转变温度的上限. 因此, 普遍认为铁基超导体与铜氧化物超导体一样, 是一类非常规超导体, 其超导微观机理不同于常规的Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS)电声子耦合理论^[11]. 更有趣的是, 对比铁基超导体与铜氧化物超导体的相图, 两个体系中的超导相都能通过对母体化合物掺杂得到^[12]; 而母体化合物的基态分别具有(不同的)反铁磁序^[13]. 这种相图上超导与反铁磁相的临近, 暗示了磁性与超导微观机理之间的密切联系. 同时, 这也产生了一个问题, 即铁基超导体与铜氧化物超导体是否有相似(甚至相同)的超导微观机理? 然而, 考察铁基超导体与铜氧化物的母体化合物性质, 发现它们有很大差别. 首先, 铜氧化物超导体的母体是反铁磁莫

* 国家自然科学基金(批准号: 11374361)和中央高校基本科研业务费(中国人民大学科学研究基金, 批准号: 2014030193)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: rong.yu@ruc.edu.cn

特绝缘体, 而铁基超导体的母体化合物是反铁磁金属^[1], 在电子结构上存在空穴与电子型费米面^[14]. 这一差别使得大家对是否可以将铁基超导体(及其母体化合物)视作强关联电子体系产生了疑问. 其次, 在讨论铜氧化物性质时, 通常仅需考虑包含铜 3d x^2-y^2 轨道的单轨道模型. 但在铁基超导体的母体化合物中, 铁离子价态表现为 +2 价, 对应为在铁的 5 个 3d 电子轨道上占据 6 个电子. 实验与理论计算发现, 铁基超导体中晶体场劈裂远小于能带宽度. 这说明在铁基超导体中必须考虑多个轨道对能带结构以及其他物理性质的影响. 在理论处理上, 如何避免多轨道结构带来的巨大的复杂性成为困扰理论工作者的一个现实的难题.

铁基超导体区别于铜氧化物超导体的独特物理性质给研究带来了挑战, 也带来了机遇. 仔细考察铁基超导体及其母体的性质, 发现它们在正常态呈现坏金属行为. 在室温下, 铁基超导体通常是顺磁金属, 但其电阻率很大, 超过 Mott-Ioffe-Regel 极限^[15]. 这表明体系中电子平均自由程 (l) 很短, 接近平均粒子间距. 平均自由程与费米波矢 (k_F) 的乘积 $k_F l \sim 1$. 如此小的电子平均自由程暗示体系中有相当强的电子-电子相互作用. 此外, 实验上还发现钡铁砷 (BaFe_2As_2) 光电导的 Drude 峰值与基于非相互作用电子能带理论的预言值相比较下降了约 70%^[16]; 角分辨光电子谱 (ARPES) 实验发现电子能带有效质量比能带理论预言值增大 3 倍^[14]; 同时, 中子散射结果显示自旋激发谱在非弹性部分有很大谱权重, 表明每个铁离子存在约 $1 \mu_B$ 的局域磁矩^[17]. 以上实验结果说明虽然铁基超导体母体化合物并非莫特绝缘体, 但体系中表现出较强的电子关联, 在相图上临近金属绝缘体的莫特转变. 这一观点也被铁硒系统中的实验现象所支持: 在铁硒系统中, ARPES 得到的能带有效质量增加可高达约 20 倍^[18-20]; 并且在 $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 中, 在特定组分下可得到反铁磁绝缘体等^[5,21].

虽然铁基超导体的多轨道电子结构很早就被注意到, 但多轨道结构对电子关联的影响却是最近才讨论得比较清楚的问题. 铁基超导体顺磁相具有四方晶格结构, 对称性上要求只有 3d xz 与 yz 轨道是简并的. 这样, 不同轨道组成的能带具有不同带宽和电子填充数. 因此研究电子关联的轨道选择性非常自然, 同时也非常重要. 为研究电子关联的轨道选择性, 近年来在理论上发展了以隶自旋技术为

代表的适用于多轨道体系新的量子多体计算技术.

本文报道铁基超导体多轨道哈伯德模型中电子关联方面理论研究的最新进展; 着重讨论隶自旋技术这一量子多体计算方法在研究多轨道系统中金属绝缘体相变的应用. 我们通过理论计算给出铁基超导体多轨道哈伯德模型基于电子关联的基态相图. 在对应母体化合物的电子填充数时(每个铁离子上电子数 $N = 6$), 基态存在从金属到绝缘体的莫特转变. 临近莫特转变时, 体系呈现坏金属行为, 其电子性质存在较强的轨道选择性. 轨道选择性的强弱与体系中的洪德耦合和轨道的晶体场劈裂均密切相关. 我们发现对 LaOFeAs 与 $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 系统, 其母体化合物具有相似的基态相图, 揭示电子关联性质在铁砷与铁硒系统中的普适性. 另外, 针对 $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 系统的研究发现, 其基态存在一个轨道选择莫特相: 其中铁的 3d xy 轨道已被莫特局域化, 但其他 3d 轨道上电子仍具有巡游性. 这一新相的发现, 对理解以钾铁硒为代表的一大类铁基超导体正常态性质及其与超导电性之间的联系提供了重要线索.

