

ЭЛЕКТРОННЫЕ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

PACSnumbers: 71.45.Gm, 74.20.Mn, 74.25.Jb, 74.25.Kc, 74.70.Xa, 74.72.-h, 85.25.Am

Складові квазічастинкової ренормалізації надпровідників на основі заліза

К. О. Кухельний, О. А. Кордюк^{*,**}

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 60,
01033 Київ, Україна*

**Київський академічний університет НАН та МОН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

***Інститут металлофизики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

Характерною загальною особливістю електронної структури надпровідників на основі заліза є сильна ренормалізація квазічастинкового спектру, що пов'язана з сильною міжелектронною взаємодією, складові якої залишаються дискусійними. Нами проведено детальну порівняльну аналізу фотоемісійних спектрів надпровідників на основі заліза (FeSe і ВКФА) та надпровідних купратів (Bi-2201). Виділено константи високо- та низькоенергетичної складових власної енергії, що визначають ренормалізацію у купратах і надпровідниках на основі заліза, та доведено істотну роль електрон-фононної взаємодії в останніх.

Ключові слова: електронна спектроскопія з кутовою роздільною здатністю

Corresponding author: Kyrylo Oleksandrovyeh Kukhelny
E-mail: mrkiril@ukr.net

*Taras Shevchenko National University of Kyiv,
60 Volodymyrska Str., UA-01033 Kyiv, Ukraine*

**Kyiv Academic University, N.A.S. and M.E.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

***G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: K. O. Kukhelny and O. A. Kordyuk, Components of a Quasi-Particle Renormalization of the Iron-Based Superconductors, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 12: 1559–1571 (2018) (in Ukrainian), DOI: 10.15407/mfint.40.12.1559.

ттю, електронна структура, надпровідники на основі заліза, FeSe, BKFA, Bi-2201.

A characteristic general feature of electronic structure of the iron-based superconductors is the strong renormalization of a quasi-particle spectrum, which is associated with strong electron–electron interaction, the components of which remain controversial. We are performed a detailed comparative analysis of the photoemission spectra of iron-based superconductors (FeSe and BKFA) and superconducting cuprates (Bi-2201). The constants of the high-energy and low-energy parts of the self-energy, which determine the renormalization in cuprates and iron-based superconductors, are separated, and the essential role of the electron–phonon interaction in the latter ones is proved.

Key words: electronic structure, angle resolved photoemission spectroscopy (ARPES), iron-based superconductors, FeSe, BKFA, Bi-2201.

Характерной общей особенностью электронной структуры сверхпроводников на основе железа является сильная ренормализация спектра квазичастиц, связанная с сильным взаимодействием между электронами, составляющие которого остаются дискуссионными. Нами проведён детальный сравнительный анализ фотоэмиссионных спектров сверхпроводников на основе железа (FeSe и BKFA) и сверхпроводящих купратов (Bi-2201). Выделены константы высоко- и низкоэнергетической составляющих собственной энергии, определяющие ренормализацию в купратах и сверхпроводниках на основе железа, и доказана существенная роль электрон-фононного взаимодействия в последних.

Ключевые слова: электронная структура, электронная спектроскопия с угловым разрешением, сверхпроводники на основе железа, FeSe, BKFA, Bi-2201.

(Отримано 4 квітня 2018 р.)

1. ВСТУП

Відкриття нового класу надпровідників на основі заліза [1] викликало величезний інтерес усієї наукової спільноти, а численні дослідження цих сполук швидко сформували один із найпріоритетніших світових напрямів у фізиці твердого тіла [2]. Це можна пояснити тим, що відкриття нових високотемпературних надпровідників зруйнувало «монополію» купратів і дало реальні надії як на подальший прогрес у синтезі перспективних матеріалів із покращеними надпровідними властивостями, так і щодо можливості більш глибокого розуміння механізмів високотемпературної надпровідності [3].

