通过机器学习驱动的发现揭示铁基超导体中的本征涡旋核心态

Yueming Guo[1*†]、Hu Miao[2†]、Qiang Zou[1,3†]、Mingming Fu[1,4], Athena S. Sefat[2], Andrew R. Lupini[1], Sergei V. Kalinin[1*]、Zheng Gai[1*]

[1]橡树岭国家实验室纳米相材料科学中心，美国田纳西州橡树岭 37830

[2]橡树岭国家实验室材料科学与技术部，美国田纳西州橡树岭 37830

[3]西弗吉尼亚大学物理与天文学系，美国西弗吉尼亚州摩根敦 26506

[4]厦门大学物理系、OSED、福建省半导体材料与应用重点实验室，中国厦门 361005

† 这些作者贡献相同。

* 通讯作者：dr.yueming.guo@gmail.com、sergei2@utk.edu、gaiz@ornl.gov。

摘要

超导涡旋中的电子态蕴含着有关配对机制和拓扑的重要信息。尽管扫描隧道显微镜/谱学（STM/S）能够对涡旋成像，但很难将本征电子态与地下缺陷和无序等外在效应区分开来。我们将STM/S与无监督式机器学习相结合，开发了一种方法，用于筛选出被铁基超导体中嵌入式无序钉扎的涡旋。该方法以一种不带偏见的方式揭示本征涡旋核心态，并有望解开有关马约拉纳零模的谜题。

本手稿由*UT-Battelle*有限责任公司根据与美国能源部签订的合同编号 *DE-AC05-00OR22725* 编制。美国政府保留相关权利；出版商接受本文发表，即承认美国政府保留一项非独占、已付清、不可撤销、全球范围的许可，可出版或复制本手稿的已发表版本，或允许他人出于美国政府目的这样做。能源部将根据*DOE*公共访问计划（*http://energy.gov/downloads/doe-public- access-plan*），向公众开放这些由联邦资助的研究成果。

在 II 型超导体中，施加磁场可以局部破坏库珀对并引入磁涡旋 [1]。了解涡旋核心中的电子态，对于确定配对机制至关重要 [2]。近期研究发现，某些铁基超导体中的涡旋核态可能呈现非阿贝尔马约拉纳零能模（MZM）的特征，其特点是出现不受磁场影响的零电导峰 [3-8]。可以利用扫描隧道谱（STS）研究涡旋核态，其中微分电导与局域态密度（LDOS）成正比。然而，形貌中不可见的外在因素使 STS 测量结果难以解读。这些因素包括表面下方的嵌入杂质、化学不均匀性或晶体无序，它们可能改变涡旋核态。 [9-13]。在铁基超导体中，这些嵌入杂质和无序也会充当钉扎中心，在磁场增强时钉扎涡旋运动并扭曲涡旋晶格（即体钉扎）[14-16]。因此，要从涡旋核态中排除这些外在因素，就有必要将涡旋核态与其钉扎行为关联起来。这构成了我们揭示本征涡旋核心态的方法基础。

为获得本征涡旋核心态，理想情况下应使用几乎不存在晶体无序、且因纯粹的涡旋间排斥而呈现周期性涡旋晶格的样品 [17,18] 。遗憾的是，许多铁基超导体样品中存在化学不均匀性和无序，并通过强烈的

钉扎机制 [16, 19, 20]导致涡旋晶格扭曲。这使得确定哪些涡旋具有本征涡旋核心态变得困难。此外，STS实验的效率有限，只能以较高的空间分辨率和能量分辨率检查有限数量的涡旋，因此难以判定各种谱特征的来源。尤其是，无序诱导的零偏压峰可能会呈现出马约拉纳零能模的某些特征，并导致对STM数据的偏颇解读，这应当引起整个领域的警觉 [10]。因此，必须为铁基超导体开发能够无偏识别具有本征电子态的无缺陷涡旋的方法。

本研究将机器学习与为提高效率而以降低分辨率采集的大量 STS 数据相结合，以识别没有地下缺陷或无序的涡旋。该识别方法基于在 $Ba(Fe_{0.96}Ni_{0.04})_2As_2$，中发现的涡旋位置与涡旋核态之间的关联；在该材料中，强涡旋钉扎机制占主导地位 [21]。同样的涡旋钉扎机制也主导着 $FeTe_xSe_{1-x}$ [22]，而该材料涡旋核态中是否存在马约拉纳零能模仍有争议 [10]。因此，我们预计，该方法也可能适用于相关材料。

这里，我们首先介绍一些材料表征，包括表面结构、超导能隙和表面缺陷图、涡旋图像，以及空间平均的涡旋核态（图 1–3）。随后，我们展示在最高 4 T 的磁场下发现的涡旋位置与涡旋核态之间的关联（图 4），这构成了利用强钉扎中心筛选涡旋的方法基础。最后，我们概述整体方法（图 5）。

通过扫描隧道显微镜（STM）在恒流模式下获取 $Ba(Fe_{0.96}Ni_{0.04})_2As_2$ 的形貌图像。扫描隧道显微镜实验和样品生长的详细信息见补充材料。在 4.2开尔文、无磁场条件下拍摄了整个 200 x 200 nm^2 区域的形貌图像，如图1(a)所示。对一个子区域的放大图像显示，该表面存在 2 x 1 表面重构，如图1(b)所示；整个研究区域内均未观察到孪晶界。

在与图1(a)中形貌相同的区域进行了电流成像隧道能谱（CITS）测量，并使用锁相放大器调制偏压。在 0 T 下采集了一个由 128 x 128 个像素组成的网格中的 dI/dV 谱，能量分辨率为 0.25 meV。根据去噪后的 dI/dV 曲线中的相干峰计算出超导能隙图 [图2(a)]；其中使用主成分分析（PCA）（见补充材料）对光谱进行去噪。图2(b)中的能隙大小直方图显示，超导能隙大小的峰值约为 4 meV，与先前的报道一致 [16, 23]。表面还表现出电子不均匀性（表明存在表面缺陷），其证据是光谱类别图 [图2(c)],能够区分存在和不存在超导态的区域。各类别的平均 dI/dV 曲线如图2(d)所示。

使用电流成像隧道能谱，在逐渐增大的垂直磁场下，从 2 T 增至 4 T 和 6 T，且期间未进行退磁，采集了一个包含 128 x 128 个像素、能量分辨率为 1 meV 的 dI/dV 谱网格。谱线采集区域与形貌相同。如图3(a)、(b)和(c)所示，分别通过从 2 T、4 T 和 6 T 下的零偏压图中减去 0 T 下的零偏压图，构建了涡旋图像。通过最大化同步采集的形貌图像之间的互相关，将非零磁场下的零偏压图与 0 T 下的图像仔细配准，所得相关系数分别为 0.91、0.86 和 0.88。

通过对高斯平滑后的涡旋图像应用峰值查找算法，确定了涡旋的位置。随着磁场从 2 T 增加到 4 T，以及从 4 T 增加到 6 T，发现部分涡旋保持在相同位置；这里允许 3 个像素的距离误差，以考虑较小的配准误差。具体而言，在磁场增加至 4 T 时，2 T 下的 71 个涡旋中有 14 个仍处于相同位置 [图3(a)和(b)中的黄色圆圈]，；当磁场进一步增加至 6 T 时，仍有 5 个涡旋保持在相同位置 [图3(a-c)中的红色圆圈]。这些静止涡旋很可能是被钉扎的，将在下一节中进一步讨论。