本文余下部分的结构安排如下: 在第 2 节中将会简要介绍针对铁基超导体的多轨道哈伯德模型和研究这一模型中金属绝缘体相变的隶自旋方法; 在第 3 节中, 给出基于隶自旋方法的 LaOFeAs 系统的基态相图, 并讨论其中的金属绝缘体莫特转变; 第 4 节介绍 $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 系统中的电子关联, 重点讨论其中的轨道选择莫特相 (orbital-selective Mott phase, OSMP) 的理论与实验研究结果; 第 5 节包括对一些结果的深入分析与讨论; 最后在第 6 节对现有的研究工作做一总结, 并展望未来研究的方向.

2 铁基超导体的多轨道哈伯德模型与隶自旋方法

为研究铁基超导体中的多轨道性质, 我们考虑一个多轨道的哈伯德模型. 其哈密顿量包括如下两部分:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\text{int}}, \quad (1)$$

其中, \mathbf{H}_0 是描述包含铁 3d 电子轨道的紧束缚模型, \mathbf{H}_{int} 描述每个晶格格点上的电子哈伯德相互作用. 它们又分别具有如下形式:

$$\mathbf{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_{ij\alpha\beta\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} \mathbf{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{d}_{j\beta\sigma} + \sum_{i\alpha\sigma} (\varepsilon_\alpha - \mu) \mathbf{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{d}_{i\alpha\sigma}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{int}} = & \frac{U}{2} \sum_{i\alpha\sigma} \mathbf{n}_{i\alpha\sigma} \mathbf{n}_{i\alpha\bar{\sigma}} + \sum_{i,\alpha<\beta,\sigma} \left[U' \mathbf{n}_{i\alpha\sigma} \mathbf{n}_{i\beta\bar{\sigma}} \right. \\ & + (U' - J) \mathbf{n}_{i\alpha\sigma} \mathbf{n}_{i\beta\sigma} - J (\mathbf{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{d}_{i\alpha\bar{\sigma}} \mathbf{d}_{i\beta\bar{\sigma}}^\dagger \mathbf{d}_{i\beta\sigma} \\ & \left. - \mathbf{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{d}_{i\alpha\bar{\sigma}}^\dagger \mathbf{d}_{i\beta\sigma} \mathbf{d}_{i\beta\bar{\sigma}}) \right], \quad (3) \end{aligned}$$

其中, $\mathbf{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger$ 表示在第 i 格点第 α 轨道产生一个自旋方向为 σ 的电子, $\mathbf{n}_{i\alpha\sigma} = \mathbf{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{d}_{i\alpha\sigma}$; ε_α 是晶体场劈裂所对应的在位能; μ 是化学势; $t_{ij}^{\alpha\beta}$ 是紧束缚模型中的电子重叠积分; U , U' 分别是轨道内与轨道间的库仑排斥能, J 是洪德耦合, 它们之间满足关系 $U' = U - 2J$ [22].

对单轨道哈伯德模型中的金属绝缘体相变, Kotliar-Ruckenstein 的赝玻色子方法 [23] 给出令人满意的结果. 但将这一方法直接推广到多轨道的情形会遇到引入的辅助玻色子场 Hilbert 空间过大的困难. 近年来理论上发展出其他一些处理多轨道哈伯德模型中金属绝缘体相变的方法, 如赝旋子与赝自旋方法等 [24–27]. 它们可以看作赝玻色子方法在多轨道模型中的推广. 这里我们介绍赝自旋方法. 在这一方法中 [27], 在每一个格点将电子产生算符写作 $\mathbf{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger = \mathbf{S}_{i\alpha\sigma}^+ \mathbf{f}_{i\alpha\sigma}^\dagger$, 其中 $\mathbf{S}_{i\alpha\sigma}^+$ 是一个自旋 $1/2$ 的赝自旋升算符, $\mathbf{f}_{i\alpha\sigma}^\dagger$ 是一个辅助费米子 (自旋子) 场的产生算符. 这样赝自旋与自旋子将分别携带电子的电荷与自旋自由度. 它们之间通过约束条件 $\mathbf{S}_{i\alpha\sigma}^z = \mathbf{f}_{i\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{f}_{i\alpha\sigma} - 1/2$ 来联系. 用赝自旋与自旋子算符将 (2), (3) 式中的哈密顿量重写, 并按自旋电荷分离的精神将赝自旋算符与自旋子算符的耦合项作平均场分解, 再考虑体系具有平移对称性, 即可得到描写顺磁相的赝自旋平均场哈密顿量:

$$\mathbf{H}_f^{\text{mf}} = \sum_{k\alpha\beta} [\xi_k^{\alpha\beta} \langle \mathbf{O}_\alpha^\dagger \rangle \langle \mathbf{O}_\beta \rangle + \delta_{\alpha\beta} (\varepsilon_\alpha - \lambda_\alpha + \tilde{\mu}_\alpha - \mu)] \mathbf{f}_{k\alpha\beta}^\dagger \mathbf{f}_{k\alpha\beta}, \quad (4)$$

$$\mathbf{H}_S^{\text{mf}} = \sum_{\alpha\beta} [\xi^{\alpha\beta} (\langle \mathbf{O}_\alpha^\dagger \rangle \langle \mathbf{O}_\beta \rangle + \langle \mathbf{O}_\beta \rangle \langle \mathbf{O}_\alpha^\dagger) + \delta_{\alpha\beta} \lambda_\alpha \mathbf{S}_\alpha^z] + \mathbf{H}_{\text{int}}(\mathbf{S}). \quad (5)$$

