

铁基超导体 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 中磁性相互作用的中子散射

罗会任

Citation: [科学通报](#); doi: 10.1360/N972017-00811

View online: <http://engine.scichina.com/doi/10.1360/N972017-00811>

Published by the [《中国科学》杂志社](#)

Articles you may be interested in

[铁基超导体中自旋向列相的中子散射研究取得重要进展](#)

[科学通报](#) **59**, 2537 (2014);

[非晶态 \$\text{Fe}_{\(90-x\)}\text{Co}_x\text{Zr}_{\(10\)}\$ 合金的非弹性中子散射研究](#)

[科学通报](#) **38**, 2131 (1993);

[极化中子衍射及在电子自旋密度研究中的应用](#)

[中国科学B辑: 化学](#) **39**, 1569 (2009);

[\$\alpha\$ - \$\text{FeOOH}\$ 和 \$\gamma\$ - \$\text{FeOOH}\$ 分别制备 \$\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}\$ 的形成历程及磁性能对比](#)

[科学通报](#) **55**, 274 (2010);

[MAGNETIC ANISOTROPY OF \$\text{BaFe}_{\(12-x\)}\text{Ru}_x\text{O}_{\(19\)}\$ SINGLE CRYSTALS](#)

[Chinese Science Bulletin](#) **26**, 113 (1981);

铁基超导体 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 中磁性相互作用的中子散射

罗会仟

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

E-mail: hqluo@iphy.ac.cn

2017-07-25 收稿, 2017-08-16 修回, 2017-08-17 接受, 2017-09-27 网络版发表

国家重点基础研究发展计划(2011CBA00110, 2012CB821400, 2015CB921302)、国家自然科学基金(11004233, 11374011, 91221303, 11611130165)、中国科学院战略性先导科技专项(B类)(XDB07020300)和中国科学院青年创新促进会(2016004)资助

摘要 铁基超导电性起源于对母体中长程反铁磁序的压制, 理解其超导微观机理的关键在于清楚认识磁性相互作用的演化规律, 及其与超导电性的具体关系. 本文以典型的电子型掺杂铁基超导体 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 为对象, 介绍了中子散射实验针对其电子态相图、磁有序态、低能磁激发和高能自旋涨落谱等磁性物理的相关研究, 着重总结他们随掺杂的系统演变规律, 同时介绍了在自旋向列相中的最新研究进展. 最后, 基于这些结果, 提出了磁性相互作用驱动的非常规铁基超导电性的可能物理图像.

关键词 铁基超导, 中子散射, 磁有序, 磁激发, 自旋涨落

以铁砷化物和铁硒化物为主的铁基超导体自2008年初发现以来, 受到了凝聚态物理领域的广泛关注^[1]. 由于 $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ 块体材料临界温度可达55 K以上^[2], 单层 FeSe 薄膜临界温度更是在65 K以上^[3]. 这意味着, 铁基超导材料属于继铜氧化物高温超导材料之后的第二类高温超导家族, 它的发现和研究有助于加快高温超导应用和高温超导机理研究进程^[4]. 铁基超导电性通常来自于对母体的化学掺杂或者加压, 掺杂的方式可以是电子型、空穴型或同价掺杂^[5]. 早期的中子散射实验表明, 铁基超导材料的母体具有三维长程反铁磁序, 超导电性出现在反铁磁序被抑制之后, 这预示着铁基超导体和铜氧化物超导体、重费米子超导体等同属于非常规超导体^[6]. 因此, 理解铁基超导电性的起源, 必须清楚认识其中的磁相互作用物理, 特别是随掺杂的具体演化规律, 进而阐明磁性在超导机理中的微观机制^[7].

$\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 材料作为典型的122结构电子掺杂铁基超导体, 结构和物性均具有代表性(图1)^[4~8]. 由于Ni掺杂含量可以通过制备均匀的Fe-Ni-As前驱粉来精细调控, 而且该体系单晶样品适合用助熔剂法生长, 易于获得厘米量级的大尺寸晶体, 成分可覆盖整个掺杂相图区域, 因此非常适合利用中子散射来详细研究掺杂对磁性的影响(图2)^[9]. 自2008年以来, 针对该体系的中子散射研究已经持续了8年余, 取得了一系列重要进展, 加深了我们对铁基超导磁性起源和磁相互作用机制的理解.

本文将 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 体系为例, 详细介绍中子散射实验在磁结构、磁相变、磁激发等方面的研究结果, 涉及电子态相图、量子临界特性、局域-巡游磁性、自旋共振模、自旋涨落谱、自旋向列相等多方面的关键物理, 通过总结他们的掺杂演化规律, 进而提出磁性相互作用驱动的非常规铁基超导电性的可

引用格式: 罗会仟. 铁基超导体 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 中磁性相互作用的中子散射. 科学通报, 2017

Luo H Q. Neutron scattering studies on the magnetic interaction in iron-based superconductor $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ (in Chinese). Chin Sci Bull, 2017, doi: 10.1360/N972017-00811

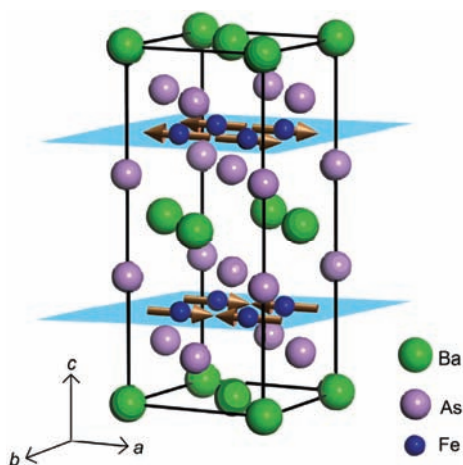


图1 (网络版彩色)BaFe₂As₂的晶体结构和磁结构(正交相)
Figure 1 (Color online) Crystal structure and magnetic structure of BaFe₂As₂ (orthorhombic phase)

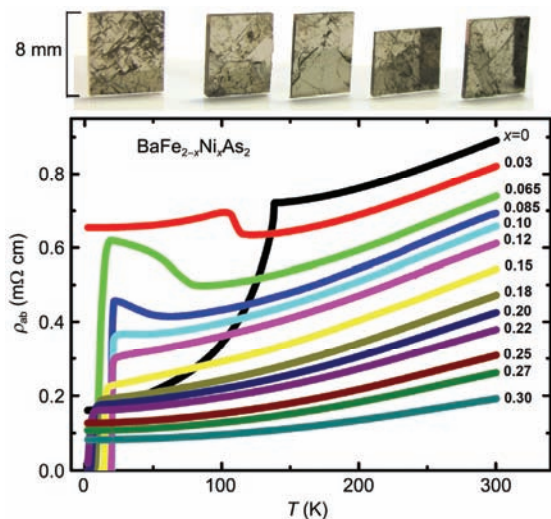


图2 (网络版彩色)BaFe_{2-x}Ni_xAs₂的单晶照片和电阻率
Figure 2 (Color online) Photo and resistivity of BaFe_{2-x}Ni_xAs₂ single crystal

能物理图像。

1 磁结构与磁相变

BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系具有典型的ThCr₂Si₂晶体结构,又归类为122体系,对应空间群为I_{4/mmm}。它的每个元胞里含有两层Fe-As层,其中Ba原子在FeAs夹层之间,Ni掺杂在Fe位上,每个Ni离子近似于掺杂2个电子,因此属于电子型掺杂铁基超导体^[10]。利用粉末中子衍射,可以发现该体系母体BaFe₂As₂在140 K以下存在长程反铁磁序,每个Fe离子贡献约0.87μ_B磁

矩,方向均保持在Fe-Fe面内。不同于铜氧化物超导材料母体中的奈尔反铁磁序(磁矩在*a*和*b*方向都是反铁磁排列),BaFe₂As₂中磁矩沿正交相*a*方向是反铁磁排列、沿*b*方向是铁磁排列,又称“共线型”反铁磁序(图1),面内磁结构和1111及111铁基超导体体系完全相同^[7,11]。这种磁结构明显打破了面内的四重旋转对称性(C₄),其中一个重要的诱因是,伴随着磁有序的形成,降温过程同时还会发生从高温四方相(空间群I_{4/mmm})到低温正交相(空间群F_{mmm})的结构相变,母体中结构相变温度和磁相变温度重合。相变前后的晶格参数为^[11]:*a*=*b*=3.95702 (4) Å, *c*=12.9685 (2) Å和*a*=5.61587 (5) Å, *b*=5.57125 (5) Å, *c*=12.9428 (1) Å。由于*a*轴的伸长,导致晶格的面内对称性也同样将为二重旋转对称(C₂),该结构相变的形成与电子态对称性的演变密切相关。