计算了每个磁场下所有涡旋的 dI/dV 谱平均后的空间演化[图3(d-f)]。与相关结果类似，在费米能级处或其附近未观察到峰

在 Co 掺杂的 $BaFe_2As_2$ [16] 中。这种缺失的原因目前仍存在争议[24-27], , 但本文不对此进行讨论。

一个有趣的观察是，随着磁场从 2 T 增加到 4 T 和 6 T，平均涡旋核态呈现出不同的特征。具体而言，2 T 下涡旋中心处的 dI/dV 曲线 [图 3(d) 中的紫色曲线] 明显比 4 T 和 6 T 下的曲线更平缓[图 3(e) 和 (f) 中的紫色曲线]。为排除这些差异由表面不均匀性造成的可能性，我们在每幅涡旋图像中与涡旋核相同的圆形区域内对 0 T 下的 dI/dV 曲线进行了平均 [图 3(g-i)], , 结果显示它们几乎彼此相同。此外，从表面形貌图像中未发现涡旋位置与表面缺陷之间存在关联（如补充信息图 S1 所示）。这证实了 2 T 与 4 T 之间（以及 2 T 与 6 T 之间）平均涡旋核态的差异并非由表面不均匀性引起。

我们对所有 4 T 下的涡旋核态进行了主成分分析（PCA），不论它们与涡旋中心的距离如何。转换后的光谱数据表示为图 4(a- c) 所示的前 3 个主成分（PCs）的线性组合。这 3 个主成分解释了全部光谱数据中 91% 的变化，这表明可以根据主成分权重/系数的空间分布图对所有涡旋进行分类 [图 4(d- f)]。

在图 4(d-f) 中，静止涡旋用黄色圆圈标出，与图 3(b) 中一样。图 4(d) 和 (f) 中的权重呈现随机波动，而在图 4(e) 中，第二主成分的权重在几乎所有圈出的涡旋中都为负值，在其余涡旋中则有更大的波动或呈正值。这表明静止涡旋中的电子态具有独特性。第二主成分权重为负值意味着费米能级附近的微分电导增强，且向上凹的程度减弱；对比图 4(h) 和 (i) 中圈出与未圈出涡旋的平均微分电导即可证实这一点。图 4(e) 中每个涡旋的第二主成分权重总和显示，所有 14 个静止涡旋的数值都比其余涡旋更负（图 4(g)）。

为研究表面无序的影响，我们还对与 4 T 下涡旋核心相同区域的 0 T 谱进行了主成分分析（图 S2）。主成分权重与圈出的区域之间未发现关联，这表明钉扎中心大多独立于表面不均匀性或无序，这与此前在钴掺杂 BaFe2As2 中的研究结果一致[16]。相反，4 T 磁场下静止涡旋中独特的涡旋核态可能是由体钉扎造成的 [15]。与 $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ [28] 等高度各向异性超导体不同，在这种情况下，表面钉扎并不起主导作用。

主成分分析也应用于 2 T 和 6 T 的光谱数据（图 S3）。2 T 下的涡旋核态仅在主成分权重上表现出波动，这表明只有一种类型的涡旋核态。然而，与 4 T 的情况相似，在 6 T 下也发现涡旋核态存在明显的分离。6 T 磁场下所有 5 个静止涡旋的第二主成分权重均为负值，部分未圈出的涡旋的第二主成分权重也为负值（图 S3）。一种可能的解释是，部分仅在 4 T 后出现的涡旋被嵌入式钉扎中心捕获，而其他涡旋则没有。关于这些现象的详细解释将在讨论部分阐述。

基于静止涡旋与其独特涡旋核态之间的关联，我们开发了一种方法，用于识别受到表面下方钉扎中心（如地下无序）影响的涡旋。图 5 概述了该方法的工作流程，展示了如何剔除与表面及其下方的缺陷和无序相关的涡旋核态。该工作流程实质上描述了一种算法，可自动以无偏的方式揭示本征涡旋核心态。

通过分析涡旋核态与位置之间的关联，我们可以确定哪些涡旋未嵌入钉扎位点，并研究其本征涡旋核心态。通过考察涡旋成核的动力学过程，可以对其进行分类；这一过程由涡旋间排斥、钉扎吸引和热涨落之间的相互作用驱动。正如对铌薄膜进行的洛伦兹透射电子显微镜研究所示 [29, 30],，强钉扎系统中的涡旋成核分为三个阶段[31]：阶段 1，涡旋

在钉扎中心形成，每个钉扎中心占据一个涡旋（即单涡旋钉扎）；阶段 2，涡旋密度与钉扎中心密度相匹配（即匹配场[32,33]），随后形成的涡旋占据无缺陷的间隙位置；阶段 3，单涡旋钉扎转变为集体钉扎，涡旋沿单列移动。

由于 $Ba(Fe_{0.96}Ni_{0.04})_2As_2$ 也含有强钉扎中心[21, 34], ，因此可以从这些阶段的角度理解观察到的关联。2 T 涡旋晶格对应阶段 1，因为与钉扎涡旋相关的涡旋核态只有一种。4 T 涡旋晶格符合阶段 2 或处于阶段 2 和阶段 3 之间，因为与钉扎涡旋和间隙涡旋相关的涡旋核态有两种。6 T 涡旋晶格主要处于阶段 3，因为单个钉扎涡旋的数量较少，并且观察到了由涡旋线构成的涡旋图像。

基本上，我们的方法（图 5）会在阶段 2 搜寻间隙涡旋，此时磁场略高于匹配场。这些涡旋远离体内的钉扎位点，所带有的外在特征也较少。

我们的方法有望为其他铁基超导体中的难题提供启示，例如 $FeTe_xSe_{1-x}$，它也表现出强钉扎行为 [22, 35]。近期有研究声称，在 $FeTe_xSe_{1-x}$的涡旋中观察到了马约拉纳零能模（MZM），并在 0.15 至 6 T 的磁场范围内，于部分涡旋中发现了持续存在的零能模[5]。我们的方法能够识别强钉扎系统中的无缺陷涡旋，或可为理解这种材料的本征涡旋核心态提供有价值的工具。

总之，我们的结果表明，即使是基础的机器学习算法，也能揭示 STS 数据中的重要差异和关联，为深入理解涡旋核态的微观起源提供新的视角。虽然监督式机器学习也可用于这一目的，但选择合适的模型至关重要。我们建议采用无监督式机器学习对大规模 STS 数据进行综合分析，从而最大限度地减少在解读涡旋核态时的主观性和对操作人员的依赖。

致谢

本研究得到美国能源部（DOE）科学办公室基础能源科学（BES）材料科学与工程部的支持；扫描隧道显微镜实验在纳米相材料科学中心（CNMS）进行。该中心是美国能源部科学办公室设于橡树岭国家实验室的用户设施。