在上面公式中, 我们已经省略了自旋指标 σ . 公式中,

$$\begin{aligned} \xi_k^{\alpha\beta} &= \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij}^{\alpha\beta} e^{ik(r_i - r_j)}, \\ \xi^{\alpha\beta} &= \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} \langle \mathbf{f}_{i\alpha\sigma}^\dagger \mathbf{f}_{j\beta\sigma} \rangle / 2, \end{aligned}$$

$\delta_{\alpha\beta}$ 是 Kronecker δ 函数, λ_α 是为处理约束条件而引入的拉格朗日乘子, $\tilde{\mu}_\alpha$ 是为得到正确的非相互作用极限结果而引入的等效化学势. 方程 (5) 中 $\mathbf{H}_{\text{int}}(\mathbf{S})$ 代表用赝自旋算符表示的 (3) 式中的相互作用哈密顿量, $\mathbf{O}_\alpha^\dagger = \langle P_\alpha^+ \rangle \mathbf{S}_\alpha^+ \langle P_\alpha^- \rangle$, 其中 $P_\alpha^\pm = 1/\sqrt{1/2 + \delta \pm \mathbf{S}_\alpha^z}$, δ 是为消除 P_α^\pm 奇异性而引入的无穷小正数.

通过赝自旋算符, 可定义与轨道 α 相联系的准粒子谱权重因子 $Z_\alpha = |\langle \mathbf{O}_\alpha \rangle|^2$. 它可以作为描述多轨道体系中金属-绝缘体相变的参量. 金属相对应赝自旋形成长程磁序. 这时 $Z > 0$, 存在费米面, 电荷激发是无能隙的. 莫特绝缘体相对应赝自旋为量子无序, $Z = 0$. 这时电荷激发是有能隙的, 但自旋激发仍无能隙, 即自旋子存在费米面. 另一可能的绝缘体是能带绝缘体. 这时 $Z > 0$, 但电荷激发有能隙, 不存在费米面.

3 铁砷系统中的金属绝缘体相变

铁基超导体电子关联效应中一个重要的问题是其母体化合物模型中的金属绝缘体相变. 第 1 节引言部分已经介绍过, 铁基超导体的母体化合物中, 铁离子价态表现为 +2 价, 对应为在铁的 5 个 3d 电子轨道上占据 6 个电子. 对偶数电子填充的情形, 一般情况下系统的绝缘态既可能是莫特绝缘体, 也可能是能带绝缘体. 因此首要的问题是确定铁基超导多轨道哈伯德模型在偶数电子填充时是否存在金属莫特绝缘体相变. 我们以 LaOFeAs 体系为例, 应用赝自旋方法对这一问题进行了系统的研究. 我们发现, 在具有四方对称的顺磁相, 电子间的库仑相互作用总会使系统经历金属到莫特绝缘体的转变, 而系统不会成为能带绝缘体. 这是体系对称性的结果. 由于四方相具有晶格四重旋转对称性, 晶体场劈裂的结果是铁 3d xz 轨道与 yz 轨道简并而且处于部分被电子填充的状态. 体现在能带结构上, 如图 1 所示, 在布里渊区边界上 M 点 (波矢 $\mathbf{k} = (\pi, 0)/(0, \pi)$), 电子型能带底与空穴型能带顶因分别具有 xz 与 yz 轨道特征而简并. 电子间的库仑相互作用可以使能带宽度变窄, 但不能使简并解除. 因此, 相互作用无法打开能隙, 使体系成为能带绝缘体. 然而, 足够强的相互作用可以使准粒子失去相干性, 其谱权重因子 $Z = 0$. 这时体系成为莫特绝缘体.

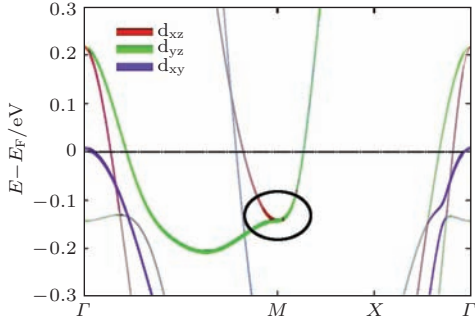


图1 LaOFeAs的5轨道紧束缚模型的能带结构. 图中红、绿、蓝色分别代表能带具有铁3d xz , yz , xy 轨道特征. 图中椭圆区域内具有 xz 轨道特征的电子型能带与具有 yz 轨道特征的电子型能带在 M 点简并, 见文中的讨论

Fig. 1. Band structure of the five-orbital tight-binding model for LaOFeAs. The red, green, and blue colors stand for the Fe 3d xz , yz , and xy orbital characters of the bands. The ellipse regime highlights the degeneracy at M point between the electron and hole like bands with xz and yz orbital characters, respectively. See detailed discussions in the text.