进一步详细研究BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系的结构相变和磁相变乃至自旋动力学行为,需要大尺寸、高质量、多掺杂的单晶样品。通过自助熔剂法,可以成功获得尺寸在厘米量级、重量在克量级的单晶样品(图2)。具体为先配置Fe-Ni-As前驱粉,在500和700℃下经过多次固相烧结和反复研磨,获得成分均匀的助熔剂原料。然后按照Ba和助熔剂1:5的比例进行混合,在1180℃下充分融化,再以5℃/h速率缓慢降温到1050℃,即可获得几乎和坩埚直径一样大的单晶。虽然说自助熔剂法比较粗糙原始,但是利用多次研磨混合的前驱粉可以保证掺杂均匀度,Ba和Fe-Ni-As原料熔点均低于1200℃的石英管软化温度,相对碱金属而言,Ba对氧化铝坩埚和石英管的腐蚀性要小,因此可以说利用该方法生长BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系单晶是非常便捷且有质量保证的。其他的一些122型铁基超导体体系,要么熔点过高,要么腐蚀性太强,要么掺杂均匀度很难控制,相对而言比获得系列掺杂的大单晶要困难得多。单晶X射线衍射、ICP化学成分分析、电磁输运测量等表征结果说明,自助熔剂法生长的BaFe_{2-x}Ni_xAs₂单晶具有非常高的质量和很好的系列性,其实际组分和名义组分比例保持在0.8,晶格参数随掺杂线性变化,超导样品能达到转变宽度很窄的体超导,大块单晶的中子衍射摇摆曲线半高宽在0.3°左右^[9]。正是有了BaFe_{2-x}Ni_xAs₂晶体质量和数量的保障,中子散射的实验才得以顺利推进,并使得该体系成为铁基超导体家族中子散射研究最为清楚的材料。

从电阻率测量结果来看, $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 体系整体呈现金属导电性, 并随着Ni掺杂增加电阻率逐渐降低^[12]. 发生结构相变并进入磁有序态之后, 母体 BaFe_2As_2 的电阻将进一步下降. 一旦掺杂Ni之后, 电阻对结构相变和磁相变的响应变为随温度下降而增加(图2). 因此从电阻的拐点(一阶微分变化)可以粗略定出结构相变温度 T_s 和磁性相变温度 T_N , 然而这种方法显然是过于间接且不够精确的, 需要衍射实验来进一步确认^[13]. 超导临界温度 T_c , 可以通过电阻和磁化测量给出, 一般零电阻出现的温度点对应负磁化率出现的温度点. $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 中的超导区出现在 $x=0.05$ 到 $x=0.25$ 范围内, 最佳超导点为 $x=0.1$, 临界温度为 20 K ^[9].

利用同步辐射光源上的高精度X射线单晶衍射实验, 可以精确测量晶体结构参数随温度的演化行为. 我们定义结构相变序参量为无量纲的 $\delta=(a-b)/(a+b)$, 低于测量分辨率($<10^{-5}$)则认为结构畸变消失, 对应温度点就是严格定义的 T_s . 利用三轴谱仪进行单晶的弹性中子散射实验, 可以准确测量磁有序随温度的演化行为. 同样可以定义磁相变的序参量为磁布拉格峰强度, 对应磁波矢为 $Q=(1, 0, L)$ ($L=\pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$) (注: 因为是Fe-As双层结构, 面间磁矩也是反铁磁排列, 所以在 L 为偶数的波矢是消光的)^[4-7]. 磁布拉格峰强度低于谱仪分辨率(有效磁矩 $<10^{-3}\mu_B$) 则认为磁有序彻底消失, 对应温度点就是严格定义的 T_N . 通过 T_s 和 T_N 的直接测量, 结合电磁输运对 T_c 的测量, 我们给出了 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 体系最为精确的电子态相图(图3)^[14]. 随着Ni掺杂的增加, T_s 和 T_N 将分开并逐步下降, 说明反铁磁序和结构畸变被电子掺杂所抑制. 进入 $x=0.05$ 以上的超导区后, 反铁磁序在正交相中与超导序共存. 当逼近超导的最佳掺杂点 $x=0.1$ 时, T_s 和 T_N 又逐步靠近并重合, 说明系统存在很强的自旋-晶格耦合. 非常值得关注的是, 磁有序和晶格畸变强度都将因为超导序的出现而急剧减弱, 最终导致 T_s 和 T_N 都在最佳 $T_c(20\text{ K})$ 以上的有限温度 ($\sim 32\text{ K}$)截止. 即磁有序消失类似于二阶相变, 而不是如量子相变理论预言的二阶相变(T_N 被掺杂而持续稳定地抑制到零温). 同时, 靠近最佳掺杂点时, 长程反铁磁有序蜕化成了短程非公度的磁有序, 磁关联长度迅速缩短至消失, 这也不符合量子临界点的特征. 结合电输运测量分析, 可以发现尽管该体系存在非费米液体行为反常, 但是并没有很好的线性

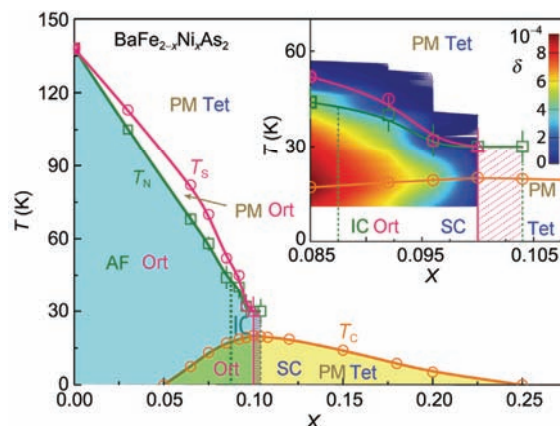


图3 (网络版彩色) $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 的精细电子态相图^[15]

Figure 3 (Color online) Electronic phase diagram of $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ ^[15]

电阻率出现, 且反常点出现在过掺杂区 $x=0.15$ 附近^[15]. 这些证据表明, $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 体系中并不存在量子临界点, 或者说非公度磁有序的出现导致了结构和磁性双量子临界点“被取消”, 非常规超导电性未必一定要和量子临界现象关联起来. 该现象的本质在于, 随着掺杂进入最佳超导区, 反铁磁序会和超导序在共存状态同时又存在剧烈的竞争, 导致微观尺度下面内磁矩存在空间调制, 形成了一个短程关联的磁性团簇, 整体呈现出类似自旋玻璃态的短程非公度磁有序^[16]. 这恰恰说明了, 磁性和超导在铁基材料中既相互依存, 又相互竞争, 从而构成了复杂的电子态相图.

2 巡游磁性与自旋共振

由于铁基超导体存在长程反铁磁序, 且有效磁矩来自Fe离子的四方晶格, 理论上自然认为磁性起源于Fe的局域磁矩, 通过交换相互作用产生自旋关联, 这便是铁基超导中的局域磁矩模型^[17]. 然而, 材料的有效磁矩总是远小于局域磁矩模型的估计数值, “丢失”的一部分磁矩可能被巡游电子稀释^[18,19]. 确实, 铁基超导材料属于多带体系, 共有5个能带穿越费米面, 在布里渊区中心 Γ 点形成两个空穴口袋, 边缘 M 点形成两个电子口袋^[20]. 理论上, 如果空穴-电子口袋之间存在费米面嵌套, 那么费米口袋间就会有很强的散射, 从而费米面附近的巡游电子也能构成长程磁有序, 类似于金属Cr中的非公度巡游磁序^[21]. 而实验观测到的反铁磁波矢, 恰恰和费米面嵌套波矢完全一致. 理论上进一步认为, 如果两类费

米口袋上的电子通过交换反铁磁相互作用而产生配对, 所形成的超导电性对称性必然是符号相反的s波(s_{\pm}), 这也被越来越多的实验所证实^[4,22]. 究竟铁基超导材料中的磁性来自于局域磁矩还是巡游电子, 至今仍然存有争议^[23]. 不过, 越来越多的证据表明, 两者或并存于其中, 通过洪特耦合相互作用而产生电子关联效应^[24].

