



国家出版基金项目  
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

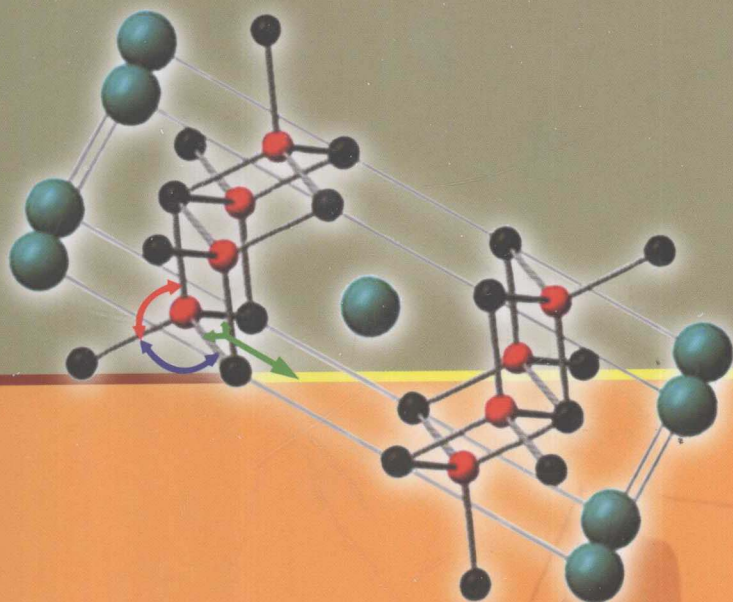


SSTPH

科学 专著：前沿研究

# 铁基超导体 物性基础研究

赵忠贤 于 涪 主编



上海科学技术出版社

# 铁基超导体 物性基础研究

赵忠贤 于 录 主编

上海科学技术出版社

---

图书在版编目(CIP)数据

铁基超导体物性基础研究/赵忠贤,于涿主编. —  
上海:上海科学技术出版社,2013.11  
(科学专著.前沿研究)  
ISBN 978-7-5478-1630-1

I. ①铁… II. ①赵… ②于… III. ①高温超导性—  
研究 IV. ①0511

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 013556 号

---

本书出版受“上海科技专著出版奖金”资助

责任编辑 刘小莉 段 韬  
装帧设计 戚永昌



---

上海世纪出版股份有限公司 出版、发行  
上海科学技术出版社  
(上海钦州南路71号 邮政编码200235)

新华书店上海发行所经销

上海中华商务联合印刷有限公司印刷

开本 787×1092 1/16 印张 20 插页 4

字数 390 千字

2013年11月第1版 2013年11月第1次印刷

ISBN 978-7-5478-1630-1/O·17

定价: 78.00 元

---

本书如有缺页、错装或损坏等严重质量问题,  
请向工厂联系调换

## 内 容 提 要

铁基超导体是继 1986 年铜氧化物高温超导体发现以来,超导研究领域最重要的发现,有关高温超导体物性的基础研究是当今凝聚态物理学中最具挑战性的课题之一。

本书各章节作者均为从事铁基超导体材料与物性前沿研究的专家,他们结合自己的所长和研究成果,分别总结铁基超导体不同方面的物理基础和研究进展。内容包括铁基超导体材料与结构、电子态计算、电子结构探测、电荷动力学响应、磁性与自旋动力学研究、电子输运性质和热力学性质研究,以及相关的理论研究等。