我们应用隶自旋方法, 得到了针对LaOFeAs的5轨道哈伯德模型的基态相图, 如图2所示. 当

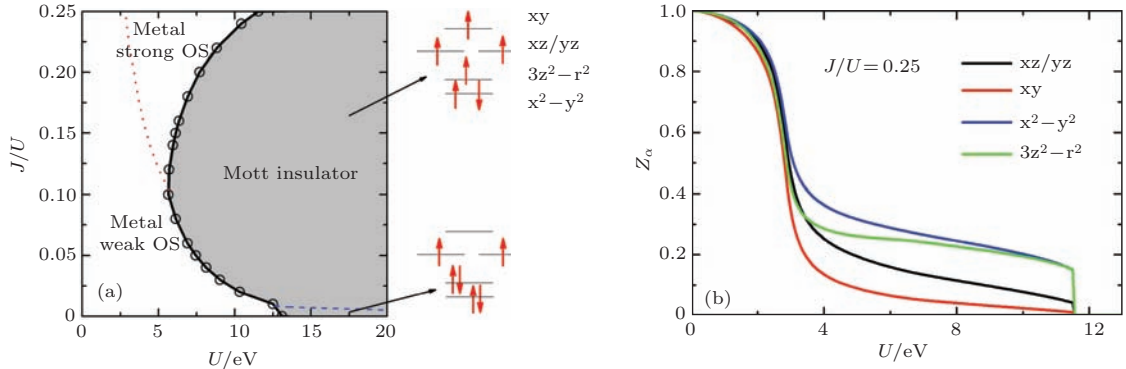


图2 (a) 隶自旋方法得到的LaOFeAs的5轨道哈伯德模型的基态相图. 图中阴影区为莫特绝缘体, 空白区为金属, 黑色实线代表莫特绝缘体与金属相的边界, 对应莫特转变的临界值 U_c . 阴影区中蓝色虚线上下区域分别为高自旋 ($S = 2$) 与低自旋 ($S = 1$) 莫特绝缘体. 空白区中红色点线 U^* 区分金属相中强轨道选择 (strong OS) 与弱轨道选择 (weak OS) 区. (b) 在 $J/U = 0.25$ 时, 投影到各轨道的准粒子谱权重 Z_α 随 U 的变化, 在 $U^* < U < U_c$ 时表现出很强的轨道依赖性 [27]

Fig. 2. (a) Ground state phase diagram of the five-orbital Hubbard model for LaOFeAs, calculated by slave-spin method. The black curve with circles is the phase boundary between the metal and Mott insulator (shaded regime). The dashed blue line separates the regimes of low- and high-spin Mott insulators. The dotted red line separates the regimes in the metallic phase with weak and strong orbital selectivity (OS), respectively. (b) Evolution of the orbital dependent quasiparticle spectral weights, Z_α , with U at $J/U = 0.25$. Strong orbital selectivity is found in the regime $U^* < U < U_c$. Adapted from Ref. [27]

4 $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 体系中的莫特局域化与轨道选择莫特相

最近实验上发现的铁硒类超导体, 如 $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 与 SrTiO_3 衬底上的 FeSe 单层膜等引

起了研究者极大的兴趣. 这些超导体与通常的铁砷类超导体最大的不同在于它们的正常态电子结构仅存在电子型费米面, 而不存在空穴型费米面. 但是这类体系的超导转变温度甚至超过通常的铁砷类超导体的 T_c . 其中 $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 体系的性质尤其引人关注. 在特定组分 $K_{0.8}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_2$ 下 (又称 245 体

起了研究者极大的兴趣. 这些超导体与通常的铁砷类超导体最大的不同在于它们的正常态电子结构仅存在电子型费米面, 而不存在空穴型费米面. 但是这类体系的超导转变温度甚至超过通常的铁砷类超导体的 T_c . 其中 $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 体系的性质尤其引人关注. 在特定组分 $K_{0.8}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_2$ 下 (又称 245 体

系), 体系电阻呈现绝缘体行为^[5], 且基态是反铁磁的, 有序化的磁矩高达 $3.3 \mu_B$. 基态的磁结构与体系中空间有序的铁空位结构密切相关^[21]. 这里几个值得探索的问题是: 1) 245 体系绝缘相的物理机理是什么? 245 相与 $K_xFe_{2-y}Se_2$ 体系中的超导电性之间有什么联系?