Незважаючи на різноманіття сполук високотемпературних надпровідників на основі заліза, магнітне впорядкування, провідність

та надпровідність відбуваються у залізо-пніктидному чи залізо-халькогенідному (залізо-селенідному) шарі, тому й електронна структура біля рівня Фермі є спільною для всіх представників цього класу. Існує п'ять зон провідності (на відміну від однієї у купратів), сформованих d -орбіталями Fe, і ці зони формують здебільшого п'ять поверхонь Фермі. Однак ці поверхні, і навіть їх топологія, можуть швидко змінюватися під дією таких факторів, як тиск чи зарядове допування, що й приводить до складних фазових діаграм. Загалом таку електронну структуру можна добре описати зонними розрахунками (у термінах кількості та симетрії зон), але порівняно з розрахунками реальна електронна структура є помітно ренормованою (у три і більше разів) [2]. Ця ренормалізація, очевидно, пов'язана з сильною міжелектронною взаємодією, однак складові цієї взаємодії залишаються дискусійними [2]. У цій роботі проведено детальний порівняльний аналіз фотоемісійних спектрів «залізних» надпровідників (FeSe та BKFA) та надпровідних купратів (Bi-2201). Виділено константи високо- та низькоенергетичної складової власної енергії для зразків, що визначають ренормалізацію у купратах та надпровідниках на основі заліза, а також доведено суттєву роль електрон-фононної взаємодії в останніх.

2. ПРОЦЕДУРИ АНАЛІЗУ ARPES-СПЕКТРІВ

Фотоемісійна спектроскопія з кутовим розділенням (ARPES) є прямим методом визначення електронної структури кристалів [4, 5]. Одержаний з експерименту ARPES-спектр є по суті промодельованою матричними елементами одночастинковою спектральною функцією, яка є уявною частиною функції Гріна одноелектронних збуджень:

$$A(k, \omega) = \text{Im}(G(k, \omega))/\pi,$$

де $G(k, \omega)$ — функція Гріна.

У відсутності взаємодій між електронами одночастинкові стани «добре визначені»

$$G_0 = \frac{1}{\omega - \varepsilon - i0}, \quad A(k, \omega) = \delta[\omega - \varepsilon(k)],$$

де $\varepsilon(k)$ — це закон дисперсії «голих» електронів, тобто таких, що не взаємодіють. З урахуванням взаємодії у нормальному стані (без щільності) функція Гріна також має простий вигляд:

$$G_0 = \frac{1}{\omega - \varepsilon - i0}, \quad G_0 = \frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma},$$

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Sigma''(\omega)}{[\omega - \varepsilon(k) - \Sigma'(\omega)]^2 + \Sigma''(\omega)^2},$$

де $\Sigma = \Sigma' + i\Sigma''$ — квазічастинкова власна енергія, в якій відображені всі взаємодії електронів у кристалі.

Отже, з ARPES-спектру можна отримати не тільки структуру одноелектронних зон, але і структуру основних взаємодій в електронній системі. Фактично Σ' є перенормуванням самої зони, а Σ'' — її уширенням. Фізичний сенс уявної частини власної енергії — квазічастинкове згасання, яке є обернено пропорційним часу життя квазічастинкового збудження. Саме ця величина містить всю інформацію про взаємодію квазічастинок з іншими електронами чи збудженнями, наприклад, з фононами та/або спіновими флуктуаціями [6].

Вважається, що основний внесок в згасання дають розсіяння на домішках, електрон-фононна та електрон-електронна взаємодії. Окрім прямої кулонівської взаємодії, існує ймовірність того, що електрон-електронне розсіяння домінує у зв'язку розсіянням електронних збуджень спіновими флуктуаціями, які, як правило, по-

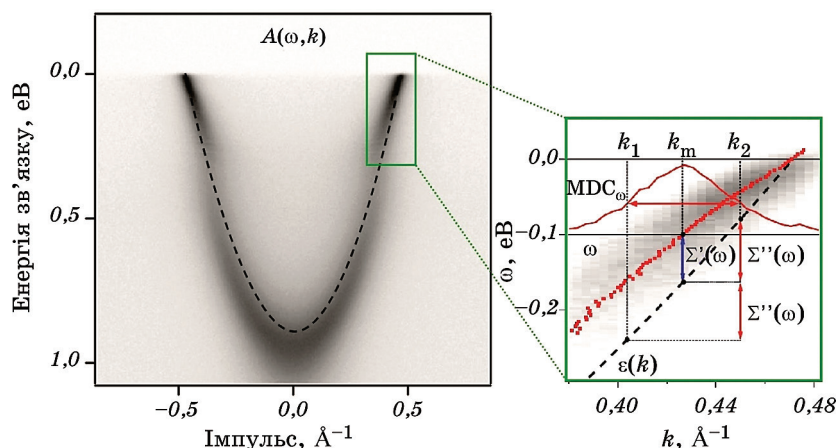


Рис. 1. ARPES-спектр — зображення з двовимірного детектора фотоелектронного аналізатора, що являє собою, по суті, одноелектронну спектральну функцію $A(\omega, k)$ (а). Зв'язок експериментального розподілу електронів з «голою» дисперсією невзаємодіючих електронів $\varepsilon(k)$ і власною енергією квазічастинок (одноелектронних збуджень) (б).