巡游反铁磁性的直接证据主要来自两个方面: 长程非公度的静态磁有序和磁激发纵模. 前者来自于费米面轻度失配导致的多重嵌套波矢, 后者来自于巡游磁矩在纵向(有效磁矩方向)的低能涨落. 由于磁激发纵模的存在, 即使磁激发本身是非公度的, 但也会在公度波矢处出现类似自旋共振的激发模, 对应着Fincher-Burke (FB) 模线性色散交叉点^[25]. 以上结果在金属Cr中早已被实验证实^[21]. 在Ni和Co掺杂的铁基超导体中, 非公度磁有序确实出现在了靠近电子最佳掺杂点区域^[14,15,26,27], 但这并不是人们所期待的费米面嵌套失配结果, 因为他们往往是短程有序, 属于类似自旋玻璃团簇的行为(图3)^[16]. 即使在空穴型掺杂体系中, 靠近最佳掺杂区域往往出现新的具有 C_4 对称性的双波矢反铁磁序, 仍不见长程非公度磁有序^[28,29]. 而且, 即使在具有非公度磁有序的电子掺杂样品中, 其低能磁激发仍然是公度的, 这与Cr中的结果大不相同. 然而, 极化中子散射实验表明, 即使在母体材料里面, 尽管因强烈反铁磁序而形成严重各向异性的自旋能隙, 但仍然存在非零的纵模 M_a , 只是相对横模 M_b 和 M_c 而言要小得多(图4)^[30]. 该纵模持续存在到了最佳掺杂点附近, 并最终在过掺杂不超导区域消失. 非常值得强调的是, 一旦进入极度过掺杂不超导区域, 由于电子费米口袋急剧增

大, 空穴口袋最终缩小到消失, 费米面嵌套关系便不再成立, 低能磁激发由此消失^[31,32]. 例如在 $x=0.3$ 样品中, 50 meV以下的磁激发几乎完全为零^[33]. 细分析低能磁激发在动量空间的分布, 就会发现随着电子口袋和空穴口袋的不匹配, 低能磁激发形状将沿着 K 方向(横向)不断拉长(图5)^[34]. 这些证据表明, 铁基超导体的磁性确实有巡游电子的贡献, 其物理实质还需要进一步研究来澄清.

研究铁基超导体巡游磁性的另一方面重要意义, 在于费米面嵌套机制可能是超导配对的来源. 理论上认为, 如超导确实来自 s_{\pm} 形式的电子配对, 那么费米面嵌套波矢附近就有可能出现自旋共振现象, 即某一能量/动量附近的低能磁激发会出现超导序参量式的响应, 激发强度在超导态下得到增强(图6)^[35]. 这一结果首先在空穴掺杂的 $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ 中观测到^[36], 后来陆续在 $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ 乃至其他各种铁基超导体中被证实, 包括各种掺杂方式的122、1111、111、11等超导体^[4-7]. 和铜氧化物超导体及重费米子超导体一样, 铁基超导体自旋共振模中心能量与超导临界温度也成线性标度关系, 体现了这三者的非常规超导电性可能有相同起源^[4]. 具体材料的自旋共振模行为比较复杂, 如 $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ 和FeSe中可能存在多个共振模或严重极化的共振模^[37,38]. $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ 中共振模在 L 方向存在轻度调制^[39], 且随能量增加有类似自旋波行为的显著色散关系^[40], 而且中心共振能量随温度增加基本不变^[32,41]. 由于自旋共振能量分布很宽, 磁场下的共振峰会略展宽, 但目前尚未观测到劈裂行为^[42], 极化中子散射分析认为 $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ 的共振模几乎是空间各向同性的(图6)^[43-45]. 因此, $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ 中的自旋共振模更可能是属于自旋单

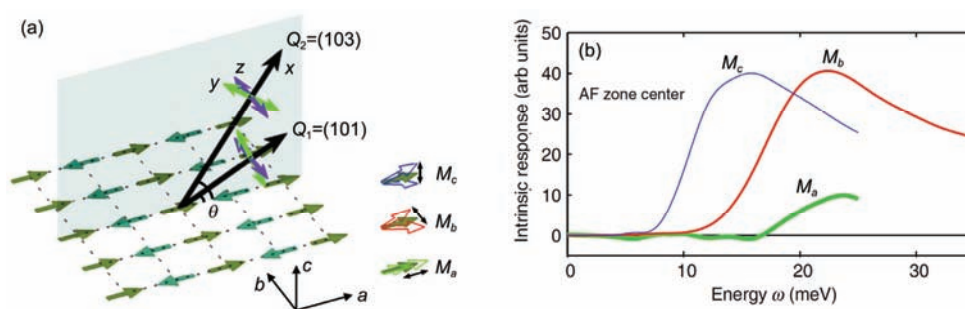


图4 (网络版彩色)BaFe₂As₂母体的极化中子散射实验. (a) 中子极化方向与自旋涨落模式; (b) 反铁磁区中心的磁激发横模 M_b , M_c 与纵模 M_a ^[30]
Figure 4 (Color online) Polarized neutron scattering analysis on the BaFe₂As₂ parent compound. (a) Polarization of neutron and spin fluctuation modes; (b) transverse mode M_b , M_c and longitudinal mode M_a of the spin excitations in the antiferromagnetic zone center^[30]

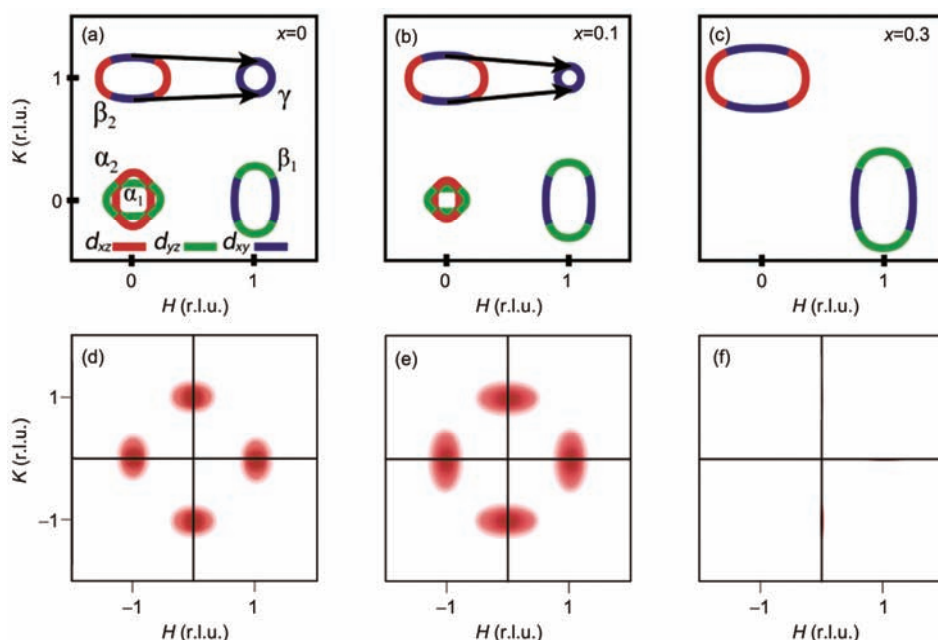


图5 (网络版彩色)BaFe_{2-x}Ni_xAs₂在母体 $x=0$ 、最佳掺杂 $x=0.1$ 和极度过掺杂 $x=0.3$ 情况下的(a)~(c)费米面嵌套与(d)~(f)低能磁激发^[33]

Figure 5 (Color online) (a)~(c) Fermi surface nesting and (d)~(f) low-energy spin excitations in the BaFe_{2-x}Ni_xAs₂ system with dopings at $x=0$ (parent), $x=0.1$ (optimal) and $x=0.3$ (heavily overdoped)^[33]