我们应用隶自旋方法研究了针对 $K_xFe_{2-y}Se_2$ 体系的 5 轨道哈伯德模型在电子填充数为 6 时的金属-绝缘体相变. 我们分别对空位无序与 $\sqrt{5} \times \sqrt{5}$ 空位有序两种情形给出了体系基态相图, 如图 3 所示^[28]. 二者在定性上相似: 都存在金属莫特绝缘

体相变. 但定量比较, 通过对比图 3(b) 和图 3(d), 发现对相同的 J/U 值, 空位有序的莫特转变发生在更小的 U 值. 这是因为空位有序的结构使得体系等效原胞变大, 对应动能减小, 造成能带宽度变窄, 更有利于莫特绝缘体相的稳定^[29,30]. 通过与 ARPES 实验的对比, 我们估算了实际体系中的 J 与 U 的值, 标注在相图上 (星形标记). 由于上述空位有序造成的能带变窄机理, 星形标记对应参数的基态已经从空位无序时的金属态进入空位有序时的莫特绝缘体态. 这很好地解释了 245 体系反铁磁绝缘态的起源.

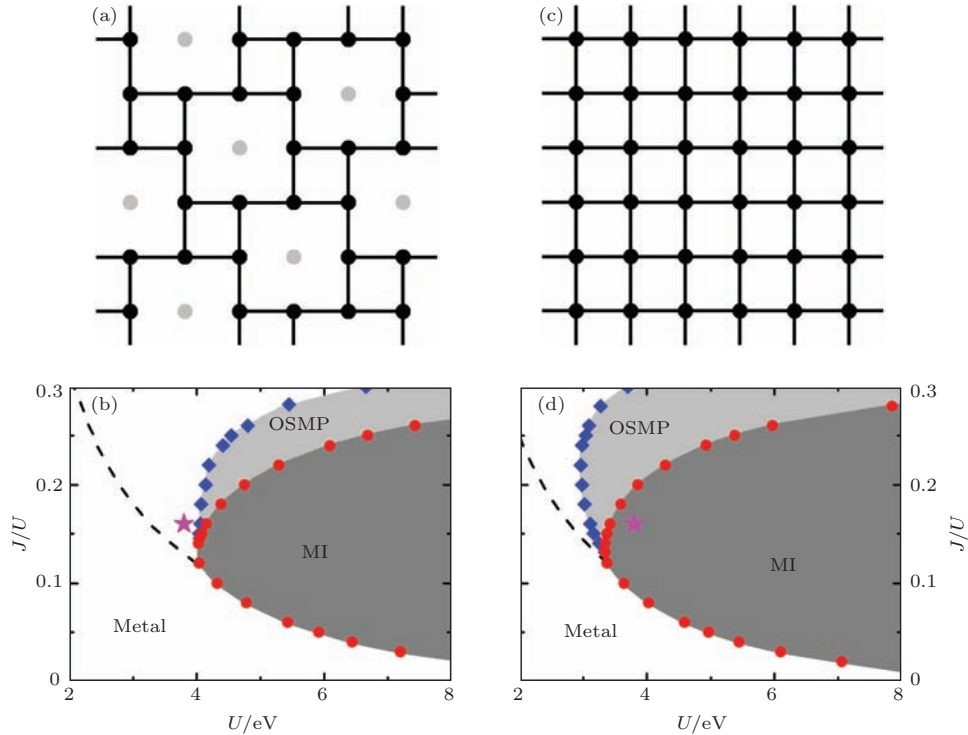


图 3 $K_xFe_{2-y}Se_2$ 中铁空位无序与空位有序时的格点模型与相应基态相图. (a), (b) 分别是空位无序时的格点与相图; (c), (d) 是 $\sqrt{5} \times \sqrt{5}$ 空位有序时的格点与相图. 相图中深色阴影区是莫特绝缘体相 (MI), 浅色阴影区是轨道选择莫特相 (OSMP), 空白区是金属相. 红色圆形与蓝色菱形标记分别是它们的相边界. 黑色虚线区分金属相内强与弱轨道选择的区域. 粉色星形标记是通过对比 ARPES 实验结果估算出的实际材料中 J 与 U 的取值^[28]

Fig. 3. The lattices corresponding to $K_xFe_{2-y}Se_2$ with disordered (in (a)) and $\sqrt{5} \times \sqrt{5}$ ordered (in (c)) iron vacancies. (b) and (d) are corresponding ground-state phase diagrams of the 5-orbital Hubbard model. Dark and light shaded regimes are Mott insulator (MI) and orbital-selective Mott phase (OSMP), respectively. The red circles and blue diamonds are corresponding phase boundaries. The black dashed line shows the crossover in the metallic phase between the regimes with strong and weak orbital selectivity. The magenta star shows the estimated values of J and U in $K_xFe_{2-y}Se_2$ by fitting the theoretical results to ARPES ones. Adapted from Ref. [28].