作者贡献

Y.G.、S.V.K. 和 Z.G. 提出了关于数据分析的构想。Y.G. 和 S.V.K. 开展了机器学习工作。Y.G.、H.M. 和 A.R.L 撰写了手稿。Q.Z.、Z.G. 和 M.F. 开展了扫描隧道显微镜实验。A.S.S. 培育了晶体。Y.G.、H. M. 和 Q.Z 的贡献相同。

数据可用性

本研究的数据可在 https://github.com/DrYGuo/STS 获取。

代码可用性

本研究所附代码可在 https://github.com/DrYGuo/STS 获取。

图

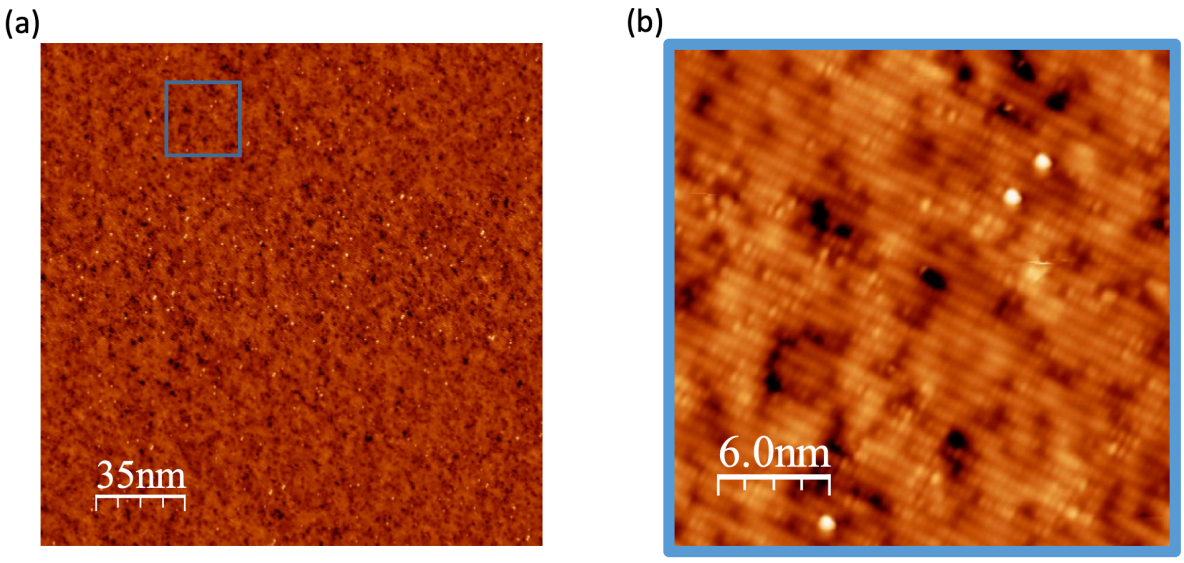


图 1. $Ba(Fe_{0.96}Ni_{0.04})_2As_2$ 的形貌图像。(a) 本研究中整个样品表面的形貌图像，CITS测量在同一区域进行。未观察到孪晶边界，因此排除了孪晶界是主要钉扎位点的可能性 [40]。放大图展示了一个子区域（以蓝色方框标出）。(b) 放大区域中可见 2 x 1 型表面重构。

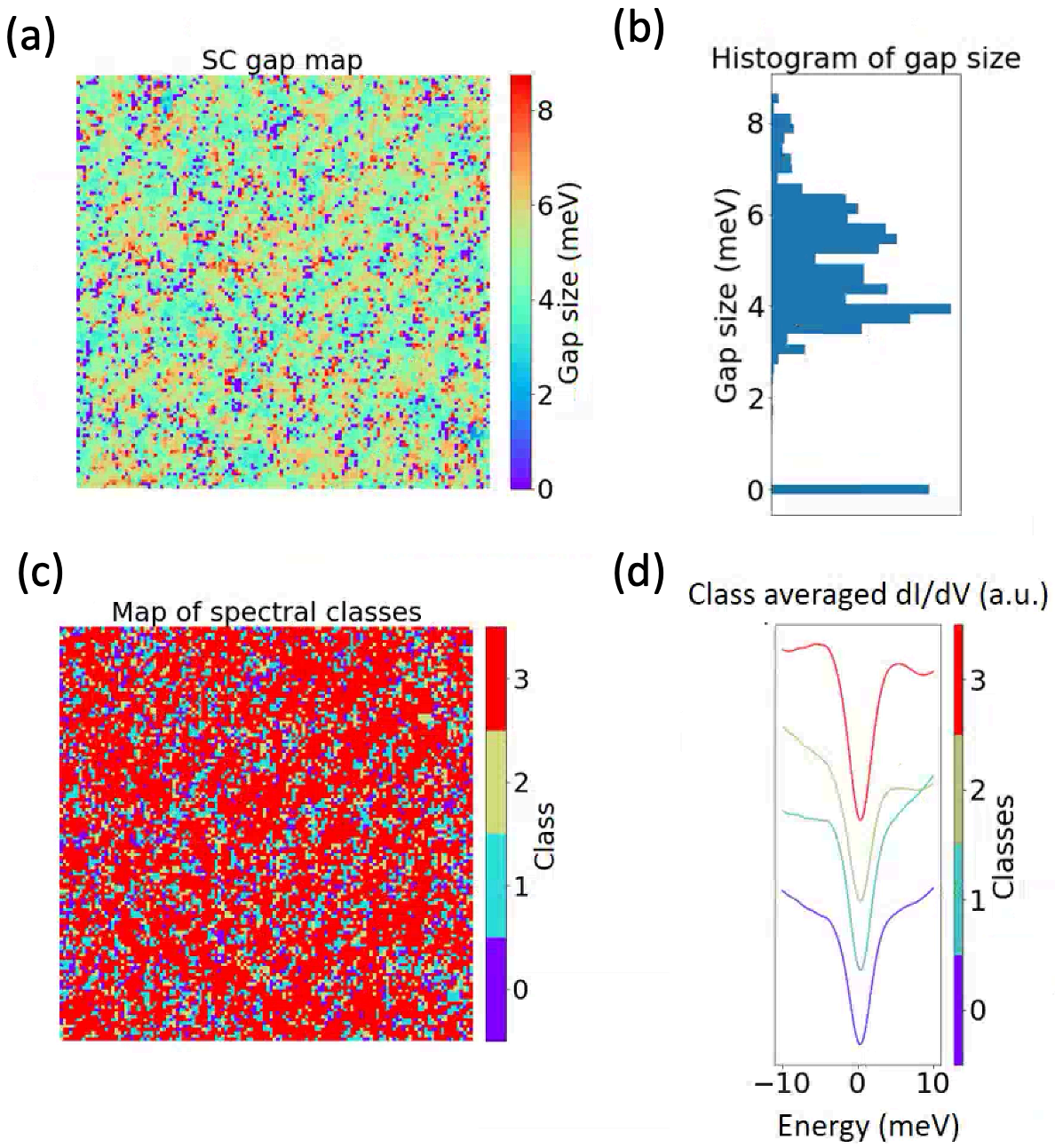


图2：在 0 T 下根据 CITS数据绘制超导能隙和表面缺陷态分布图。(a) 与图1(a)相同区域的超导能隙图。能隙大小定义为两个相干峰之间距离的一半。对于只有一个尖锐相干峰的谱，能隙大小定义为该相干峰到零偏压的距离。(b) 能隙大小的直方图，其中没有相干峰的谱计为零。(c) 一张