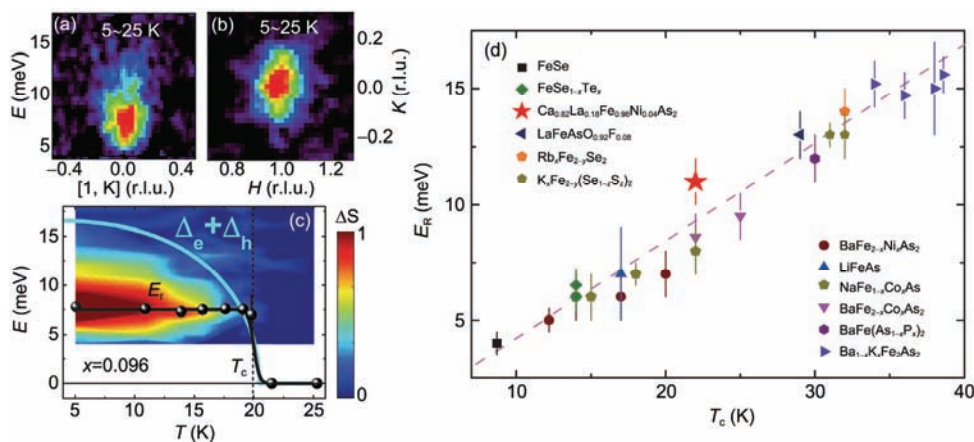


图6 (网络版彩色)自旋共振效应. (a)~(c) BaFe_{1.904}Ni_{0.096}As₂中自旋共振效应的能量、动量和温度依赖关系^[32]; (d) 铁基超导材料体系中自旋共振能 E_R 与临界温度 T_c 的线性标度关系^[4]

Figure 6 (Color online) Spin resonance effect. (a)~(c) Energy, momentum and temperature dependence of spin resonance in BaFe_{1.904}Ni_{0.096}As₂ superconductor; (d) linear scaling between the spin resonance energy and T_c

态到三重态的集体激发^[46], 几乎是空间各向同性的, 与各向同性的超导配对一致. 但这不排除其他铁基超导体存在空间极化的自旋共振模, 或与轨道选择的超导配对有关.

3 自旋涨落谱演化

为了理解铁基超导材料中磁相互作用与超导电性的关系, 我们需要测量自旋涨落谱随掺杂的具体

演化规律, 特别是比较不同能量尺度下的自旋涨落强度对掺杂的依赖关系. 该类实验需要更为先进的飞行时间中子散射技术, 以及大量的单晶样品(单次实验20 g以上单晶), 才能把不同能量尺度的自旋激发全部测量清楚. 由于测量数据量往往非常大, 需要花费很长的时间去具体分析, 加上实验机时的限制, 所以我们前后花费了6余年时间才把BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系的自旋涨落谱的掺杂依赖关系测量清楚^[5,7,47].

对于母体BaFe₂As₂(*x*=0)来说, 由于长程反铁磁序的存在, 出现一个10 meV左右的自旋能隙. 随着能量的增加, 自旋激发从反铁磁波矢中心 $Q_{AF}=[\pm 1, 0]$ 逐渐往外扩散, 在 $[H, K]$ 平面形成一个 K 方向伸长的椭圆形, 逐渐向布里渊区边界点 $[\pm 1, \pm 1]$ 色散, 最终在180 meV左右达到带顶(图7)^[48]. 值得注意的是, 在未加单轴压力退孪晶情况下, 低温下的孪晶结构将导致系统整体存在90°的旋转对称关系, 即在 $Q=[0, \pm 1]$ 处也存在磁激发. 基于海森堡模型, 我们可以用有效哈密顿量来拟合母体中的自旋波, 得到有效磁交换能为: $SJ_{1a}=59.2\pm 2.0$, $SJ_{1b}=-9.2\pm 1.2$, $SJ_2=13.6\pm 1.0$, $SJ_c=1.8\pm 0.3$ meV. 注意到面内磁相互作用是存在严重各向异性的, 不仅 J_{1a} 和 J_{1b} 数值差异较大, 而且 H 方向的阻滞要比 K 方向大得多, 即 H 方向的自旋波会随能量增加迅速衰减. 特别注意的是, 即使该体

系能大致用海森堡模型来描述, 并不意味着磁性就一定起源于局域磁矩. 因为自旋激发的宽度和阻滞都要比理想的局域磁矩模型大得多, 说明巡游电子磁性同样存在体系之中, 这也是该体系磁性物理最为复杂的一面^[5,47,48].

随着Ni掺杂引入越来越多的电子, 体系的自旋涨落谱也随之发生演变. 首先, 在最佳掺杂样品 $x=0.1$ 中将会在低能形成很强的自旋共振峰, 反铁磁序带来的自旋能隙也会迅速闭合^[49]; 其次, 低能自旋激发强度会随掺杂迅速减弱, 并且色散的更加厉害一些, 直到过掺杂不超导的 $x=0.3$ 样品中50 meV以下低能磁激发彻底消失^[32,33]; 再者, 高能磁激发会随着掺杂增加略微弥散一些, 但整体的积分强度在80 meV以上几乎不随掺杂变化(图7和8)^[5,47]. 总的来说, 仅80 meV以下的自旋涨落谱受电子掺杂的影响, 这部

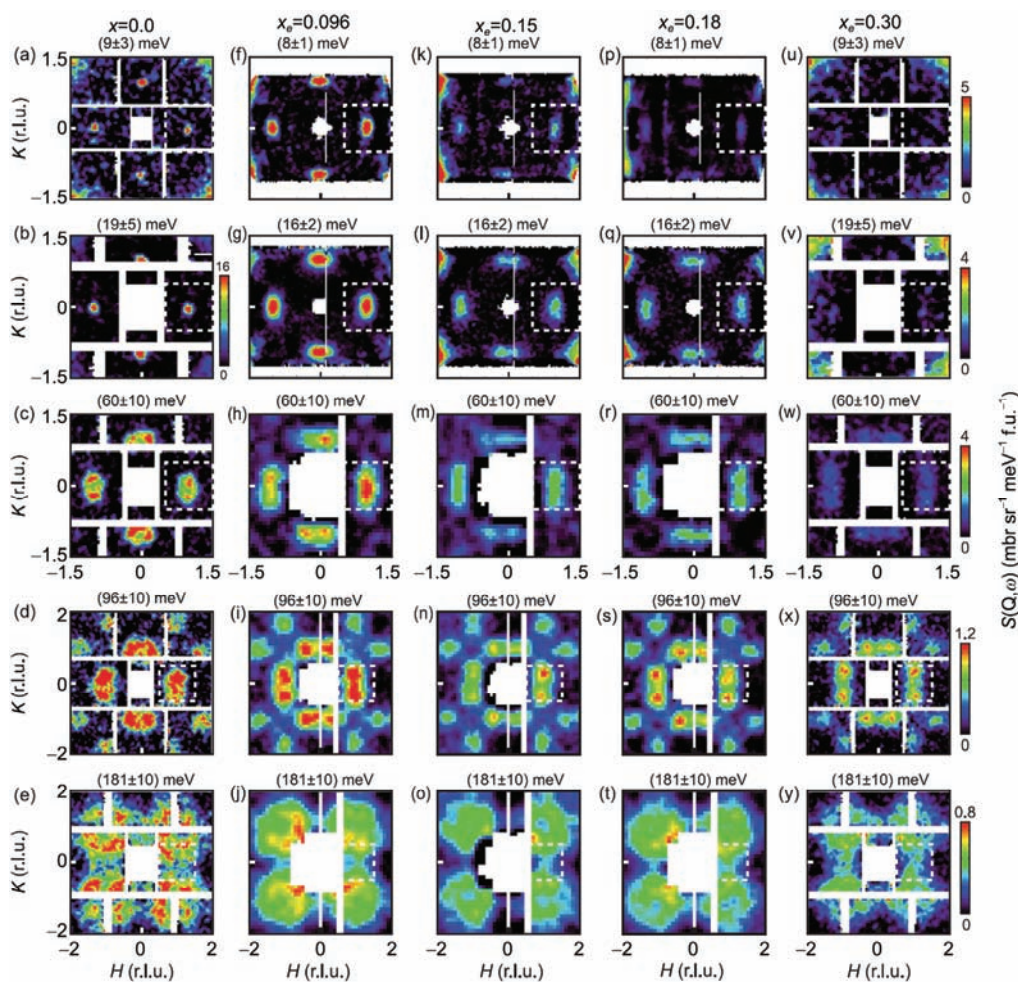


图7 (网络版彩色)BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系在不同电子掺杂浓度下的自旋涨落谱^[47]