另外, 将相图与 LaOFeAs 模型的相图对比, 二者定性上也相似, 如金属相都存在从弱轨道选择到强轨道选择区的过渡 (U^*). 它们明显的不同在于, 在 $K_xFe_{2-y}Se_2$ 相图中还存在一个新的轨道选择莫特相 (OSMP). 由图 4 所示, 在这相中, 铁

的 3d xy 轨道电子半满填充, 且 $Z = 0$, 即已经被莫特局域化; 但其他 3d 电子轨道上电子仍然处于巡游状态 ($Z > 0$). xy 轨道被莫特局域化的原因是多方面的^[28]: 一方面因为在无相互作用极限下, 投影到 xy 轨道的带宽最窄; 另一方面因为晶体场劈裂使

得xy轨道在位能最高, 最接近半满填充; 除此之外, 较强的洪德耦合减弱了轨道间的涨落, 这效应对非简并的xy轨道更显著.

注意到这里的轨道选择莫特相是铁砷系统中存在的强轨道选择金属态的极端情形, 即部分轨道已完全被局域化. 值得注意的是, 虽然莫特绝缘相只能存在于整数电子填充的系统, 轨道选择莫特相却可以存在于非公度填充的掺杂系统中. 最近的ARPES实验已经证实, 通过调节温度, 可以使 $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$, $\text{FeSe}_x\text{Te}_{1-x}$ 以及 SrTiO_3 上FeSe单层膜等多个铁硒系统从正常金属相过渡到轨道选择莫特相 [19,20].

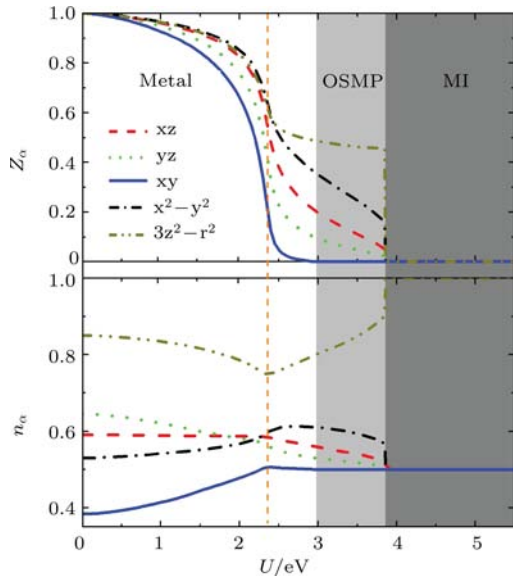


图4 空位有序的 $K_{0.8}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_2$ 模型中准粒子谱权重因子 Z_α 与电子填充数密度 n_α 随 U 的变化, 其中 $J/U = 0.2$ [28]

Fig. 4. The evolution of orbital resolved quasiparticle spectral weights and average electron filling per Fe with U at $J/U = 0.2$ in the 5-orbital model for the $\sqrt{5} \times \sqrt{5}$ vacancy ordered $K_{0.8}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_2$. Adapted from Ref. [28].

5 讨论

5.1 轨道选择性对超导的影响

以上各节的讨论都针对超导体及其母体化合物的正常态中的电子关联性质. 一个自然的问题是电子关联, 尤其是轨道选择的电子关联会对体系的超导态性质产生什么影响.

我们通过强耦合方法研究了这一问题. 在强耦合方法中, 电子超导配对序参量自然以各轨道为基定义, 方便考察轨道选择效应. 具体来说, 考察一个多轨道的 t - J_1 - J_2 模型 [31,32]. 当最近邻交换相互作用 J_1 占主导时, 超导序参量具有d波 B_{1g} 对称性;

当次近邻交换相互作用 J_2 占主导时, 超导序参量具有s波 A_{1g} 对称性. 由铁砷超导体母体的磁性分析, J_2 占主导, 即通常超导序参量具有s波 A_{1g} 对称性. 当这一序参量占主导时, 足够强的轨道选择性可以导致电子型费米面处超导能隙的各向异性以及超导态自旋共振峰的分裂 [33]. 这些效应已被ARPES与非弹性中子散射实验证实 [34,35]. 当 $J_1 \approx J_2$ 时, s波 A_{1g} 与d波 B_{1g} 两个超导配对频道近似简并. 这时足够强的轨道选择性可以使超导配对态同时具有s波与d波的部分性质: 配对态的对称性是 B_{1g} , 但形式因子(即超导序参量在动量空间分布)具有s波的形式, 即 $\cos k_x \cos k_y$ [36]. 这一新颖的超导配对模式可以解释 $K_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ 体系中发现的费米面处完全的超导能隙与在波矢 $\mathbf{k} = (\pi, \pi/2)$ 处的自旋共振峰 [37-41].

5.2 极端空穴掺杂的 $A\text{Fe}_2\text{As}_2$ 系统($A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$)中的电子关联

以 KFe_2As_2 为代表的 $A\text{Fe}_2\text{As}_2$ 体系($A=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$)是另一类具有丰富物理的铁基超导体体系. 这类体系中铁的价态为+2.5, 即每个铁离子上电子填充数为5.5. 实验上发现 KFe_2As_2 体系只存在空穴型费米面 [42]. 虽然超导转变温度 T_c 只有3.5 K, 但有实验证据显示超导可能是非常规的 [43-46]. 其超导正常态表现出较强的电子关联 [47-50]. 对这类体系电子关联性质的研究可以帮助我们理解多轨道体系在电子填充数 $N = 6$ 与 $N = 5$ 基态间的联系, 例如轨道选择性如何从 $N = 6$ 向 $N = 5$ 的情形演化.