## 各章撰稿人名单

### ■ 第 1 章

向涛,中国科学院物理研究所研究员。

E-mail: txiang@aphy. iphy. ac. cn

卢仲毅,中国人民大学物理系教授。

E-mail: zlu@ruc. edu. cn

### ■ 第 2 章

陈仙辉,中国科学技术大学物理系教授。

E-mail: chenxh@ustc. edu. cn

### ■ 第 3 章

卢仲毅,向涛

### ■ 第 4 章

钱天,中国科学院物理研究所副研究员。

E-mail: tqian@aphy. iphy. ac. cn

Pierre Richard,中国科学院物理研究所研究员。

E-mail: P. richard@aphy. iphy. ac. cn

丁洪,中国科学院物理研究所研究员。

E-mail: dingh@aphy. iphy. ac. cn

### ■ 第 5 章

王楠林,中国科学院物理研究所研究员。

E-mail: nlwang@aphy. iphy. ac. cn

■ 第 6 章

鲍威,中国人民大学物理系教授。

E-mail: wbao@ruc.edu.cn

■ 第 7 章

郑国庆,中国科学院物理研究所研究员,日本冈山大学物理系教授。

E-mail: zheng@psun.phys.okayama-u.ac.jp

■ 第 8 章

闻海虎,中国科学院物理研究所研究员。

E-mail: hhwen@aphy.iphy.ac.cn

■ 第 9 章

王亚愚,清华大学物理系教授。

E-mail: yayuwang@tsinghua.edu.cn

■ 第 10 章

胡江平,中国科学院物理研究所研究员,美国普渡大学物理系副教授。

E-mail: hu4@physics.purdue.edu

## 《科学专著》系列丛书序

进入 21 世纪以来,中国的科学技术发展进入到一个重要的跃升期。我们科学技术自主创新的源头,正是来自科学向未知领域推进的新发现,来自科学前沿探索的新成果。学术著作是研究成果的总结,它的价值也在于其原创性。

著书立说,乃是科学研究工作不可缺少的一个组成部分。著书立说,既是丰富人类知识宝库的需要,也是探索未知领域、开拓人类知识新疆界的需要。特别是在科学各门类的那些基本问题上,一部优秀的学术专著常常成为本学科或相关学科取得突破性进展的基石。

一个国家,一个地区,学术著作出版的水平是这个国家、这个地区科学研究水平的重要标志。科学研究具有系统性和长远性,继承性和连续性等特点,科学发现的取得需要好奇心和想象力,也需要有长期的、系统的研究成果的积累。因此,学术著作的出版也需要有长远的安排和持续的积累,来不得半点的虚浮,更不能急功近利。

学术著作的出版,既是为了总结、积累,更是为了交流、传播。交流传播了,总结积累的效果和作用才能发挥出来。为了在中国传播科学而于 1915 年创办的《科学》杂志,在其自身发展的历程中,一直也在尽力促进中国学者的学术著作的出版。

几十年来,《科学》的编者和出版者,在不同的时期先后推出过好几套中国学者的科学专著。在 20 世纪三四十年代,出版有《科学丛书》;自 20 世纪 90 年代以来,又陆续推出《科学专著丛书》、《科学前沿丛书》、《科学前沿进展》等,形成了一个以刊物名字样科学为标识的学术专著系列。自 1995 年起,截至 2010 年“十一五”结束,在科学标识下,已出版了 25 部专著,其中有不少佳作,受到了科学界和出版界的欢迎和好评。

为了继续促进中国学者对前沿工作做有创见的系统总结,“十二五”期间,《科学》的编者和出版者决定对科学系列学术著作做新的延伸,将科学

专著学术丛书扩展为三个系列品种,即《**科学**专著: 前沿研究》、《**科学**专著: 生命科学研究》、《**科学**专著: 大科学工程》,继续为中国学者著书立说尽一份力。

随着中国科学研究向世界前列的挺进,我们相信,在**科学**系列的学术专著之中,一定会有更多中国学者推陈出新、标新立异的佳作问世,也一定会有传世的名著问世!