Figure 7 (Color online) Doping dependence of the spin fluctuations in BaFe_{2-x}Ni_xAs₂ system^[47]

分的巡游磁性的贡献也是主要的. 我们在过掺杂区域边界做了非常详细的测量, 发现过掺杂样品低能磁激发的消失和空穴型费米口袋的消失完全一致, 进一步证实了巡游磁性对超导电性的关键作用^[47]. 但这并不意味着高能磁激发就不重要, 自旋涨落带宽不随掺杂变化就意味着磁交换能几乎不变, 这就给体系提供了一个很大的能量尺度作为背景, 低能磁激发与之充分耦合, 从而足以提供超导配对凝聚能. 倘若高能磁激发被抑制, 磁交换能迅速减小, 即使存在低能磁激发, 也难以实现高临界温度的超导电性, 这点在空穴型掺杂的 $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ 体系表现十分明显^[5,33,47].

4 自旋各向异性与向列相

随着温度的降低, 铁基超导材料往往会经历一个从四重对称的高温四方相到二重对称的低温正交相的结构相变, 主要是 a 轴会略微伸长, 导致 a 和 b 晶格常数不等, 系统内部随机选择 a 或 b 取向, 由此造成了低温下的孪晶结构^[11]. 只要在高温下沿着面内晶轴方向稍施加10 MPa左右的单轴压力, 就可以迫使体系在低温下只沿未加压力方向伸长晶轴, 从而实现退孪晶的单畴结构^[50]. 基于单轴压力下的退孪晶样品, 就可以研究系统的 ab 面内电子态的各向异性. 电输运、杨氏模量和光电导测量表明体系中存在很强的电子态各向异性, 例如 a 方向电阻率比 b 方向电阻率要小得多^[51-55]. 这种面内差异是远远大于晶格畸变度的, 而且持续到了高温的四方相之中, 即便晶格已基本恢复成四重对称, 其电子态仍然是二重对称的. 由此, 这种打破晶格原有旋转对称性的电子态便称之为“电子向列相”, 类似于液晶体系的向列相^[56]. 除了电荷输运各向异性外, 角分辨光电子能谱测量

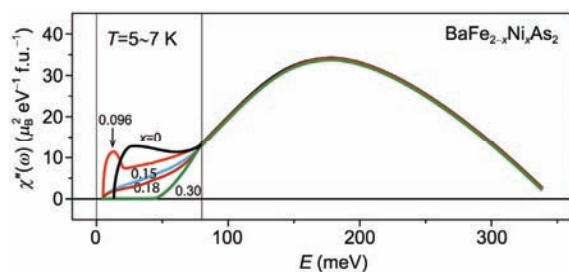


图8 (网络版彩色) $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 体系在不同掺杂浓度下的自旋涨落强度能量分布^[47]

Figure 8 (Color online) Doping and energy dependence of the spin fluctuations in $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ system^[47]

也发现了面内的 d_{xz} 和 d_{yz} 轨道劈裂也持续到了高温四方相中^[57]. 需要澄清一点的是, 理论上定义, 结构相变温度 T_s 实际上就是电子向列序的相变温度, 即电子态的向列型相变和晶格的结构相变是同时发生的^[58]. T_s 之上观测的面内电子态各向异性, 实际上是向列序的涨落(或称“向列型涨落”)体现. 向列序仅存在于 T_s 之下的欠掺杂区域, 但向列型涨落却可以持续到高温甚至分布到整个相图区域^[58]. 那么, 自旋体系是如何对电子向列响应的呢? 电子向列相的驱动力究竟是电荷、轨道还是自旋呢? 这需要非弹性中子散射实验来针对向列型涨落进行详细的研究.

利用极化中子散射实验的空间分辨能力和特定的 Q 空间点选择, 在未加单轴压力的孪晶样品中就可以针对低能磁激发的空间各向异性进行初步的研究. 通过测量几个等价 Q 点的磁激发在三维空间的分布, 就可以分析出沿着晶轴方向的3个磁激发模 M_a , M_b , M_c 等的大小(图9(a))^[30]. 对于接近最佳掺杂的 $x=0.096$ 样品($T_c=19.8$ K, $T_s \approx T_N=33 \pm 2$ K), 极化中子散射实验发现低能磁激发在6 meV以下存在明显的各向异性, 这个能量尺度和 d_{xz} , d_{yz} 轨道劈裂的能量相当^[57,59], 说明通过自旋-轨道耦合效应, 低能自旋激发对轨道序也存在直接响应. 这种磁激发各向异性主要来自于面内 M_a 和 M_b 的差异, 并持续到了高温四方相中, 差异消失温度和面内电阻率各向异性结果一致(图9(b))^[45]. 这个结果说明, 在铁基超导体系中, 电子向列相在电荷、轨道和自旋3个方面都存在明显的面内各向异性效应, 三者互相存在耦合, 难以区分彼此.

要证明自旋方面是否存在旋转对称破缺的向列相, 就必须在退孪晶的样品上开展非弹性中子散射实验, 研究磁激发强度在 $Q_1=[1, 0]$ 和 $Q_2=[0, 1]$ 的差异随温度的演变行为. 为此, 我们设计并加工了施加机械单轴压力的装置, 将大块单晶样品进行定向切割成8 mm×8 mm×0.5 mm左右的方形, 并充分将表面解离再置入单轴压力, 最终实现0.1~0.3 g左右晶体的退孪晶(图10(a)和(b)). 为了能够在同一个散射平面测量 Q_1 和 Q_2 , 我们首先将样品倾斜到 $L=1$ 平面并转45°角, 这样就既可以测量两个 Q 点的磁激发强度, 又能测量其关联长度(即磁激发的峰宽)(图10(a)). 如果自旋体系也存在向列相, 那么我们期待在结构相变温度 T_s 之上, 仍能观测到二重对称的自旋激发态, 即所谓“自旋向列相”(图10(c))^[60].

我们确实在退孪晶的母体和欠掺杂样品中观测

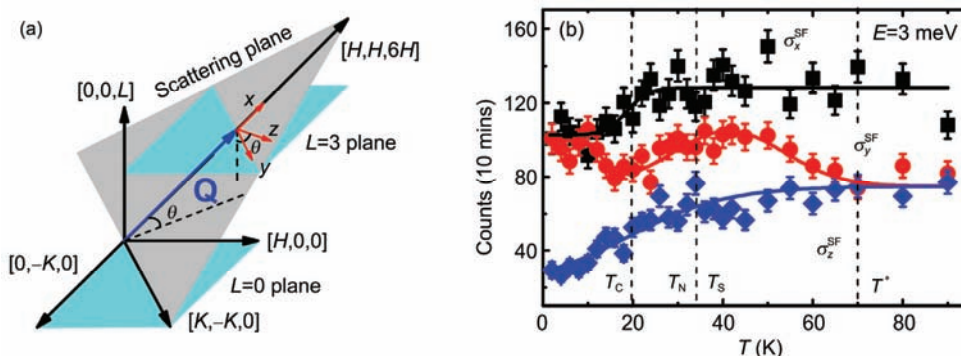


图9 (网络版彩色)BaFe_{1.904}Ni_{0.096}As₂极化中子散射实验. (a) 极化中子设置; (b) 低能磁激发的空间各向异性持续到高温四方相^[45]
Figure 9 (Color online) Polarized neutron scattering on BaFe_{1.904}Ni_{0.096}As₂. (a) Polarization set up; (b) anisotropic spin excitations at low energy persist up to tetragonal phase at high temperature^[45]