光谱类别分布图，其中红色区域（类别 3）表示具有完整超导特征的区域，如(d)中的红色曲线所示。该图覆盖的区域与图1(a)相同。(d) 类别平均 dI/dV 曲线，其中类别 0 没有相干峰或超导能隙，类别 1 在占据侧有一个相干峰，类别 2 在未占据侧有一个相干峰，类别 3 在两侧都有相干峰。(c)中，类别 3 的谱覆盖了总面积的 64%。

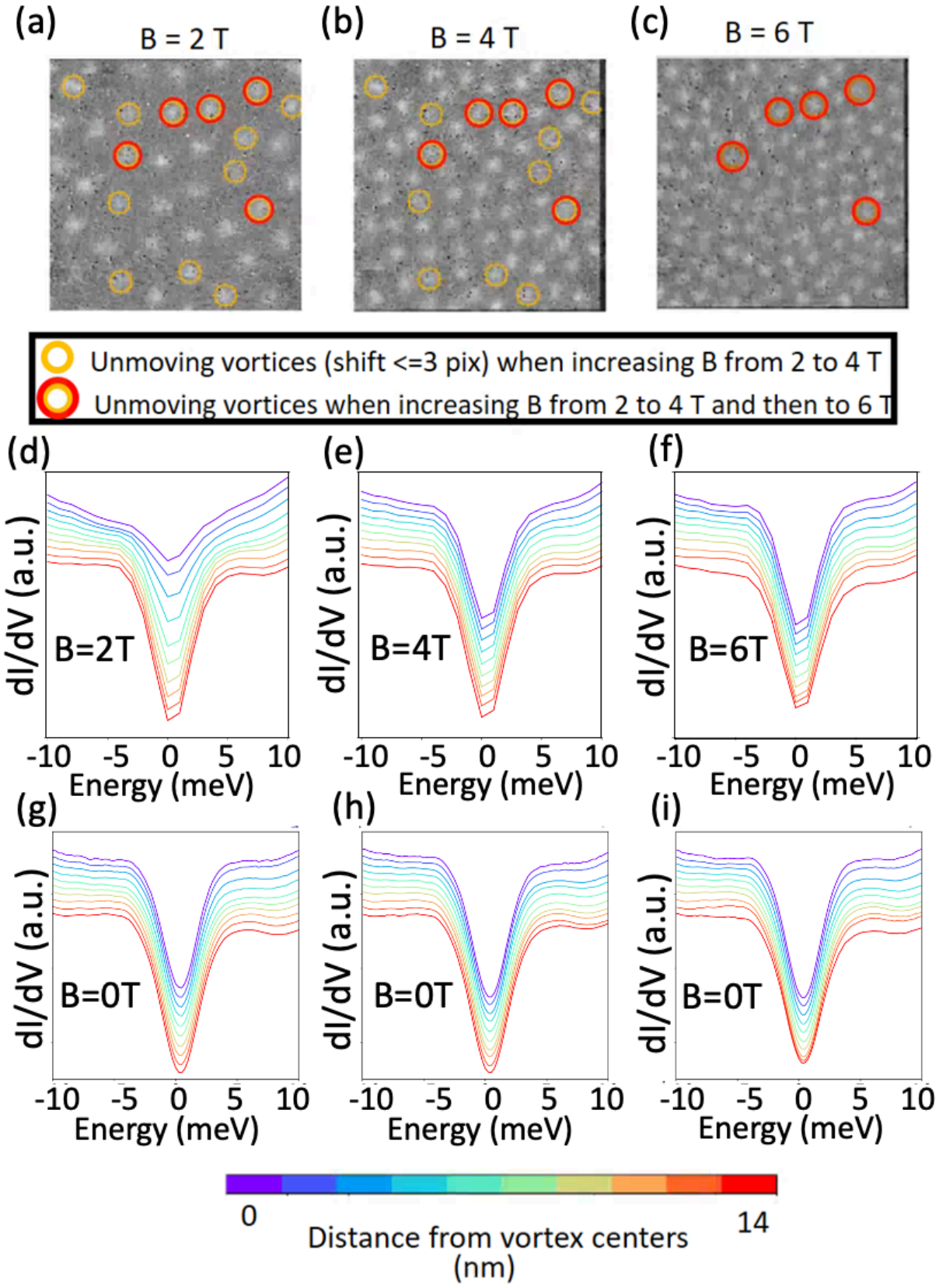

(a)
B = 2 T
(b)
B = 4 T
(c)
B = 6 T
Unmoving vortices (shift <=3 pix) when increasing B from 2 to 4 T
Unmoving vortices when increasing B from 2 to 4 T and then to 6 T
(d)
(e)
(f)
dI/dV (a.u.)
B=2T
B=4T
B=6T
-10 -5 0 5 10
Energy (meV)
(g)
(h)
(i)
B=0T
0
14
Distance from vortex centers (nm)

图 3：涡旋图像和平均涡旋核态。（a-c）分别是在 2、4 和 6 T 磁场下，与图 1(a) 所示相同区域的涡旋图像。随着磁场从 2 T 增加到 4 T，进而增加到 6 T，部分涡旋（圆圈标出）保持静止（位于半径为 3 个像素 / 4.68 nm 的范围内）。涡旋图像通过从零场图中减去有限磁场下的零偏压图得到。通过最大化同时采集的形貌图像之间的互相关，将非零磁场下的零偏压图与零场图仔细对齐。减法产生的残余伪影在涡旋图像的边缘清晰可见。（d-f）分别对涡旋图像（a-c）中所有涡旋的 dI/dV 曲线取平均后得到的空间演化，显示在 2 T 与 4 T 或 2 T 与 6 T 之间，涡旋中心（紫色线）存在显著差异。（g-i）分别从与（d-f）相同的位置获得 0 T 下的平均 dI/dV 曲线。在相同位置未观察到显著差异，表明（d-f）中的差异并非由表面不均匀性引起。