周光召

(《科学》杂志编委会主编)

2011年5月



## 前 言

超导电性是具有巨大应用前景和重要科学意义的研究课题。铁基超导体的发现,是铜氧化物高温超导体之后超导研究领域最重要的进展。2008年日本科学家首先发现铁基超导体有 26 K 的超导转变温度,很快中国科学家抓住机遇,不仅迅速将超导转变温度  $T_c$  提高到 50 K 以上,也开展了广泛的物性研究,引发了在世界范围新一轮的研究热潮。中国科学家这些系统、深入的工作,对铁基超导体材料和物理机制的研究作出了重要的贡献,赢得国际学术界的广泛认可。出现这个局面不是偶然的。国家的持续支持、长期的科学积累、研究队伍的壮大成长和研究群体的形成是取得这些成绩的重要前提。

研究表明,铁基超导体是又一类全新的系统,它们虽然不是掺杂的莫特绝缘体,但也有较强的电子关联。与铜氧化物高温超导体类似,超导与磁性关系密切。运用在研究铜氧化物高温超导体研究中积累的经验与技术,较快地推动了对铁基超导体的基础物理研究。目前人们对超导能隙的对称性和超导起源方面已有比较深刻的认识,对已经开展的工作进行总结是及时和有益的。

本书各个章节的撰写者都是从事铁基超导体材料与物性前沿研究的专家,他们根据自己从事的实验研究和所长分别总结综述铁基超导体物性不同方面的物理基础和研究进展,包括铁基超导体材料与结构、电子输运性质、热力学性质、电子结构计算、电子结构探测、电荷动力学、磁性与自旋动力学,以及相关理论研究。本书对于了解铁基超导体的研究现状和全貌将是十分有益的,特别对新进入该领域的年轻学者会很有帮助。

当然,铁基超导体的研究依然在向纵深发展,铁基超导材料方面也可能继续取得新的突破。物理上,对铁基超导体的研究有助于认识包含铜氧化物高温超导体在内的非常规超导体的物理机理,同时也可能对长期以来尚未完全阐明的巡游和局域电子反铁磁性问题有所帮助。希望本书的编写、出版能够吸引更多有才华的年轻学子加入到铁基超导体研究领域,并作出自己的贡献。

赵忠贤 于渌

2012年5月

《科学专著》系列丛书序

前言

第 1 章 铁基超导机理研究面临的挑战 .....	1
§ 1.1 引言 .....	1
§ 1.2 铁基超导体的基本电子结构 .....	3
§ 1.3 能隙函数的对称性及结构 .....	8
§ 1.4 反铁磁涨落与电子的相互作用 .....	12
§ 1.5 展望 .....	15
参考文献 .....	16
第 2 章 铁基超导材料与结构 .....	18
§ 2.1 反氧化铅型结构的 $\text{Fe}_{1+x}\text{Se}$ 超导体 .....	18
§ 2.2 $\text{ZrCuSiAs}$ 结构的铁基超导体 .....	20
§ 2.3 $\text{ThCr}_2\text{Si}_2$ 结构的铁基超导体 .....	28
§ 2.4 $\text{PbFCl}$ 结构的铁基超导体 .....	36
§ 2.5 多层离子插层的铁基超导体 .....	39
§ 2.6 铁基超导体超导电性和晶体结构的关联 .....	45
§ 2.7 与铁基超导体相关的其他层状化合物 .....	46
参考文献 .....	49
第 3 章 铁基超导体的电子结构和磁性质的理论研究 .....	52
§ 3.1 概述 .....	52
§ 3.2 计算方法 .....	55
§ 3.3 四元铁砷化合物 ( $\text{LaOFeAs}$ ) .....	56
3.3.1 非磁性态 .....	57
3.3.2 共线反铁磁性态 .....	61
3.3.3 As 传递的反铁磁超交换相互作用 .....	64
§ 3.4 二元铁硫基化合物 ( $\alpha\text{-FeSe}$ 和 $\alpha\text{-FeTe}$ ) .....	66
3.4.1 非磁性态 .....	67
3.4.2 基态的磁结构 .....	68
3.4.3 讨论与分析 .....	71
§ 3.5 插层三元铁硒化合物 .....	72
3.5.1 $\text{AFe}_2\text{Se}_2$ ( $\text{A} = \text{Cs, Rb, K}$ 或 $\text{Tl}$ ) .....	73
3.5.2 $\text{AFe}_{1.5}\text{Se}_2$ ( $\text{A} = \text{Cs, Rb, K}$ 或 $\text{Tl}$ ) .....	75