Fig. 1. ARPES spectrum is an image of a two-dimensional detector of a photo-electronic analyser, which is essentially a one-electron spectral function $A(\omega, k)$ (a). The connection of the experimental distribution of electrons with the 'bare' dispersion of non-interacting electrons $\varepsilon(k)$ and the intrinsic energy of quasiparticles (one-electron excitations) (b).

винні бути суттєвими у всіх надпровідниках на основі заліза.

На рисунку 1 показано типовий ARPES-спектр з нодального напрямку надпровідних купратів, а саме BSCO. Видно, що дійсна та уявна частини власної енергії на певній частоті пов'язані з параметрами (півшириною на піввисоті — HWHM) кривої розподілу по імпульсу (momentum distribution curve, MDC [7]) через одноелектронну («голу») дисперсію. Отже, для того щоб визначити $\Sigma'(\omega)$ і $\Sigma''(\omega)$ незалежно з MDC аналізу, потрібно знати $\varepsilon(k)$. Оскільки $\Sigma(\omega)$ є аналітичною функцією, то всі три функції $\Sigma'(\omega)$, $\Sigma''(\omega)$ і $\varepsilon(k)$ можуть бути визначені з експерименту. Алгоритм полягає у підборі параметрів $\varepsilon(k)$, за яких функції $\Sigma'(\omega)$ і $\Sigma''(\omega)$ виражаються одна через одну за допомогою перетворень Крамерса–Кроніга [6]. Однак у нашому випадку «голу» дисперсію було взято з розрахунків зонної структури для BKFA [2], FeSe [8], Bi-2201 [9].

3. РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТУ

На рисунку 2 показано спектри Bi-2201, BKFA та FeSe, виміряні в центрі зони Бріллюена.

MDC аналіз полягає у розділенні ARPES-спектру на криві $A(k)$ при різних енергіях та фітуванні кожної двопікової кривої функцією

$$\text{MDCfit}(k) = Ak^2 + B + \frac{C}{(k - k_{m1})^2 + W_1^2} + \frac{F}{(k - k_{m2})^2 + W_2^2}.$$

Потім з відповідних коефіцієнтів отримують положення максимуму та напівширину на половині висоти, звідки виводять дійсну та уявну частини власної енергії. Нас цікавлять коефіцієнти W_1 та W_2 ,

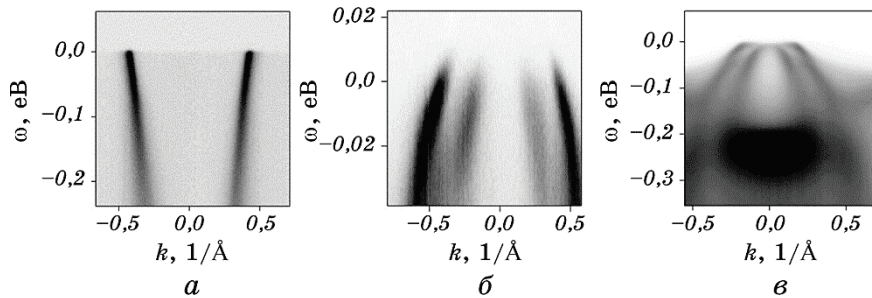


Рис. 2. ARPES-спектри для Bi-2201 (а), BKFA (б), FeSe (в), виміряні в центрі зони Бріллюена у надпровідному стані.

Fig. 2. ARPES spectra for Bi-2201 (a), BKFA (b), FeSe (c), measured in the centre of the Brillouin zone in the superconducting state.

які є значенням половини ширини на половині амплітуди (HWHM — Half-width at half-maximum). Тут k_{m1} та k_{m2} — положеннями максимумів відповідних Лоренціан. Далі буде показано, що використання Лоренціани як фіт-функції у цьому випадку дає можливість отримати співпадіння з експериментальними даними, що проілюстровано на рис. 3. Після фітування MDC були побудовані графіки HWHM та дисперсії зон (рис. 4 і 5).