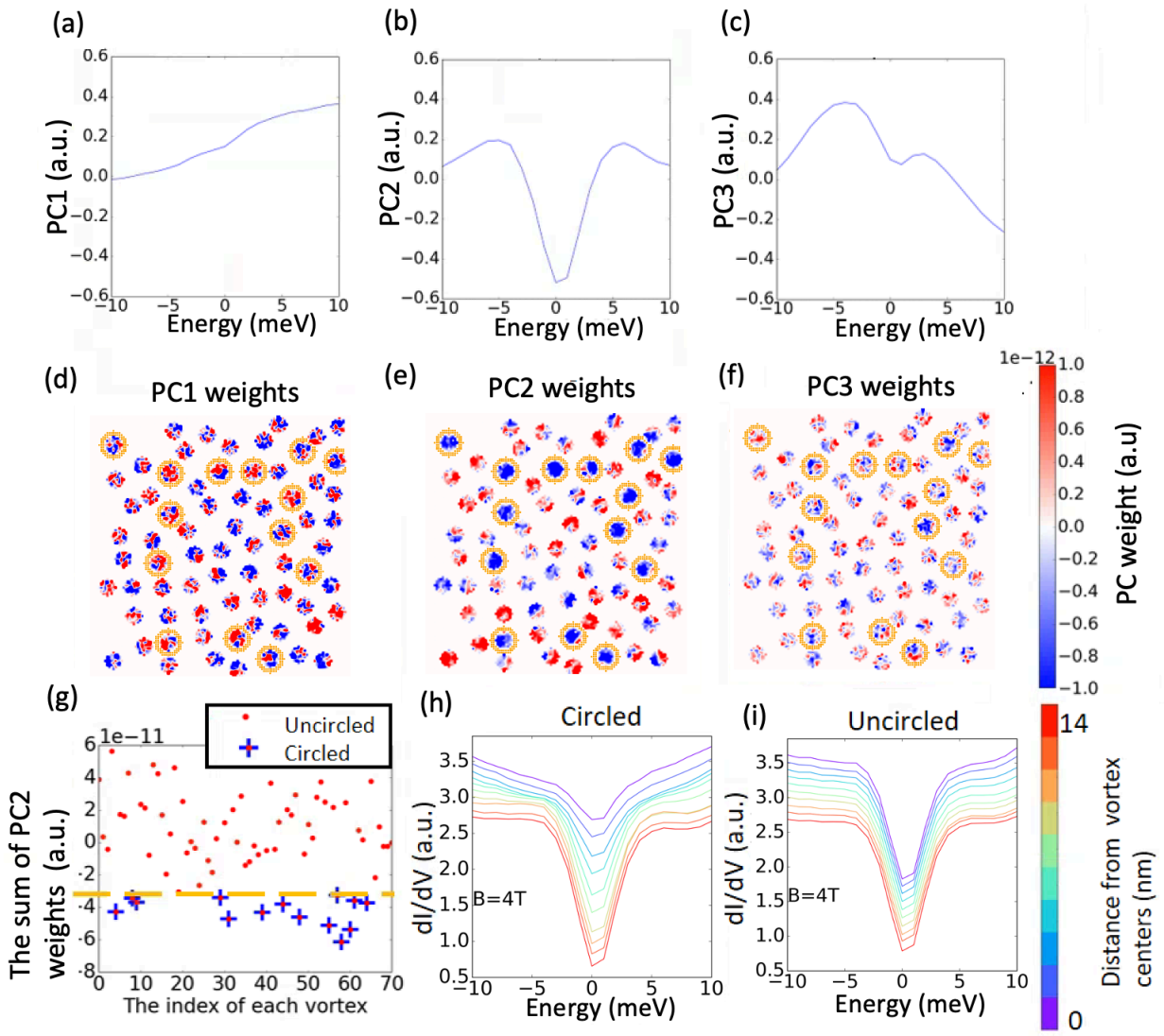


图 4：对 4 T 下涡旋内部的扫描隧道谱（STS）数据进行主成分分析（PCA）后，发现涡旋位置与涡旋核态之间存在关联。涡旋区域定义为半径为 4 个像素（6.24 nm）的圆形区域，略大于相干长度 ξ（约 4-5 nm [23]）。（a-c）dI/dV 谱的前 3 个主成分（主成分）占所有涡旋核态方差的 91.3%。（d-f）每个主成分的系数/权重图对应于图 3(b) 所示的相同区域。涡旋区域以颜色标示，静止涡旋用橙色圆圈标出 [与图 3(b) 中相同]。在（e）中，第二主成分权重与圆圈的位置明显相关。（g）绘出了 4 T 磁场下 71 个涡旋中每个涡旋的第二主成分权重之和，显示出涡旋核态之间清晰的区别。

如黄色虚线所示，由于钉扎，静止（圈出）涡旋与移动（未圈出）涡旋之间存在差异。该图凸显了涡旋位置与涡旋核态之间关联的统计显著性——所有静止涡旋的第二主成分权重总和都比其他涡旋的更负。（h）图中显示了圈出（静止）涡旋的平均微分电导；（i）图中显示了未圈出（移动）涡旋的平均微分电导。

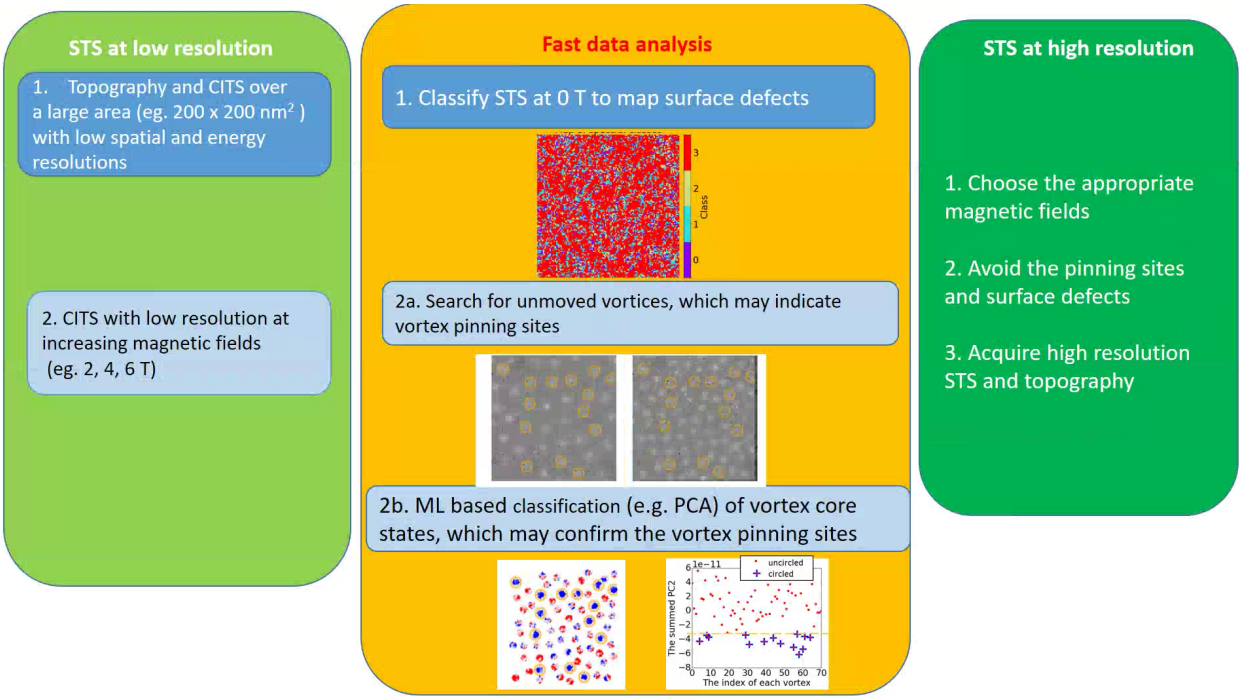


图 5：用于识别本征涡旋的拟议方法流程图。该流程从低分辨率 STS 数据（左侧，浅绿色）开始。随后，利用快速数据分析流程筛查钉扎涡旋和表面缺陷（中间，橙色）。最后，使用高分辨率 STS 对剩余涡旋进行研究（右侧，深绿色）。