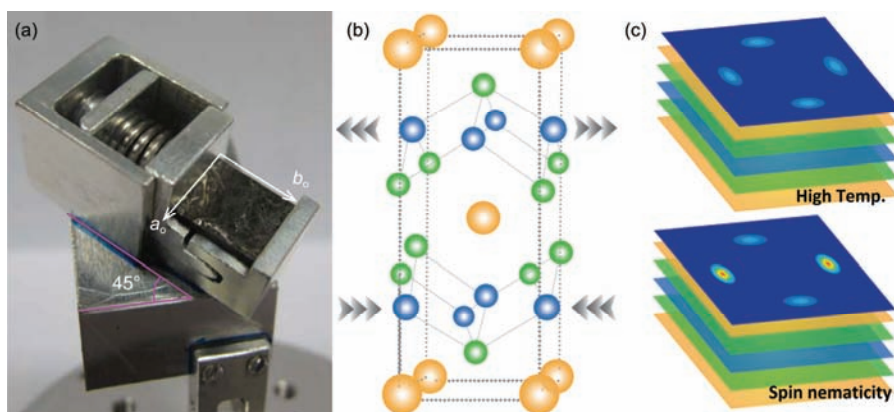


图10 (网络版彩色)在单轴压力下BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系退孪晶实验. (a) 实验装置; (b) 单轴压力示意图; (c) 动量空间二重对称的自旋向列相^[60]
Figure 10 (Color online) Uniaxial pressure device for detwinning of BaFe_{2-x}Ni_xAs₂. (a) Detwinning device; (b) detwinning pressure of the crystal; (c) expected spin nematicity with C₂ rotation symmetry at Q-space^[60]

到了明显自旋向列相证据. 对比 Q_1 和 Q_2 的磁激发, 可以发现 $Q_1=[1, 0]$ 处的磁激发强度要远大于 $Q_2=[0, 1]$ 处, 而磁激发峰宽则恰恰相反, 特别是 $Q_2=[0, 1]$ 处的峰宽在 T_s 之下突然增加. 也就是说, 无论是其强度还是峰宽都存在明显的各向异性, 且持续跨越到了 T_N 和 T_s 之上(图11). 详细分析磁激发强度差异随温度的关系, 就可以发现其基本遵从朗道二阶相变关系, 符合自旋向列相序参量的特征^[61]. 强度差异和峰宽差异的温度依赖关系完全一致, 这个自旋驱动的向列相理论图像完全吻合, 说明向列相很可能是由自旋相互作用来驱动^[62].

实验表明, 向列型自旋涨落的温度标度和面内电阻率出现差异的温度基本一致. 当进入到过掺杂区, 晶格结构相变不复存在, 面内电阻的各向异性消失, 电子向列相的涨落极弱, 自旋体系也就恢复到了

四重对称的激发态, 这说明自旋向列相和电子向列相具有相同的物理起源(图12)^[60-62]. 铁基超导体中电子向列相也属于非常规超导材料中的一种奇异电子态, 针对其本质的研究有助于我们进一步理解磁性和超导的本质^[23,58].

5 总结与展望

总的来说, BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系具有非常丰富的物性, 多种自由度之间互相耦合, 形成了复杂的相变和物理行为^[63,64]. 如自旋和晶格的耦合及其与超导的剧烈竞争导致量子临界点“被取消”, 电子体系与晶格体系的耦合使得电子向列相形成, 自旋与轨道的耦合使得低能磁激发出现空间各向异性, 自旋与电荷及轨道耦合使得向列型涨落同样体现在自旋激发态中, 巡游电子与局域磁矩之间的耦合使得自旋涨

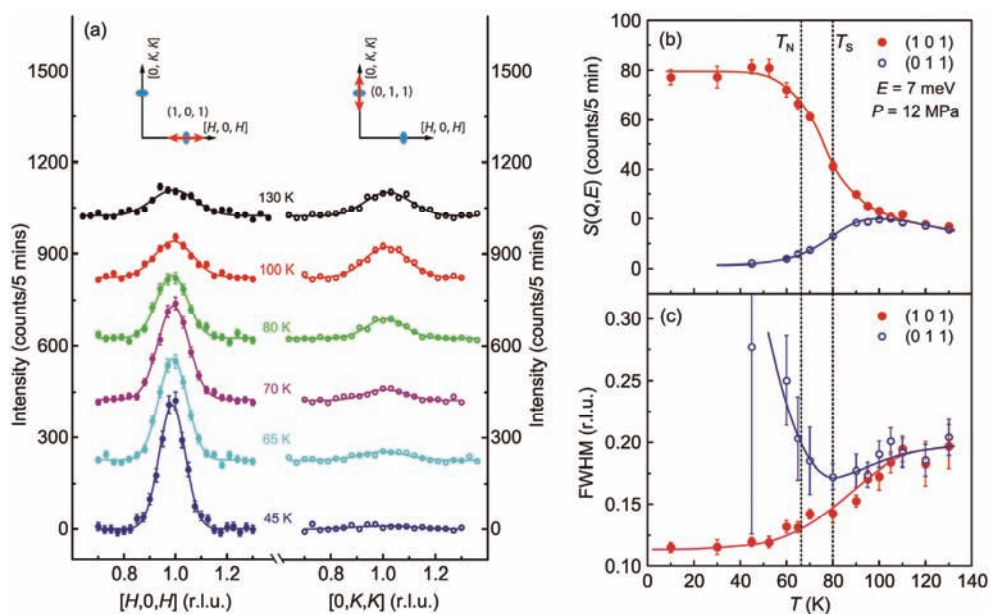


图 11 (网络版彩色)退孪晶的BaFe_{1.935}Ni_{0.065}As₂体系中自旋向列相. (a) 在 90°对称点 $Q_1=(1, 0, 1)$ 和 $Q_2=(0, 1, 1)$ 的 7 meV 低能磁激发; (b) 两个 Q 点磁激发的强度及宽度随温度的演变^[61]
Figure 11 (Color online) Spin nematicity in detwinning BaFe_{1.935}Ni_{0.065}As₂ compound. (a) 7 meV spin excitation at $Q_1=(1, 0, 1)$ and $Q_2=(0, 1, 1)$; (b) temperature dependence of the intensity and peak width of spin excitation at Q_1 and Q_2 ^[61]

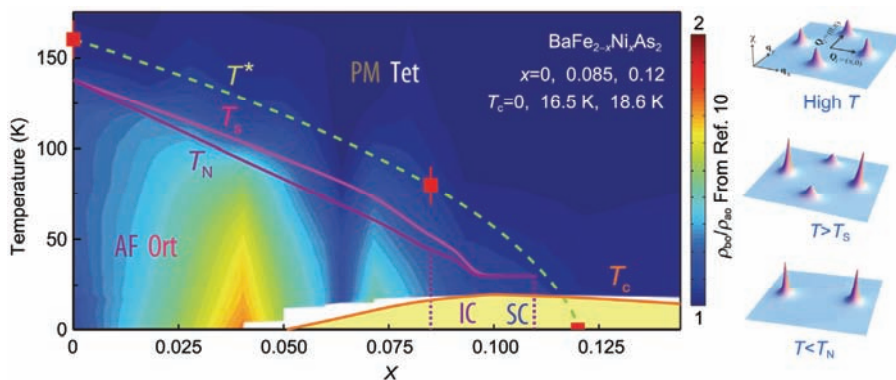


图 12 (网络版彩色)BaFe_{2-x}Ni_xAs₂体系的自旋向列相与面内电阻各向异性存在类似温度依赖关系
Figure 12 (Color online) Similar temperature behaviors between the spin nematicity and in-plane resistivity anisotropy of BaFe_{2-x}Ni_xAs₂ system

落谱存在系统演化行为等^[47]. 这些效应几乎都和自旋相互作用相关, 理解他们的物理本质, 是寻找铁基非常规超导电性机理的重要步骤.