Для отримання Σ' та Σ'' скористаємось формулами [5, 6]

$$|\Sigma''| = \varepsilon(k_m) - \varepsilon(k_1) = \varepsilon(k_2) - \varepsilon(k_m) = [\varepsilon(k_M) - \varepsilon(k_1)] / 2 = -v_f W,$$

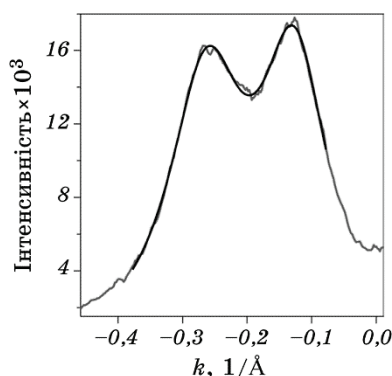


Рис. 3. Результат фітування MDC для FeSe (для $\omega = -44$ eV) двома Лоренціанами.

Fig. 3. The result of fitting of MDC for FeSe (for $\omega = -44$ eV) by two Lorentzians.

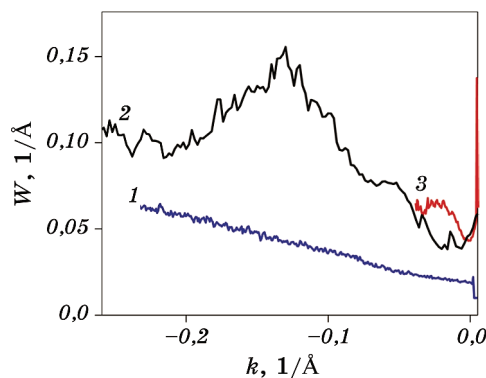


Рис. 4. Значення HWHM для Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

Fig. 4. The values of HWHM for Bi-2201 (1), FeSe (2), and BKFA (3).

$$\Sigma' = \omega - \varepsilon(k_m),$$

де W — це НВНМ.

Результуюча дисперсія складається з дисперсії електронів без взаємодії та перенормовуючих її високо- та низькоенергетичних складових власної енергії:

$$\Sigma = \varepsilon(k) + \Sigma_h + \Sigma_l.$$

Для подальших розрахунків ми визначали «голу» Фермі-швидкість v_F , Фермі-швидкість ренормовану електрон-електронною взаємодією v_{R1} та ренормовану сумою електрон-електронної та елек-

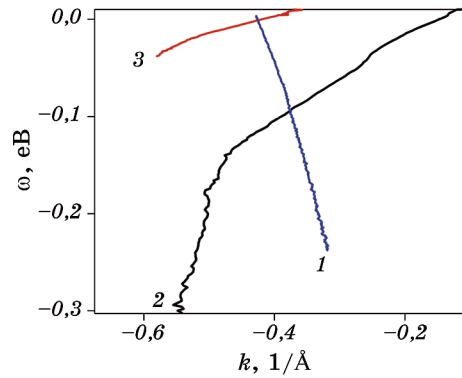


Рис. 5. Дисперсії для Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

Fig. 5. Dispersions for Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

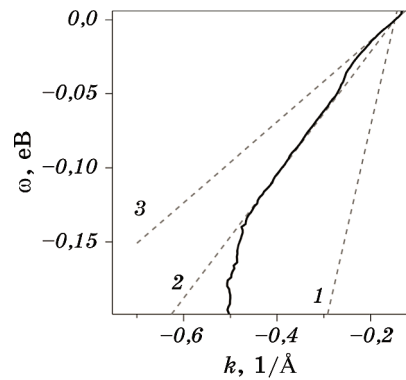


Рис. 6. Дисперсія для FeSe та відповідні їй Фермі-швидкості v_F (1), v_{R1} (2), v_{R2} (3).

Fig. 6. Dispersion for FeSe and corresponding Fermi velocity v_F (1), v_{R1} (2), v_{R2} (3).

трон-фононної взаємодій ν_{R2} . Якщо ν_F було оцінено з теоретичних розрахунків LDA (Local Density Approximation) для кожного зразка, то для оцінки ν_{R1} та ν_{R2} і відповідних коефіцієнтів ренормалізації ми фітували лінійною залежністю високо- та низькоенергетичні ділянки дисперсії, що і проілюстровано на рис. 6–8.