参考文献

[1] A. A. Abrikosov, 《第二类超导体的磁性》, Sov Phys Jetp-Ussr 5, 1174–1183（1957）。[2] C. Caroli、P. G. Degennes 和 J. Matricon, 《II 型超导体涡旋线上的束缚费米子态》, Phys Lett 9, 307–309（1964）。[3] Q. Liu 等, 《高温超导体涡旋核心中稳健且纯净的马约拉纳零模（Li0.84Fe0.16）OHFeSe》, Phys Rev X 8, 041056（2018）。[4] S. Y. Zhu 等, 《铁基超导体中涡旋零模近乎量子化的电导平台》, 科学 367, 189–192（2020）。[5] D. F. Wang 等, 《铁基超导体中马约拉纳束缚态的证据》, 科学 362, 333–335（2018）。[6] N. B. Kopnin 和 M. M. Salomaa, 《超流体氦-3中的相互摩擦——涡旋核心束缚态的影响》, 物理评论B 44, 9667–9677（1991）。[7] G. E. Volovik, 《超流体和超导体中量子化涡旋上的费米子》, Turk. J. Phys. 20, 693–713（1996）。[8] P. Zhang 等, 《在铁基超导体表面观测到拓扑超导性》, 科学 360, 182–186（2018）。[9] Ch. Renner、A. D. Kent、Ph. Nidermann 和 Ø. Fischer, 《从洁净极限到脏极限的涡旋核心扫描隧道谱》, Physical Review Letters 67, 1650–1652（1991）。[10] S. Das Sarma 和 H. Pan, 《无序诱导的马约拉纳纳米线零偏压峰》, 物理评论B 103, 195158（2021）[11] J. E. Hoffman, 《谱学扫描隧道显微镜对铁基超导体的启示》, Rep Prog Phys 74, 124513（2011）。[12] C.-L. Song 等, 《铁基超导体中的掺杂剂团簇化、电子不均匀性与涡旋钉扎》, 物理评论B 87, 214519（2013）[13] P. Hosur、P. Ghaemi、R. S. K. Mong 和 A. Vishwanath, 《掺杂拓扑绝缘体中超导体涡旋末端的马约拉纳模》, Physical Review Letters 107, 097001（2011）。

[14] Q. H. Chen, G. Teniers, B. B. Jin 和 V. V. Moshchalkov，铁磁和反铁磁磁点阵列中的超薄超导薄膜的钉扎特性与涡旋动力学

ys

磁点。物理评论*B* **73**，014506（2006）。[15] Y. Yin、M. Zech、T. L. Williams 和 J. E. Hoffman，铁基磷族化合物的扫描隧道显微镜与光谱学。*Physica C* **469**，535-544（2009）。[16] Y. Yin 等，铁基磷族超导体 BaFe1.8Co0.2As2 的扫描隧道谱与涡旋成像。*Physical Review Letters* **102**，097002（2009）。[17] J. E. Hoffman 等，围绕涡旋核的准粒子态呈现四个晶胞周期性的图案

g

$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$中的涡旋核。科学 **295**，466-469（2002）。[18] H. F. Hess、R. B. Robinson、R. C. Dynes、J. M. Valles 和 J. V. Waszczak，扫描隧道显微镜观察阿布里科索夫磁通晶格以及磁通子附近和内部的态密度。*Physical Review Letters* **62**，214-216（1989）。[19] T. Machida 等，Fe(Se,Te)超导拓扑表面态中的零能涡旋束缚态。自然·材料 **18**，811–815（2019）。[20] T. Hanaguri 等，LiFeAs中涡旋的扫描隧道显微镜/谱学。物理评论*B* **85**，214505（2012）。[21] V. A. Vlasenko、K. S. Pervakov、S. Y. Gavrilkin 和 Y. F. Eltsev，非常规钉扎 i

n

122家族铁基超导体。*Physcs Proc* **67**, 952-957 (2015).[22] Z. F. Wu *et al.,* $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ 单晶中的磁通钉扎与弛豫。超导科学与技术 **29**, 035006 (2016).[23] Q. Zou, M. Fu, Z. Wu *et al.*, $Ba(Fe_{1-x}T_x)_2As_2$ 中的竞争与协同性电子态，其中 T = = Co、Ni、Cr。*npj*量子材料. **6,** 89 (2021).[24] X. Hu, C. S. Ting, and J. X. Zhu，铁基超导体最简双能带模型中的涡旋核态。物理评论*B* **80**, 014523 (2009).[25] H. M. Jiang, J. X. Li, and Z. D. Wang，具有共线反铁磁核的铁基超导体中的涡旋态。物理评论*B* **80**, 134505 (2009).

[26] Y. Gao, H. X. Huang, C. Chen, C. S. Ting, and W. P. Su，空穴掺杂铁基超导体中的涡旋态模型。Physical Review Letters 106, 027004 (2011).[27] D. Wang, J. A. Xu, Y. Y. Xiang and Q. H. Wang，铁基超导体涡旋核周围的电子结构。物理评论B 82, 184519 (2010).[28] S. H. Pan et al.，$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$中涡旋核电子结构的扫描隧道显微镜研究。Physical Review Letters 85, 1536-1539 (2000).[29] K. Harada et al.，通过电子显微镜实时观测超导体中的涡旋晶格。Nature 360, 51-53 (1992).[30] K. Harada et al.，直接观测具有规则缺陷阵列的超导薄膜中的涡旋动力学。科学 274, 1167-1170 (1996).[31] 日立集团。外加磁场增强时，穿入具有方形人工缺陷阵列的铌薄膜中的涡旋运动。网址：https://www.hitachi.com/rd/research/materials/quantum/movie/index.html。[32] D. R. Nelson and V. M. Vinokur，超导涡旋阵列中的玻色子局域化与关联钉扎，物理评论B 48, 13060-13097 (1993)[33] G. Blatter. et al. 高温超导体中的涡旋。Rev Mod Phys. 66, 1125-1388 (1994).[34] A. Yamamoto et al.，钴掺杂铁基材料$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$中的低各向异性、弱热涨落与高场超导性。Appl Phys Lett 94, 062511 (2009).[35] M. Bonura, E. Giannini, R. Viennois, and C. Senatore，$FeTe_{0.7}Se_{0.3}$中的峰值效应涡旋构型的温度与时间标度。物理评论B 85, 134532 (2012).[36] A. S. Sefat et al.，钴掺杂 BaFe2As2 单晶在 22 K 下的超导性。Phys Rev Let

t

101, 117004（2008）。[37] A. S. Sefat，铁基超导体的块体合成。固态材料当前观点 **17**, 59-64（2013）。[38] Q. Zou 等，表面形貌和磁性杂质对钴掺杂BaFe2As2超导体电子结构的影响。纳米快报 **17**, 1642-1647（2017）。

[39] F. Pedregosa 等，Scikit-learn：Python中的机器学习。机器学习研究杂志 **12**, 2825- 2830（2011）。[40] R. Prozorov 等，$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$欠掺杂单晶结构畴上的本征钉扎。物理评论B **80**, 174517（2009）。