3.5.3	$A_{0.6}Fe_{1.6}Se_2$ ( $A = K, Rb, Cs$ 或 $Tl$ )	77
3.5.4	讨论	80
§ 3.6	总结	81
	参考文献	82
<b>第 4 章</b>	<b>角分辨光电子能谱对铁基超导体的研究</b>	<b>83</b>
§ 4.1	角分辨光电子能谱	83
4.1.1	基本原理	83
4.1.2	常见的作图方法	84
4.1.3	优点和缺点	85
§ 4.2	电子结构	86
4.2.1	布里渊区定义	86
4.2.2	$Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$	87
4.2.3	母体化合物	90
4.2.4	122 体系中的空穴和电子掺杂	91
4.2.5	等价态替代的 $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ 和 $Ba(Fe_{1-x}Ru_x)_2As_2$	94
4.2.6	其他铁基材料	95
§ 4.3	超导能隙	98
4.3.1	费米面准嵌套模型	100
4.3.2	局域反铁磁交换配对模型	104
4.3.3	超导能隙的温度依赖	107
4.3.4	超导能隙的掺杂依赖	107
4.3.5	赝能隙	109
4.3.6	超导能隙的各向异性和节点	110
§ 4.4	总结	110
	参考文献	111
<b>第 5 章</b>	<b>铁基超导体的电荷动力学响应</b>	<b>114</b>
§ 5.1	固体光学性质简介	114
5.1.1	光学常数之间的关系	114
5.1.2	带内跃迁与带间跃迁	116
5.1.3	德鲁德模型和洛伦兹模型的光学响应	117
5.1.4	扩展的德鲁德模型	119
5.1.5	求和规则	121
5.1.6	对称性破缺体系的能隙与相干峰	121
§ 5.2	铁基超导体母体的低能激发行为	124
5.2.1	FeAs 基系统母体的自旋密度波能隙	124
5.2.2	$Fe_{1+x}Te$ 体系磁相变前后的电荷动力学	128

5.2.3	$K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ 中 Fe 的 3d 电子的完全局域化	129
§ 5.3	铁基超导系统的光谱特征及分析	132
5.3.1	多分量和单分量分析方案	132
5.3.2	光电导谱中体现的电子关联	136
5.3.3	各向异性的电荷动力学	141
§ 5.4	超导态下超导体的光学性质	148
5.4.1	测量超导能隙	148
5.4.2	$K_xFe_{2-y}Se_2$ 体系中的约瑟夫森耦合等离子体振荡模式	152
5.4.3	超导引起的谱重转移	154
5.4.4	由太赫兹光谱技术探测 $T_c$ 之下超导凝聚的相干峰	155
	参考文献	158
<b>第 6 章</b>	<b>结构、磁序、相变及激发谱的中子散射研究</b>	<b>162</b>
§ 6.1	由铁平方晶格层构成的各体系的结构相变与相图	163
6.1.1	ZrCuSiAs (1111) 结构体系	163
6.1.2	ThCr <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> (122) 结构体系	164
6.1.3	PbFCI (111) 结构体系	165
6.1.4	PbO (11) 结构体系	165
§ 6.2	由铁平方晶格层构成的各体系的反铁磁结构与磁相变	167
6.2.1	1111 体系	167
6.2.2	122 体系	168
6.2.3	111 体系	168
6.2.4	11 体系	168
§ 6.3	由铁平方晶格层构成的各体系的激发谱	169
6.3.1	声子激发谱	169
6.3.2	磁性激发谱	169
§ 6.4	由铁空位层构成的新超导体系的组分、晶体结构与磁序结构	172
	参考文献	174
<b>第 7 章</b>	<b>铁基高温超导体的多重超导能隙、自旋涨落以及自旋轨道耦合</b>	<b>177</b>
§ 7.1	引言	177
§ 7.2	超导态性质	178
7.2.1	PrFeAsO <sub>0.88</sub> F <sub>0.11</sub> 的超导态	178
7.2.2	LaFeAsO <sub>1-x</sub> F <sub>x</sub> 的超导态	180
7.2.3	Ba <sub>0.88</sub> K <sub>0.32</sub> Fe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> 的超导态	183
7.2.4	超导态小结	184
§ 7.3	自旋涨落与超导温度的关联性	184
§ 7.4	自旋涨落的各向异性与自旋轨道耦合	187