Відомо, що в купратах електрон-фононна взаємодія є незначною, а обидві складові власної енергії визначаються електрон-електронною взаємодією, високоенергетична — кулонівською взаємодією, а низькоенергетична — електронами зі спіновими флук-

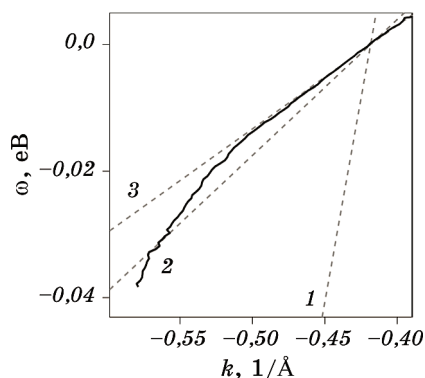


Рис. 7. Дисперсія для ВКФА та відповідні їй Фермі-швидкості ν_F (1), ν_{R1} (2), ν_{R2} (3).

Fig. 7. Dispersion for BKFA and corresponding Fermi velocity ν_F (1), ν_{R1} (2), ν_{R2} (3).

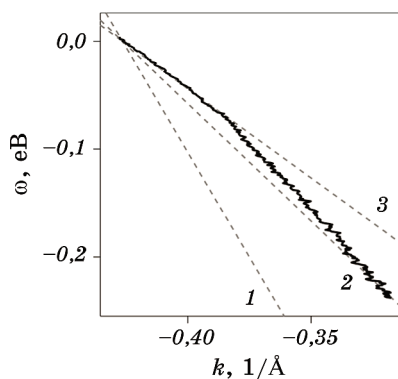


Рис. 8. Дисперсія для Bi-2201 та відповідні їй Фермі-швидкості ν_F (1), ν_{R1} (2), ν_{R2} (3).

Fig. 8. Dispersion for Bi-2201 and corresponding Fermi velocity ν_F (1), ν_{R1} (2), ν_{R2} (3).

ТАБЛИЦЯ 1. Значення голої Фермі-швидкості та ренормованих v_{R1} та v_{R2} .**TABLE 1.** Values of naked Fermi-speed and renormalized v_{R1} and v_{R2} .

Зразок Фермі-швидкості	FeSe	BKFA(Ba-122)	BSCO(Bi-2201)
v_F , eВÅ	1,381	1,288	4,431
v_{R1} , eВÅ	0,416	0,215	2,181
v_{R2} , eВÅ	0,273	0,173	1,658

ТАБЛИЦЯ 2. Значення констант високо- та низькоенергетичних складових власної енергії.**TABLE 2.** Values of constants of high and low energy components of self-energy.

Зразок Константи	FeSe	BKFA(Ba-122)	BSCO(Bi-2201)
λ_h	2,317	4,990	1,032
λ_l	1,733	1,238	0,639

туаціями, що також є електронним збудженням [10].

Результати вимірів Фермі-швидкостей наведено в табл. 1.

Відомо, що в купратах електрон-фононна взаємодія є незначною, а обидві складові власної енергії визначаються електрон-електронною взаємодією, високоенергетична — кулонівською взаємодією, а низькоенергетична — електронами зі спіновими флуктуаціями, що також є електронним збудженням [10]. На противагу купратам, в «залізних» надпровідниках спінові флуктуації є незначними, тож низькоенергетичну компоненту тут визначає фононний вклад, а високоенергетичну — електрон-електронна взаємодія [11].

Високо- та низькоенергетичні складові електрон-електронної та електрон-фононної взаємодії можна визначити так:

$$\frac{v_{R1}}{v_F} = \frac{1}{1 + \lambda_h} \Rightarrow \lambda_h = \frac{v_F}{v_{R1}} - 1, \quad \lambda_l = \frac{v_F}{v_{R2}} - \frac{v_F}{v_{R1}}.$$

Обраховані константи високо- та низькоенергетичної складової власної енергії наведено в табл. 2.

4. ПОРІВНЯННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ВИСНОВКИ

Як вже було раніше показано, Σ' та Σ'' залежать від швидкості Фермі. Отже, для кожної з отриманих швидкостей Фермі ми можемо

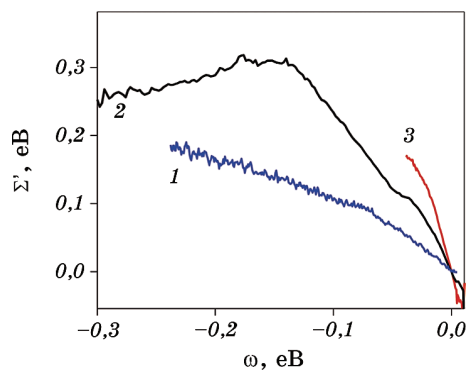


Рис. 9. Дійсна частина власної енергії Σ' з урахуванням всіх компонент (високо- та низькоенергетичної) Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

Fig. 9. Real part of self-energy Σ' taking into account all components (high and low energy) for Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

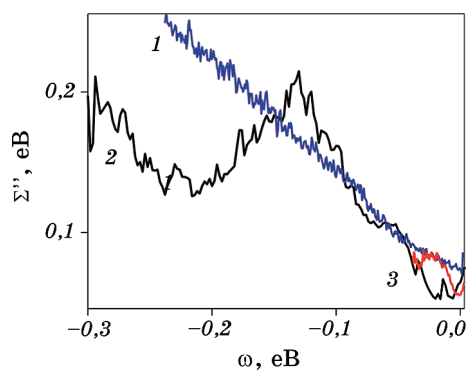


Рис. 10. Уявна частина власної енергії Σ' з урахуванням всіх компонент (високо- та низькоенергетичної) Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

Fig. 10. Imaginary part of self-energy Σ' taking into account all components (high and low energy) for Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

побудувати відповідні залежності, що будуть враховувати відповідні компоненти. На рисунках 9 і 10 побудовано дійсну та уявну частини власної енергії з урахуванням високо- та низькоенергетичних компонентів.

З графіків видно, що ренормалізація у BKFA більша, ніж у FeSe, хоча треба враховувати, що у BKFA спостерігається зона d_{xy} на рівні Фермі, а у FeSe зона, яка походить з орбіталей d_{xz}/d_{yz} . Цікаво, що ренормалізація тут вища, ніж у купратах.

На рисунку 11 для порівняння зображено лінійні внески електрон-електронної взаємодії до дійсної частини власної енергії, отри-

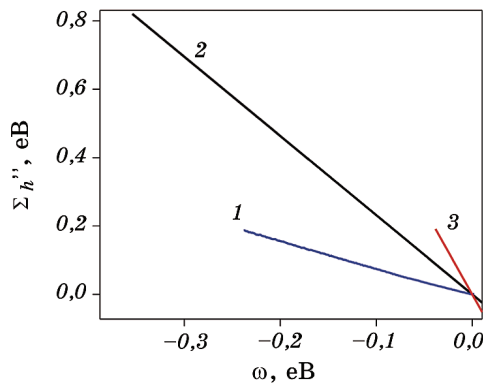


Рис. 11. Дійсна частина високоенергетичної компоненти власної енергії Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

Fig. 11. Real part of the high-energy components of self-energy for Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

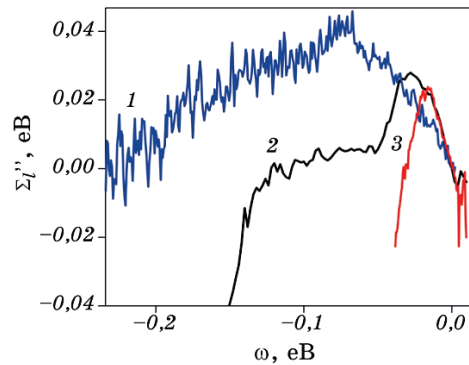


Рис. 12. Дійсна частина низькоенергетичної компоненти власної енергії Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

Fig. 12. Real part of the low-energy components of self-energy for Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

мані як різниця $v_F k - v_{R2} k$ (рис. 6–8), що визначають Σ_h . На рисунку 12 зображено низькоенергетичну частину власної енергії, Σ_l , що визначалась як $\Sigma_l = \Sigma' - \Sigma_h$. Порівняння рисунків 11 і 12 показує, що основний внесок в ренормалізацію спричинений високоенергетичною складовою власної енергії.