最近对 $A\text{Fe}_2\text{As}_2$ 体系的研究显示某些轨道(如xy轨道等)可能临近莫特转变, 即体系可能临近轨道选择的莫特相. 这些轨道中电子表现出强烈的局域化趋势, 可以解释实验上观测到的增强的自旋关联与异常增大的电子比热系数 [49,50]. 这些实验结果 [49,50] 还建议体系可能临近一反铁磁量子临界点. 如何解释这一反铁磁量子临界点的起源, 它与轨道选择以及体系超导之间有什么联系尚需理论和实验上继续探索.

6 总结与展望

最近几年对铁基超导体的实验与理论研究使得我们对铁基超导体的物理性质与其背后的微观

机理有了深入的认识. 体系超导态与正常态之间有紧密的联系, 认识铁基超导体正常态的电子关联性质是理解体系非常规超导电性的重要一步. 铁基超导体正常态表现出坏金属行为, 体现在室温下异常大的直流电阻率、减弱的光电导 Drude 峰、ARPES 中增大的电子有效质量、中子散射中发现的局域磁矩的证据等. 这些实验现象揭示了铁基 (包括铁砷与铁硒类) 超导体系具有较强的电子关联, 临近金属-莫特绝缘体相变. 理论上通过应用赝自旋方法对铁基超导体多轨道哈伯德模型金属-绝缘体相变的研究, 得到了体系基于电子关联的基态相图, 印证了从实验得到的推论. 分析理论相图帮助我们理解电子关联的多轨道效应. 其中对铁基超导体系最为重要的是轨道选择性, 即部分轨道 (在铁基超导体系中通常是铁的 3d xy 轨道) 上电子处于莫特局域化态, 其他轨道电子处于巡游态. 轨道选择性在铁基超导相图中是普遍的, 它源自洪德耦合与体系晶体场劈裂的共同作用. 它尤其重要地影响铁硒类 (如 $K_xFe_{2-y}Se_2$ 系统) 超导体正常态的性质. 实验与理论研究表明铁硒类超导体基态临近轨道选择的莫特转变.

电子关联除影响铁基超导体正常态的性质外, 也对超导态的性质有重要影响. 根据体系中电子关联的强弱可以判断某一理论适用于真实系统的程度. 从铁基超导体临近莫特转变可以推断出磁性在超导微观机理上扮演重要角色. 从大部分铁基超导体超导配对对称性符合扩展的 s 波 (即在电子型与空穴型费米面处超导序参量改变符号) 对称性来看, 电子自旋次近邻交换作用 J_2 起到了主导作用, 而电子费米面的几何拓扑性质的作用是次要的. 另外, 电子关联的轨道选择效应也直接影响到体系超导态的性质, 包括在 s 波配对态引起电子费米面处超导能隙的各向异性与使基态具有新的 s 波 B_{1g} 超导配对对称性等方面.

目前对铁基超导体电子关联的理论研究大多集中于正常态的四方顺磁相中. 这一方面是为了集中研究电子关联的效应而作的简化, 另一方面也是因为缺乏研究对称性破缺相内电子关联效应的理论工具. 但是在铁基超导体系, 电子的反铁磁相与顺磁向列相和电子关联效应之间的关系是一个重要而尚未完全研究清楚的问题. 在未来的研究中, 将会发展现有的赝自旋技术等理论工具, 进一步探索电子关联, 特别是轨道选择性与对称性破缺相之

间的关系.

感谢美国莱斯大学物理系斯其苗教授、洛斯阿拉莫斯国家实验室的朱建新博士的合作以及加州大学伯克利分校物理系李东海教授的讨论.

参考文献

- [1] Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, Hosono H 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296
- [2] Ren Z A, Lu W, Yang J, et al. 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 2215
- [3] Hsu F C, Luo J Y, Yeh K W, et al. 2008 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 14262
- [4] Guo J, Jin S, Wang G, et al. 2010 *Phys. Rev. B* **82** 180520
- [5] Fang M, Wang H D, Dong C H, et al. 2011 *Europhys. Lett.* **94** 27009
- [6] Wang Q Y, Li Z, Zhang W H, et al. 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 037402
- [7] He S, He J, Zhang W, et al. 2013 *Nat. Mater.* **12** 605
- [8] Lee J J, Schmitt F T, Moore R G, et al. 2014 *Nature* **515** 245
- [9] Zhang Z, Wang Y, Song Q, et al. 2015 *Sci. Bull.* **60** 1301
- [10] Ge J F, Liu Z L, Liu C, et al. 2015 *Nat. Mater.* **14** 285
- [11] Bardeen J, Cooper L, Schrieffer J R 1957 *Phys. Rev.* **106** 162
- [12] Cho A 2010 *Science* **327** 1320
- [13] de la Cruz C, Huang Q, Lynn J W, et al. 2008 *Nature* **453** 899
- [14] Yi M, Lu D H, Analytis J G, et al. 2009 *Phys. Rev. B* **80** 024515
- [15] Hussey N E, Takenaka K, Takagi H 2004 *Philoso. Mag.* **84** 2847
- [16] Qazilbash M, Hamlin J J, Baumbach R E, et al. 2009 *Nat. Phys.* **5** 647
- [17] Liu M, Harriger L W, Luo H, et al. 2012 *Nat. Phys.* **8** 376
- [18] Tamai A, Ganin A Y, Rozbicki E, et al. 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 097002
- [19] Yi M, Lu D H, Yu R, et al. 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 067003
- [20] Yi M, Liu Z K, Zhang Y, et al. 2015 *Nat. Commun.* **6** 7777
- [21] Bao W, Huang Q Z, Chen G F, et al. 2011 *Chin. Phys. Lett.* **28** 086104
- [22] Castellani C, Natoli C R, Ranninger J 1978 *Phys. Rev. B* **18** 4945
- [23] Kotliar G, Ruckenstein A E 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1362
- [24] Florens S, Georges A 2004 *Phys. Rev. B* **70** 035114
- [25] de'Medici, L Georges A, Biermann S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205124
- [26] Hassan S R, de'Medici L 2010 *Phys. Rev. B* **81** 035106