§ 7.5 结束语 .....	190
参考文献 .....	190
<b>第 8 章 铁基超导体运输、热力学和超流密度研究 .....</b>	<b>192</b>
§ 8.1 铁基超导体的结构类型和材料特征的简单回顾 .....	192
§ 8.2 能带计算和对电子运输的简单理解 .....	196
§ 8.3 铁基超导体的电输运性质研究 .....	197
8.3.1 较低的各向异性 .....	197
8.3.2 电阻和霍尔效应以及非对称的电子散射率 .....	201
8.3.3 可能的量子临界效应 .....	206
§ 8.4 铁基超导体的比热研究 .....	207
8.4.1 简单的超导配对物理图像 .....	207
8.4.2 几个典型铁基超导系统的比热研究 .....	208
8.4.3 反常的剩余比热系数 .....	213
§ 8.5 铁基超导体的热导研究 .....	215
§ 8.6 铁基超导体的超流密度研究 .....	221
§ 8.7 结束语 .....	226
参考文献 .....	226
<b>第 9 章 铁基超导体的扫描隧道显微镜研究 .....</b>	<b>229</b>
§ 9.1 扫描隧道显微镜的基本工作原理和工作模式 .....	229
§ 9.2 铜氧化物高温超导体的扫描隧道显微镜研究 .....	232
9.2.1 赝能隙相的研究 .....	232
9.2.2 准粒子干涉现象 .....	234
9.2.3 杂质态电子结构的研究 .....	235
9.2.4 实空间有序态和非均匀性研究 .....	237
§ 9.3 铁基超导体的扫描隧道显微镜研究 .....	238
9.3.1 铁基超导材料的表面形貌 .....	240
9.3.2 铁基超导体电子结构的二重对称性 .....	250
9.3.3 铁基超导体超导配对的对称性 .....	255
9.3.4 铁基超导体磁通涡旋的结构和电子态 .....	259
§ 9.4 总结与展望 .....	263
参考文献 .....	265
<b>第 10 章 铁基超导体的理论 .....</b>	<b>269</b>
§ 10.1 概述 .....	269
§ 10.2 基于弱关联的理论总结 .....	270
§ 10.3 铁基超导体母体化合物的磁有序态和理论解释 .....	271

10.3.1 铁基超导体母体化合物的实验结果 .....	272
10.3.2 第一性原理电子结构计算的结果 .....	275
10.3.3 总结和讨论 .....	284
§ 10.4 超导的配对对称性和机理 .....	285
10.4.1 铜基高温超导的 $t$ - $J$ 模型 .....	285
10.4.2 铁磷族化合物双轨道交互耦合模型中的配对对称性 .....	286
10.4.3 讨论和总结 .....	289
§ 10.5 $S_d$ 对称性微观模型 .....	290
参考文献 .....	294
索引 .....	298

## 铁基超导机理研究面临的挑战

## § 1.1 引言

2008 年,日本 Hosono 研究组在掺 F 的  $\text{LaFeAsO}(1111)$  样品中发现了相变温度为 26K 的超导体<sup>[1]</sup>,由此掀起了铁基超导研究的热潮。除了 1111 体系超导体之外,目前还发现了 122(例如  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ )、11(例如  $\text{FeSe}$ )、111(例如  $\text{LiFeAs}$ )体系超导体,以及结构上更复杂的  $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$  超导体。铁基超导体(iron-based superconductor)目前最高的超导相变温度是 55 K,比铜氧化物超导体的最高相变温度 164 K 低。但铁基超导体的研究之所以受到重视,有两方面的原因:其一,Fe 离子是磁性离子,一般认为是对超导不利的,铁基超导体的发现颠覆了这种观点,为探索发现新的超导体开拓了思路;其二,铁基超导体中也存在很强的电子与自旋之间的相互作用,反铁磁涨落起了很重要的作用,铁基超导机理的研究对全面理解和解决高温超导机理问题有参考价值。