补充信息：

通过机器学习驱动的发现揭示铁基超导体中的本征涡旋核心态

Yueming Guo[1*†]，Hu Miao[2†]，Qiang Zou[1,3†]，Mingming Fu[1,4], Athena S. Sefat[2], Andrew R. Lupini[1], Sergei V. Kalinin[1*]，Zheng Gai[1*]

[1]橡树岭国家实验室纳米相材料科学中心，美国田纳西州橡树岭，邮编 37830

[2]橡树岭国家实验室材料科学与技术部，美国田纳西州橡树岭，邮编 37830

[3]西弗吉尼亚大学物理与天文学系，美国西弗吉尼亚州摩根敦，邮编 26506

[4]物理系，OSED，福建省半导体材料与应用重点实验室，厦门大学，中国厦门 361005

样品生长、输运测量和化学分析

$Ba(Fe_{0.96}Ni_{0.04})_2As_2$ 单晶采用自助熔剂法生长 [36，37]。在 0 T 磁场下测得超导转变温度为 T_c = 18 K，转变宽度为 ΔTc < 0.5 K。较窄的转变宽度表明晶体质量良好，晶体的洁净度应与先前报道的相当。使用配备 X'Pert PRO MPD 衍射仪（Cu $K_{\alpha1}$ 辐射，λ=1.540598 Å）的粉末X射线衍射仪检查相纯度和结晶度。使用配备能量色散谱（EDS）的 Hitachi S3400 扫描电子显微镜（SEM），在 20 kV 下测定化学组成（Ni : Fe = 0.04 : 0.96）。

扫描隧道显微镜和光谱学

$Ba(Fe_{0.96}Ni_{0.04})_2As_2$ 晶体在 78开尔文的超高真空（UHV）中解理，随后立即原位转移至预冷至 4.2开尔文的 STM/S 探头。STM/S 实验在 4.2开尔文下进行，使用基压低于 2×10^{-10} 托[22, 38]的超高真空低温强磁场扫描隧道显微镜。铂铱针尖通过机械切割制备，并在洁净的 Au (111)表面上进行处理。测量前检查了 Au (111)表面的形貌、表面态和功函数。STM/S 实验使用 SPECS Nanonis控制系统进行。形貌图像在恒流模式下采集；采用锁相放大器进行电流成像隧道能谱（CITS），以 dV 为偏压调制幅度，在 973 Hz 下调制 0.1 至 1 mV。

主成分分析

主成分分析（PCA）可以降低数据集的维度，并在尽量减少信息损失的同时提高可解释性。在 PCA 中，数据的协方差矩阵被分解为特征向量（称为主成分或 PCs）的线性叠加，其对应的特征值（表示解释方差的比例）按降序排列。从数学上讲，

$$\boldsymbol{x}_i = \sum_{j=1}^{d} z_{ij}\boldsymbol{w}_j \quad (1),$$

$$\mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\boldsymbol{w}_j = \lambda_j\boldsymbol{w}_j \quad (2),$$

其中，$\boldsymbol{x_i}$ 是第 ith 个向量（在我们的例子中，向量指减去均值后的微分电导谱），$\boldsymbol{w_j}$ 是第 jth 个主成分，$\mathbf{X} = \{\boldsymbol{x_i}\}$，而 λ_i 是解释方差的比例。

我们使用 scikit-learn 中的相关模块，对涡旋核态进行了主成分分析（PCA）[39]。对于 4 T 下的涡旋核态（4 T 时涡旋区域内原始的微分电导），我们得到λ_1 =0.66、 λ_2 =0.165 和 λ_3 = 0.088（$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 91\%$），这表明涡旋核态中 91% 的变化可由前 3 个主成分解释。这 3 个主成分 $\boldsymbol{w_i}$ 是

计算得到并显示于图4a-c中；每个单个光谱的主成分权重 z_{ij} 则计算得到并显示于图4 d-f中。

在生成图2a中的能隙图时，我们还对0 T下的微分电导应用了主成分分析进行平滑处理，然后定位相干峰。

补充图

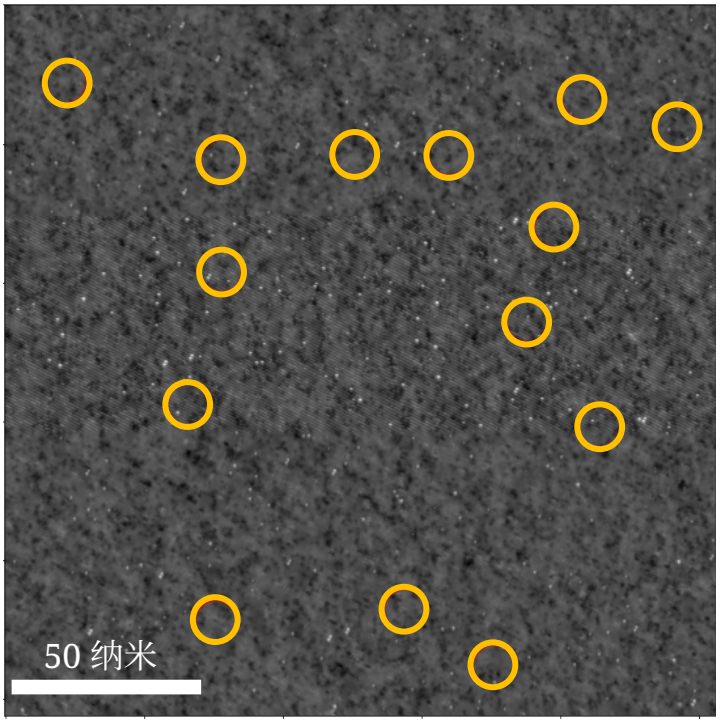
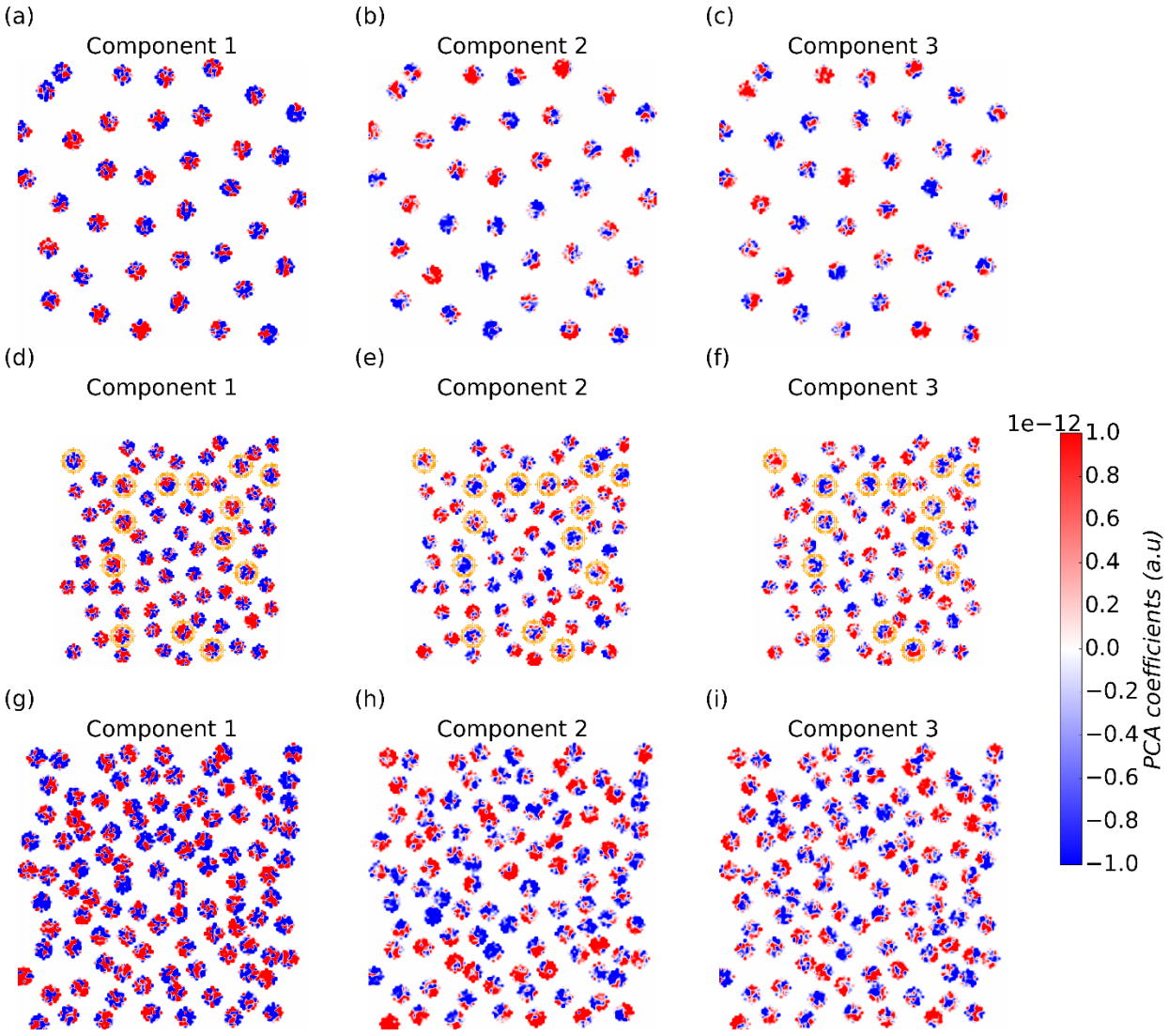