- [27] Yu R, Si Q 2012 *Phys. Rev. B* **86** 085104
- [28] Yu R, Si Q 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 146402
- [29] Zhu J X, Yu R, Wang H, *et al.* 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 216405
- [30] Yu R, Zhu J X, Si Q 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 186401
- [31] Goswami P, Nikolic P, Si Q 2010 *Europhys. Lett.* **91** 37006
- [32] Yu R, Goswami P, Si Q, Nikolic P, Zhu J X 2013 *Nat. Commun.* **4** 2783
- [33] Yu R, Zhu J X, Si Q 2014 *Phys. Rev. B* **89** 024509
- [34] Ge Q Q, Ye Z R, Xu M, *et al.* 2013 *Phys. Rev. X* **3** 011020
- [35] Zhang C, Yu R, Su Y, *et al.* 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 207002
- [36] Nica E, Yu R, Si Q 2015 arXiv:1505.04170
- [37] Mou D, Liu S, Jia X, *et al.* 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 107001
- [38] Wang X P, Qian T, Richard P, *et al.* 2011 *Europhys. Lett.* **93** 57001
- [39] Wang X P, Richard P, Shi X, *et al.* 2012 *Europhys. Lett.* **99** 67001
- [40] Park J T, Friemel G, Li Y, *et al.* 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 177005
- [41] Friemel G, Park J T, Maier T A, *et al.* 2012 *Phys. Rev. B* **85** 140511
- [42] Sato T, Nakayama K, Sekiba Y, *et al.* 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 047002
- [43] Reid J-Ph, Tanatar M A, Juneau-Fecteau A, *et al.* 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 087001
- [44] Okazaki K, Ota Y, Kotani Y, *et al.* 2012 *Science* **337** 1314
- [45] Hong X C, Li X L, Pan B Y, *et al.* 2013 *Phys. Rev. B* **87** 144502
- [46] Zhang Z, Wang A F, Hong X C, *et al.* 2015 *Phys. Rev. B* **91** 024502
- [47] Hardy F, Böhmer A E, Aoki D, *et al.* 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 027002
- [48] Wang A F, Pan B Y, Luo X G, *et al.* 2013 *Phys. Rev. B* **87** 214509
- [49] Wang P, Zhou P, Dai J, *et al.* 2015 arXiv:1503.08298
- [50] Eilers F, Grube K, Zocco D A, *et al.* 2015 arXiv:1510.01857

SPECIAL ISSUE—Progress in research of superconductivity and correlated systems

Electron correlations and orbital selectivities in multiorbital models for iron-based superconductors*

Yu Rong[†]

(Beijing Key Laboratory of Opto-electronic Functional Materials & Micro-nano Devices, Department of Physics, Renmin University of China, Beijing 100872, China)

(Received 22 October 2015; revised manuscript received 28 October 2015)

Abstract

We review the recent theoretical progress of the multiorbital effects on the electron correlations in iron-based superconductors. Studying the metal-to-insulator transitions of the multiorbital Hubbard models for parent compounds of iron-based superconductors, a Mott transition is generally realized. The natures of both the Mott insulating and the metallic phases are affected by the Hund's rule coupling. In alkaline iron selenides, Hund's rule coupling stabilizes a novel orbital-selective Mott phase, in which the iron 3d xy orbital is Mott localized, while other 3d orbitals are still itinerant. We discuss the effects of the orbital selectivity on normal state properties and the superconductivity of the iron-based systems.

Keywords: iron-based superconductors, multiorbital Hubbard model, Mott transition, orbital selectivity

PACS: 71.30.+h, 74.70.Xa, 71.10.Hf, 71.27.+a

DOI: 10.7498/aps.64.217102

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11374361) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (the Research Funds of Renmin University of China, Grant No. 2014030193).

† Corresponding author. E-mail: rong.yu@ruc.edu.cn