超导机理的研究,是物理学研究的一个基本问题。高温超导现象不能在以单粒子近似基础之上的固体理论框架下得到解释,被公认是 21 世纪最具挑战性的一个问题。巴丁(Bardeen)、库珀(Cooper)和施里弗(Schrieffer)提出的超导微观理论(BCS 理论)<sup>[2]</sup>,解决了为什么会出现超导以及如何准确描述超导这个基本问题,但该理论并没有一般性地回答电子是如何形成库珀对(Cooper pair)并凝聚到超导态的问题。这正是高温超导,包括铁基超导研究所面临的问题。

超导机理的研究,主要是要通过对材料的电子结构以及各种物理现象的分析,理解和解决以下三个问题。

1. 电子如何形成配对,产生电子配对的相互作用是什么?

对于金属或合金超导体,电子-声子相互作用是电子配对的主要原因。但对于高温超导体,包括铜氧化物超导体和铁基超导体,是什么相互作用导致了电子的配对,这个问题目前还没有达成共识。一般认为反铁磁(antiferromagnetic, AFM)涨落造成电子配对的可能性大些,但实验上并没有无可争辩的证据支持这种观点。

电子-声子相互作用导致的超导相变临界温度一般估计不会超过 40 K。超出这个上

限,电子-声子相互作用会变得很强,由此可能造成晶体的失稳,而不是超导。这就是许多人认为高温超导不太可能是电子-声子相互作用导致的一个原因。但到目前为止,无论是从理论上,还是实验上,都不能真正排除电子-声子相互作用的可能性。

处理电子-声子相互作用要比处理反铁磁涨落简单得多。原因是电子-声子相互作用与电子-电子相互作用相比,是一种弱相互作用,可作为微扰处理,而且米格达尔(Migdal)定理成立,可忽略相互作用的顶角修正,其物理特性可通过求解耶利阿什贝格(Eliashberg)方程得到。但对反铁磁涨落导致的超导系统,相互作用很强,目前还没有一个和耶利阿什贝格理论相对应的理论描述。这也给判断高温超导电子配对是不是反铁磁涨落导致的带来困难。

## 2. 配对的电子是如何形成相位相干、凝聚到超导相的?

对于常规的金属超导体,由于超导凝聚能,或更确切地讲,超导相位相干能(或相位相干的刚度,正比于超流密度)远大于超导能隙(superconducting energy gap),超导电子一旦形成配对,立即就和其他库珀对形成相干,超导转变温度区间很小。在BCS平均场理论中,这部分内容基本没有讨论。从这个意义上讲,BCS理论并不是一个完备的理论。传统超导理论对相位涨落的讨论,大多是基于金兹堡-朗道理论(Ginzberg-Landau theory,简称G-L理论)和对XY模型的分析得到的,缺乏微观的物理图像和系统的理论描述。

对于高温超导体,特别是铜氧化物超导体,由于掺杂电子(空穴)浓度很低,载流子很少,超导相位相干能并不一定大于超导能隙,拆对(即把库珀对打散)不再是破坏超导的唯一途径,相位涨落变大,超导电子形成配对,并不能立即和其他库珀对形成相干,造成超导转变温度区间变宽,对相位相干过程的研究变得重要。