在铁基超导体中, 向列序、磁性序和超导序的形成均离不开自旋相互作用^[23]. 随着温度的降低, 正由于自旋之间的强烈相互作用, 使得体系在高温就从动力学上体现二重对称特征, 同时形成轨道和电输运面内有序态, 进而与晶格耦合, 驱动晶格发生结构相变. 在面内二重对称的晶格基础上, 面间自旋发生关联, 共线型的反铁磁序进一步形成. 再进一步降

温, 并通过掺杂调节系统关联强度和费米面到合适范围, 就可以借助费米面嵌套关系而形成电子配对, 继而凝聚成超导序. 超导序的形成同时对静态反铁磁序造成了剧烈的竞争, 使得磁有序和结构相变在有限温度被截止. 然而动态的磁激发则对超导序有关键作用, 借助高能自旋涨落提供的较大能量尺度, 低能处的自旋共振效应使得费米面附近的超导电子可以通过交换反铁磁涨落而形成稳定的配对, 并最终发生相干凝聚实现高温超导电性^[7,47].

在接下来的研究中, 我们还需进一步研究体系

中电子向列相的微观机理, 理解结构相变和反铁磁相变的驱动力, 以及他们和超导电性之间的具体关系. 详细定量研究自旋激发在能量、掺杂、温度等参

量下的演化规律, 通过分析研究巡游电子磁性和局域磁矩的行为, 构建局域-巡游的唯象理论, 进而探究铁基超导电性的微观机制.

致谢 感谢中国科学院物理研究所龚冬良, 张汶良, 中山大学王猛, 北京师范大学鲁兴业, 美国莱斯大学张睿等同学在本文图片绘制上的帮助. 感谢相关论文的所有科研合作者.

参考文献

- 1 Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, et al. Iron-based layered superconductor $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ ($x=0.05\sim 0.12$) with $T_c=26$ K. *J Am Chem Soc*, 2008, 130: 3296–3297
- 2 Ren Z A, Lu W, Yang J, et al. Superconductivity at 55 K in iron-based F-doped layered quaternary compound $\text{SmO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$. *Chin Phys Lett*, 2008, 25: 2215–2216
- 3 Liu X, Zhao L, He S L, et al. Electronic structure and superconductivity of FeSe-related superconductors. *J Phys Condens Matter*, 2015, 27: 183201
- 4 Johnson P D, Xu G Y, Yin W G. *Iron-based Superconductivity*. German: Springer, 2015
- 5 Chen X H, Dai P C, Feng D L, et al. Iron-based high transition temperature superconductors. *Nat Sci Rev*, 2014, 1: 371–395
- 6 de la Cruz C, Huang Q, Lynn J W, et al. Magnetic order close to superconductivity in the iron-based layered $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ systems. *Nature*, 2008, 453: 899–902
- 7 Dai P C, Hu J P, Dagotto E. Magnetism and its microscopic origin in iron-based high temperature superconductors. *Nat Phys*, 2012, 8: 709–718
- 8 Rotter M, Tegel M, Johrendt D, et al. Superconductivity at 38 K in the iron arsenide $(\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x)\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Phys Rev Lett*, 2008, 101: 107006
- 9 Chen Y C, Lu X Y, Wang M, et al. Systematic growth of $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ large crystals. *Supercond Sci Technol*, 2011, 24: 065004
- 10 Li L J, Luo Y K, Wang Q B, et al. Superconductivity induced by Ni doping in BaFe_2As_2 single crystals. *New J Phys*, 2009, 11: 025008
- 11 Huang Q, Qiu Y, Bao W, 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: 257003
- 12 Zhang R, Gong D L, Lu X Y, et al. Doping evolution of antiferromagnetism and transport properties in the nonsuperconducting $\text{BaFe}_{2-2x}\text{Ni}_x\text{Cr}_x\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2015, 91: 094506
- 13 Chu J H, Analytis J G, Kucharczyk C, et al. Determination of the phase diagram of the electron-doped superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2009, 79: 014506
- 14 Lu X Y, Gretarsson H, Zhang R, et al. Avoided quantum criticality and magnetoelastic coupling in $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 257001
- 15 Luo H Q, Zhang R, Laver M, et al. Coexistence and competition of the short-range incommensurate antiferromagnetic order with the superconducting state of $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 247002
- 16 Lu X Y, Tam D W, Zhang C L, et al. Short-range cluster spin glass near optimal superconductivity in $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2014, 90: 024509
- 17 Fang C, Yao H, Tsai W F, et al. Theory of electron nematic order in LaFeAsO . *Phys Rev B*, 2008, 77: 224509
- 18 Haule K, Shim J H, Kotliar G. Correlated electronic structure of $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 226402
- 19 Yin Z P, Haule K, Kotliar G. Kinetic frustration and the nature of the magnetic and paramagnetic states in iron pnictides and iron chalcogenides. *Nat Mater*, 2011, 10: 932–935
- 20 Ding H, Richard P, Nakayama K, 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: 47001
- 21 Fawcett E. Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium. *Rev Mod Phys*, 1988, 60: 209–283
- 22 Hirschfeld P J, Korshunov M M, Mazin I I. Gap symmetry and structure of Fe-based superconductors. *Rep Prog Phys*, 2011, 74: 124508
- 23 Si Q, Yu R, Abrahams E. High-temperature superconductivity in iron pnictides and chalcogenides. *Nat Rev Mat*, 2016, 1: 16017
- 24 Yin Z P, Haule K, Kotliar G. Spin dynamics and orbital-antiphase pairing symmetry in iron-based superconductors. *Nat Phys*, 2014, 10: 845–850
- 25 Böni P, Sternlieb B J, Shirane G. Polarization dependence of the magnetic fluctuations in Cr below T_N . *Phys Rev B*, 1998, 57: 1057–1065
- 26 Pratt D K, Kim M G, Kreyssig A, et al. Incommensurate spin-density wave order in electron-doped BaFe_2As_2 superconductors. *Phys Rev*