图 S1. 在形貌图像中标出了 14 个静止涡旋的位置。未发现涡旋位置与表面缺陷之间存在关联。



图S2. 磁场 B = 0 T 下 dI/dV 谱的主成分分析（PCA）。将来自不同位置的 0 T dI/dV 数据输入 PCA：分别取自 2 T（a-c）、4 T（d-f）和 6 T（g-i）下涡旋内部的区域。图中绘出了前三个主成分的权重。在（e）中，圆圈（标记静止涡旋）与第二主成分权重之间没有明显关联。这与图 4e中观察到的关联形成对比。

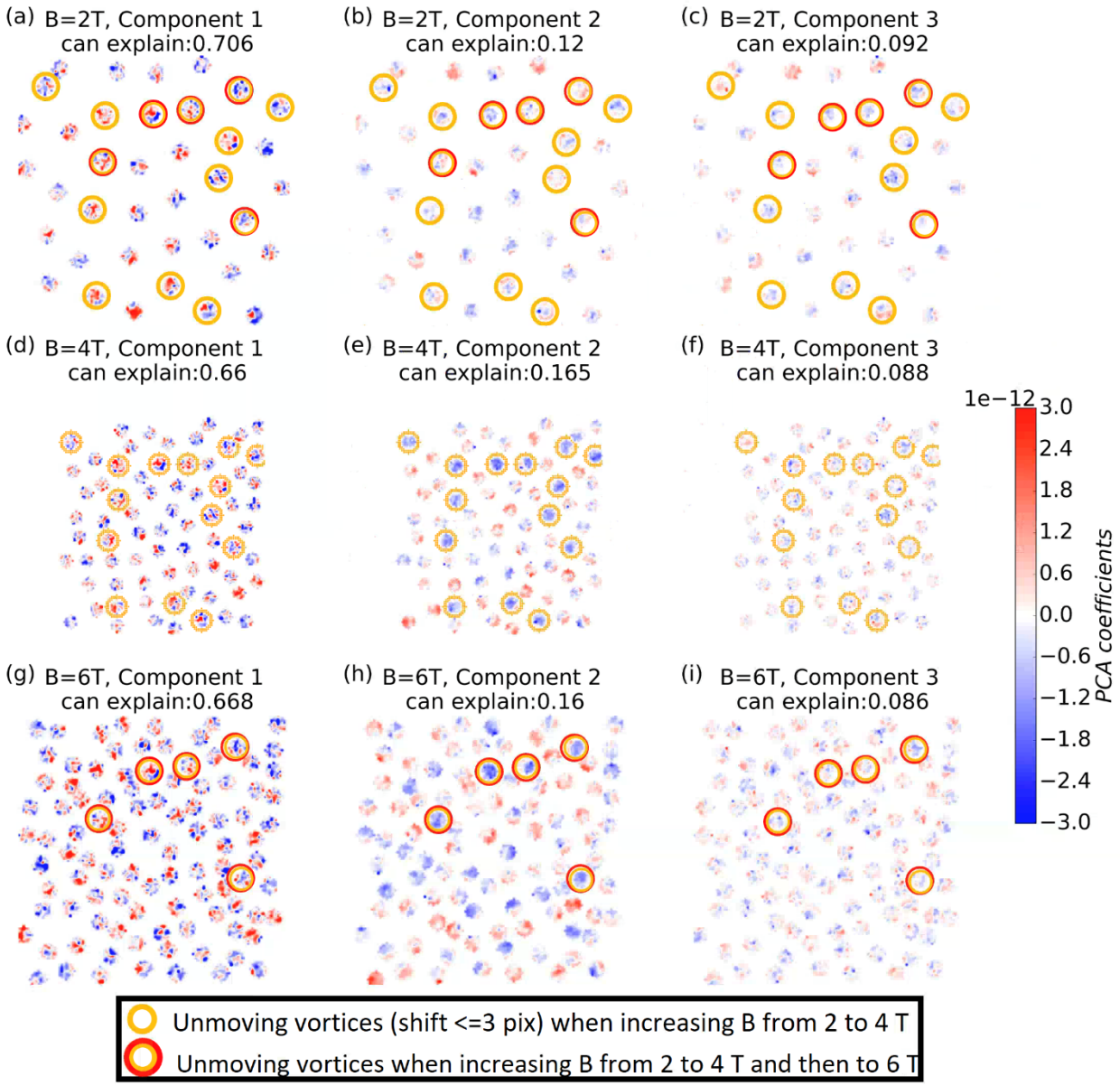


图 S3. 不同磁场下所有涡旋核态的主成分分析：(a-c) 2 T、(d-f) 4 T 和 (g-i) 6 T。图中展示了所有涡旋核态的主成分权重。主成分（曲线的特征向量基）与图 4a-c 中的相似。