Зображені на рис. 13, піки на кривих 2 та 3 поблизу значень енергії $-0,04$ та $-0,02$ еВ, що відповідають FeSe та BKFA, спричинені фононним внеском, що не суперечить теорії (оскільки спектр фононів закінчується на 90 меВ), а ці піки на цих самих енергіях можна

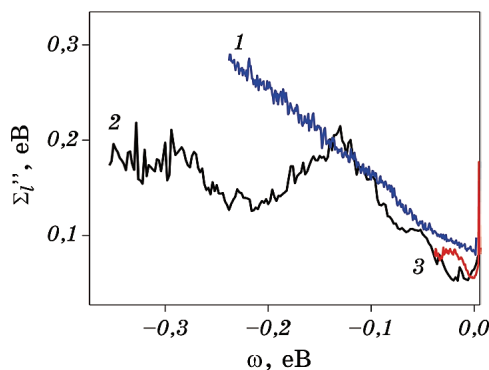


Рис. 13. Уявна частина низькоенергетичної компоненти власної енергії Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

Fig. 13. Imaginary part of the low-energy components of self-energy for Bi-2201 (1), FeSe (2), BKFA (3).

ТАБЛИЦЯ 3. Значення $\Sigma''(0)$ завдяки розсіянню на дефектах.

TABLE 3. Values of $\Sigma''(0)$ due to scattering on defects.

Зразок	FeSe	BKFA(Ba-122)	BSCO(Bi-2201)
Вклад розсіяння			
$\Sigma''(0)$, eV	$56 \cdot 10^{-3}$	$54 \cdot 10^{-3}$	$80 \cdot 10^{-3}$

спостерігати на рис. 12 для відповідних кривих. Щодо купратів, то пік на енергії $-0,8$ eV (крива 1, рис. 13) спричинений спіновими флуктуаціями (електронним збудженням).

Розсіяння на дефектах задає константу зміщення $\Sigma''(0)$, розраховані значення якої наведено в табл. 3.

5. ВИСНОВКИ

Загальна ренормалізація у «залізних» надпровідниках вища для d_{xy} орбіталі, що відповідає сучасному розумінню цього питання. Причому, ренормалізація у «залізних» надпровідниках значно вища, ніж у купратах, що також узгоджується з результатами деяких авторів, але не є загальноприйнятою думкою, оскільки купрати вважаються сильнокорельованим моттівським ізолятором, а «залізні» надпровідники — ні. Відповідно, це говорить про те, що «залізні» надпровідники більш корельовані, ніж купрати.

Показано, що в «залізних» надпровідниках та купратах розсіяння на дефектах має приблизно однаковий рівень, що важливо для

оцінки частки міжзонних переходів у процесах розсіяння.

Виділено константи високо- та низькоенергетичної складової власної енергії, що визначають ренормалізацію у купратах та надпровідниках на основі заліза, та доведено істотну роль електрон-фононної взаємодії в останніх.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, Iss. 11: 3296 (2008).
2. A. A. Kordyuk, *Low Temp. Phys.*, **38**, Iss. 9: 888 (2012).
3. O. A. Kordyuk, *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.*, No. 9: 46 (2012).
4. A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.*, **75**, Iss. 2: 473 (2003).
5. A. A. Kordyuk, *Low Temp. Phys.*, **40**, Iss. 4: 286 (2014).
6. A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, A. Koitzsch, J. Fink, M. Knupfer, and H. Berger, *Phys. Rev. B*, **71**, Iss. 21: 214513-1 (2005).
7. T. Valla, A. V. Fedorov, P. D. Johnson, B. O. Wells, S. L. Hulbert, Q. Li, G. D. Gu, and N. Koshizuka, *Science*, **285**, Iss. 5436: 2110 (1999).
8. A. Subedi, L. Zhang, D. J. Singh, and M. H. Du, *Phys. Rev. B*, **78**, Iss. 13: 134514-1 (2008).
9. H. Lin, S. Sahrakorpi, R. S. Markiewicz, and A. Bansil, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, Iss. 9: 097001-1 (2006).
10. A. A. Kordyuk, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, D. S. Inosov, T. K. Kim, B. Büchner, and S. V. Borisenko, *Eur. Phys. J. Special Topics*, **188**: 153 (2010).
11. A. A. Kordyuk, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, T. K. Kim, I. V. Morozov, M. L. Kulis, R. Follath, G. Behr, B. Buechner, and S. V. Borisenko, *Phys. Rev. B*, **83**, Iss. 13: 134513-1 (2011).