- Lett, 2011, 106: 257001
- 27 Kim M G, Lamsal J, Heitmann T W, et al. Effects of transition metal substitutions on the incommensurability and spin fluctuations in BaFe_2As_2 by elastic and inelastic neutron scattering. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 167003
- 28 Böhmer A E, Hardy F, Wang L, et al. Superconductivity-induced reentrance of orthorhombic distortion in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Nat Commun*, 2015, 6: 7911
- 29 Avci S, Chmaissem O, Allred J M, et al. Magnetically driven suppression of nematic order in an iron-based superconductor. *Nat Commun*, 2014, 5: 3845
- 30 Wang C, Zhang R, Wang F, et al. Longitudinal spin excitations and magnetic anisotropy in antiferromagnetically ordered BaFe_2As_2 . *Phys Rev X*, 2013, 3: 041036
- 31 Liu C, Palczewski A D, Dhaka R S, et al. Importance of the Fermi-surface topology to the superconducting state of the electron-doped pnictide $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2011, 84: 020509
- 32 Luo H Q, Lu X Y, Zhang R, et al. Electron doping evolution of the magnetic excitations in $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2013, 88: 144516
- 33 Wang M, Zhang C L, Lu X Y, et al. Doping dependence of spin excitations and its correlations with high-temperature superconductivity in iron pnictides. *Nat Commun*, 2013, 4: 2874
- 34 Luo H Q, Yamani Z, Chen Y C, et al. Electron doping evolution of the anisotropic spin excitations in $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2012, 86: 024508
- 35 Rossat-Mignod J, Regnault L P, Vettier C, et al. Neutron scattering study of the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ system. *Physica C*, 1991, 185: 86–92
- 36 Christianson A D, Goremychkin E A, Osborn R, et al. Unconventional superconductivity in $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ from inelastic neutron scattering. *Nature*, 2008, 456: 930–932
- 37 Steffens P, Lee C H, Qureshi N, et al. Splitting of resonance excitations in nearly optimally doped $\text{Ba}(\text{Fe}_{0.94}\text{Co}_{0.06})_2\text{As}_2$: An inelastic neutron scattering study with polarization analysis. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 137001
- 38 Ma M W, Bourges P, Sidis Y, et al. Prominent role of spin-orbit coupling in FeSe. *Phys Rev X*, 2017, 7: 021025
- 39 Chi S X, Schneidewind A, Zhao J, et al. Inelastic neutron-scattering measurements of a three-dimensional spin resonance in the FeAs-based $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ superconductor. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 107006
- 40 Kim M G, Tucker G S, Pratt D K, et al. Magnonlike dispersion of spin resonance in Ni-doped BaFe_2As_2 . *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 177002
- 41 Inosov D S, Park J T, Bourges P, et al. Normal-state spin dynamics and temperature-dependent spin-resonance energy in optimally doped $\text{BaFe}_{1.85}\text{Co}_{0.15}\text{As}_2$. *Nat Phys*, 2010, 6: 178–181
- 42 Li S L, Lu X Y, Wang M, et al. Effect of the in-plane magnetic field on the neutron spin resonance in optimally doped $\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ and $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ superconductors. *Phys Rev B*, 2011, 84: 024518
- 43 Lipscombe O J, Harriger L W, Freeman P G, et al. Anisotropic neutron spin resonance in superconducting $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2010, 82: 064515
- 44 Liu M L, Lester C, Kulda J, et al. Polarized neutron scattering studies of magnetic excitations in electron-overdoped superconducting $\text{BaFe}_{1.85}\text{Ni}_{0.15}\text{As}_2$. *Phys Rev B*, 2012, 85: 214516
- 45 Luo H Q, Wang M, Zhang C L, et al. Spin excitation anisotropy as a probe of orbital ordering in the paramagnetic tetragonal phase of superconducting $\text{BaFe}_{1.904}\text{Ni}_{0.096}\text{As}_2$. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 107006
- 46 Eschrig M. The effect of collective spin-1 excitations on electronic spectra in high- T_c superconductors. *Adv Phys*, 2006, 55: 47–183
- 47 Dai P C. Antiferromagnetic order and spin dynamics in iron-based superconductors. *Rev Mod Phys*, 2015, 87: 855–896
- 48 Harriger L W, Luo H Q, Liu M S, et al. Nematic spin fluid in the tetragonal phase of BaFe_2As_2 . *Phys Rev B*, 2011, 84: 054544
- 49 Liu M S, Harriger L W, Luo H Q, et al. Nature of magnetic excitations in superconducting $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$. *Nat Phys*, 2012, 8: 376–381
- 50 Chu J H, Analytis J G, De Greve K, et al. In-plane resistivity anisotropy in an underdoped iron pnictide superconductor. *Science*, 2010, 329: 824–826
- 51 Fisher I R, Degiorgi L, Shen Z X. In-plane electronic anisotropy of underdoped “122” Fe-arsenide superconductors revealed by measurements of detwinned single crystals. *Rep Prog Phys*, 2011, 74: 124506
- 52 Böhmer A E, Burger P, Hardy F, et al. Nematic susceptibility of hole- and electron-doped BaFe_2As_2 iron-based superconductors from shear modulus measurements. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 047001
- 53 Kasahara S, Shi H J, Hashimoto K, et al. Electronic nematicity above the structural and superconducting transition in $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$. *Nature*, 2012, 486: 382–385
- 54 Nakajima M, Liang T, Ishida S, et al. Unprecedented anisotropic metallic state in BaFe_2As_2 revealed by optical spectroscopy. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2011, 108: 12238–12242
- 55 Allan M P, Chuang T M, Masee F, et al. Anisotropic impurity states, quasiparticle scattering and nematic transport in underdoped $\text{Ca}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$. *Nat Phys*, 2013, 9: 220–224

- 56 Kivelson S A, Fradkin E, Emery V J. Electronic liquid-crystal phases of a doped Mott insulator. *Nature*, 1998, 393: 550–553
- 57 Yi M, Lu D, Chu J H, et al. Symmetry-breaking orbital anisotropy observed for detwinned $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ above the spin density wave transition. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2011, 108: 6878–6883
- 58 Fernandes R M, Chubukov A V, Schmalian J. What drives nematic order in iron-based superconductors? *Nat Phys*, 2014, 10: 97–104
- 59 Yi M, Zhang Y, Shen Z X, Lu D H. Ole of the orbital degree of freedom in iron-based superconductors. arXiv: 1703.08622
- 60 Lu X Y, Park J T, Zhang R, et al. Nematic spin correlations in the tetragonal state of uniaxial strained $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. *Science*, 2014, 345: 657–660
- 61 Zhang W L, Park J T, Lu X Y, et al. Effect of nematic order on the low-energy spin fluctuations in detwinned $\text{BaFe}_{1.935}\text{Ni}_{0.065}\text{As}_2$. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 227003
- 62 Fernandes R M, Schmalian J. Manifestations of nematic degrees of freedom in the magnetic, elastic, and superconducting properties of the iron pnictides. *Supercond Sci Technol*, 2012, 25: 084005
- 63 Inosov D S. Spin fluctuations in iron pnictides and chalcogenides: From antiferromagnetism to superconductivity. *C R Phys*, 2016, 17: 60–89
- 64 Surmach M A, Portnichenko P Y, Park J T, et al. Impurity effects on spin dynamics in magnetic and superconducting iron pnictides and chalcogenides. *Phys Status Solidi B*, 2017, 254: 1600162

Summary for “铁基超导体 $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ 中磁性相互作用的中子散射”

Neutron scattering studies on the magnetic interaction in iron-based superconductor $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$

LUO HuiQian

Beijing National Laboratory of Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China
E-mail: hqluo@iphy.ac.cn

Iron-based superconductivity emerges from the suppression of the long-ranged antiferromagnetic order in the parent compounds. To solve the microscopic mechanism of the superconductivity, the key issue is fully understanding about the evolution of magnetic interaction and its relationship between superconductivity. Here, we take the electron-doped iron-based superconductor $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ as atypical example, and summary the neutron scattering results on the electronic phase diagram, magnetic ordered state, low-energy spin excitations and high-energy spin fluctuations, particularly for their systematic evolution versus electron dopings and the recent progress on the spin nematicity.

Firstly, we will introduce about the crystal structure and magnetic structure, detailed procedure of the single crystal growth is also presented. By focusing on the structural transition temperature (T_s) and magnetic transition temperature (T_N) near the optimal doping level, we have found both T_s and T_N vanish above the superconducting transition temperature (T_c) as a first order manner, due to the lattice distortion and magnetically ordered moment decrease beyond the lower limit of the instrument resolution, giving an avoid quantum critical point at the optimal doping. In addition, the magnetic order becomes incommensurate and short-ranged magnetic cluster and competes with superconducting order, suggesting strong interplay between magnetism and superconductivity.

Secondly, we will discuss about the itinerant magnetism and spin resonance mode at low energy for spin dynamics. The spin resonance mode in iron pnictides is explained as the collective quasiparticle excitations from the Fermi surface nesting between the hole pocket at the Γ point and electron pocket at the M point. This requires itinerant magnetism from the electrons near Fermi surfaces, which is further confirmed by neutron scattering by discovering the longitudinal mode and line shape change of low-energy spin excitations upon doping.

Thirdly, we will present the doping evolution of spin fluctuations throughout the whole phase diagram. Although the spin waves in the parent compound can be described by an effective Heisenberg mode with anisotropic exchange coupling in FeAs plane, the damping features and unexpected low total fluctuation moments reveal both local moments and itinerant electrons contribute to the magnetism. Upon Ni doping, the high energy spin fluctuations is very robust, but the low energy spin excitations are suppressed quickly to zero when cross the boundary of the overdoped superconducting regime. The analysis on the change of the magnetic coupling energy associated with the superconducting transition gives evidence that the magnetic fluctuations are strong enough to drive the condensation of the Cooper pairs.

Fourthly, we will further introduce the recent progress on the spin anisotropy by polarized neutron scattering experiments, and spin nematicity measured on detwinned samples. Anisotropic spin excitations at low energy are discovered by polarized neutron scattering, which is caused by the in-plane orbital ordering and persists away up to the tetragonal paramagnetic state. Further experiments on the detwinned sample under uniaxial pressure give direct evidence of the spin nematicity shown as breaking C_4 rotation symmetry spin excitations in the tetragonal phase, similar to the anisotropic resistivity and electronic nematic phase discovered in other probes. Such novel electron state in these materials suggests the iron pnictides are unconventional.

Finally, we summarize the results about the magnetic phase transition and spin dynamics and discuss its physical origin. Then a possible picture about the spin driven unconventional superconductivity in these materials is proposed. Further perspectives on the research of magnetism in iron-based superconductivity are also given.

iron-based superconductors, neutron scattering, magnetic order, magnetic excitations, spin fluctuations

doi: 10.1360/N972017-00811