## 3. 在超导相,如何描述系统的物理性质?

在超导相中,由于超导非对角长程序的建立,抑制了量子涨落,平均场近似成立,超导态的物理性质可以通过BCS平均场理论得到很好的描述。事实上,这是BCS理论解决得最彻底的一个问题。原则上,只要知道超导体的电子结构和库珀对的对称性,运用BCS平均场理论,就能准确预测超导体的物理性质。这就是为什么要研究超导电子配对对称性(superconducting pairing symmetry)的原因。但要指出,超导长程序的存在,抑制了相互作用的许多特征,因此超导的对称性对造成超导电子配对的相互作用并不敏感,不同的相互作用可能导致相同的超导对称性。因此仅凭对称性反推导致超导电子配对相互作用的起源,其结论是不唯一的。研究超导配对的对称性,是为了准确描述超导态的物理性质,但不是超导机理研究的全部。

s波超导体的配对函数,不存在能隙节点(即能隙为零的点),两个电子在空间同一个点上出现的概率是有限的。与之相反,d波超导体(或其他有能隙节点的超导体)存在能隙节点,两个电子在空间同一个点上出现的概率为零。

金属或合金超导体的库珀对基本都是s波对称的。铜氧化物高温超导体经过过去



二十多年,特别是 20 世纪 90 年代中后期大量的理论和实验研究,现已证明具有 d 波对称性。但铁基超导体的电子配对到底具有什么对称性,目前还不是很肯定。原因是铁基超导体是一个多带系统,有五个能带跨越费米面(Fermi surface),不同能带之间的相位可以有差别,有些带可能存在能隙,而有些没有。是什么导致了这种差异的存在?目前还不清楚。

要解决铁基超导机理问题,特别是铁基超导配对相互作用的起源问题,必须对这些材料在正常态的物理性质作细致的分析和研究。但在正常态中,各种量子涨落效应并存,只有通过非常精细的定量分析,才能把不同的效应分开。但高温超导体,尤其是铜氧化物超导体的正常态非常不正常,出现了赝能隙(pseudogap)、费米弧(Fermi arc)或费米圈(Fermi pocket)、线性电阻、线性磁化率(susceptibility)等大量反常现象。这些现象在现有的固体理论框架下都不能得到很好的解释。系统地发展和建立固体的多体电子理论是一个极具挑战性的问题,不能解决这个问题,要全面解决铁基超导机理问题是做不到的。

铁基超导的研究从 2008 年开始,到现在进展很快,不断有新的实验现象和结果的报道。要全面评述铁基超导机理研究的现状,本文是做不到的。本章作者只是基于自己的理解,对铁基超导机理研究的一些基本问题,作一个大致的评述。有关的细节,读者还可以参考本书的其他章节。

## § 1.2 铁基超导体的基本电子结构

铁基超导体晶体结构的一个共同之处是,都存在由 Fe 离子形成的一个正方格子,As (或者 P、Se、Te 等)离子交错处在 Fe 离子形成的四边形的上下两边。铁基超导体的载流子主要处于由 FeAs 构成的平面,面内的电导远大于垂直于该面的电导,是一种准二维材料。对系统导电性质贡献最大的是 Fe 的 3d 电子和 As 的 4p 电子,这与铜氧化物超导体有一些相似。在铜氧化物超导体中,起主要作用的是 Cu 的 3d 电子和 O 的 2p 电子。但不同之处是在铜氧化物超导体中,只有 Cu 的  $3d_{x^2-y^2}$  和 O 的 2p 轨道杂化后形成的 Zhang-Rice 单态对低能电导有贡献,是一个单带系统;而铁基超导体中 Fe 的 5 个 3d 轨道对费米面或多或少都有贡献,是一个多带系统。

在高温相,铁基超导材料是一个顺磁金属。如图 1-1 所示是  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  在顺磁相的能带和费米面的结构,其他铁基超导体的母体在顺磁相的能带结构基本与之相似。有四个能带通过费米面,其中两个是 X-P 中心的电子型费米面,另两个是以  $\Gamma$ -Z 为中心的空穴型费米面。这四个通过费米面的能带,有一个三维性比较强,沿 c 轴方向的色散比较大,其他三个能带基本是二维型,沿 c 轴方向的色散很小。对 1111 体系或空穴掺杂的 122 体系材料,除了以上四个费米面,在 Z 点周围还有一个新的空穴型费米面出现。此外,1111 体系材料的二维性更强,除了在 Z 点周围空穴型能带之外,其他四个能带沿 c 轴方向的色散都很小。