



УДК 538.945

Статья

Спин-орбитальное взаимодействие в пятиорбитальной модели ферропниктидов

Д. А. Иванов^{1,*}, М. М. Коршунов^{1,2}

1 Сибирский федеральный университет, Свободный пр-т., 79, 660041, Красноярск, Российская Федерация

2 Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр Красноярский научный центр СО РАН, ул. Академгородок, 50, стр. 38, 660036, Красноярск, Российская Федерация

* e-mail: danik.aliw@gmail.com

Поступила в редакцию 07.12.2024, после переработки 10.12.2024, принята к публикации 25.12.2024.

Исследовано влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру и поверхность Ферми в пятиорбитальной модели сверхпроводников на основе железа. Так как в элементарной ячейке находятся два иона Fe и их орбитали опосредованно связаны через орбитали As, в эффективной модели введены константы внутри- и межзонного спин-орбитального взаимодействия, с целью исследования влияния соответствующих вкладов на зонную структуру. Показано, что внутризонная и межзонная части спин-орбитального взаимодействия приводят к изменению топологии поверхности Ферми – расщеплению четырех контуров Ферми вокруг точки $M = (\pi, \pi)$.

Ключевые слова: сверхпроводники на основе железа; спин-орбитальное взаимодействие; зонная структура; поверхность Ферми.

DOI: 10.62539/2949-5644-2024-0-4-12-18

1. Введение

В 2008 году был открыт новый класс сверхпроводящих слоистых соединений с высокими значениями критической температуры — слоистых соединений на основе железа и элементов V группы таблицы Менделеева, которые называют ферропниктидами [1, 2]. Они представляют собой системы с интригующей комбинацией различных состояний, куда также входят магнетизм, сверхпроводимость, нематическое состояние и некоторые сосуществующие состояния [3–5]. Многообразие экзотических фаз естественным образом является следствием многозонной природы этих систем [6].

Есть несколько экспериментальных результатов, указывающих на важную роль спин-орбитального взаимодействия в ферропниктидах. Одним из них является анизотропия спин-резонансного пика, нарушающая спин-вращательную инвариантность $\langle S_+ S_- \rangle = 2 \langle S_z S_z \rangle$, которая должна иметь место в отсутствие магнитного порядка. Это наблюдалось в неупругом рассеянии нейтронов [7]. Было показано, что нарушение спин-вращательной инвариантности в рамках трехорбитальной модели связано с эффектом спин-орбитального взаимодействия [8, 9]. Еще один результат связан с исследованиями сверхпроводящей щели с помощью многократных андреевских отражений [10, 11]. Ожидалось, что в LiFeAs присутствует две различные по амплитуде сверхпроводящие щели: одна на внутреннем листе поверхности Ферми вокруг точки Γ , другая – на внешнем листе поверхности Ферми вокруг точки Γ и, совпадающая с ней по величине, на поверхности Ферми вблизи точки M . Однако анализ андреевских спектров выявляет три различных щели [12, 13]. В добавок к этому, исследование сверхпроводящей щели осуществлялось методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР), в котором также наблюдались три различные щели в LiFeAs [14]. Это наблюдение может быть объяснено изменением топологии поверхности Ферми из-за спин-орбитального взаимодействия: два пересекающихся листа вблизи точки M могут разделяться на два — внутренний и внешний листы с различными величинами амплитуд щелей на каждом из них. К такому выво-

ду можно прийти, опираясь на экспериментальные работы, в которых исследовалось влияние спин-орбитального взаимодействия в пниктиде железа LiFeAs и халькогениде железа FeSe посредством фотоэмиссионной спектроскопии с круговой поляризацией и угловым разрешением [15, 16].

Поскольку влияние спин-орбитального взаимодействия на формирование поверхности Ферми и зонной структуры за рамками трехорбитальной модели [8, 9] исследовано недостаточно, цель данной работы — выяснить, к каким изменениям оно приводит в пятиорбитальной модели [17], часто используемой для описания сверхпроводимости в пниктидах железа [3, 6].

2. Пятиорбитальная модель ферропниктидов

Базовым элементом ферропниктидов является квадратная решетка ионов Fe. Над и под этой плоскостью располагаются ионы As, p -орбитали которых гибридизуются с d -орбиталями Fe. Можно записать эффективную модель, в которую будут входить только перенормированные перескоки между ионами железа. В общем виде гамильтониан пятиорбитальной модели ферропниктидов для d -орбиталей записывается в виде:

$$H_0 = \sum_{k\sigma lm} (\varepsilon_k^{lm} - \mu) d_{kl\sigma}^\dagger d_{km\sigma}, \quad (1)$$

где $d_{km\sigma}$ и $d_{kl\sigma}^\dagger$ — операторы уничтожения и рождения частиц с импульсом k , спином σ и орбитальными индексами l и m , μ — химпотенциал, рассчитываемый самосогласованно, ε_k^{lm} — параметры пятиорбитальной модели, включающие одноэлектронные энергии и интегралы перескока, функциональные зависимости от импульса и значения которых приведены в работе [17]. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия задается следующей формулой для одного атома Fe на ячейку [18]:

$$H_{SO} = \frac{\lambda}{2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{\lambda}{2} \left[\hat{S}_z \otimes \hat{L}_z + \frac{1}{2} (\hat{S}_+ \otimes \hat{L}_- + \hat{S}_- \otimes \hat{L}_+) \right], \quad (2)$$

где λ — константа спин-орбитального взаимодействия (физическая величина, имеющая размерность энергии и показывающая, насколько сильно взаимодействие между спином частицы и ее орбитальным движением), \mathbf{S} — оператор спина, который мы выражаем через матрицы Паули. Модель (1) — эффективная, она не включает p -орбитали мышьяка, а построена только на пяти d -орбиталях железа. Поэтому оператор орбитального углового момента \mathbf{L} представляет собой матрицу 5×5 , описывающую d -орбитали в некотором базисе. Проще всего выразить матрицу \mathbf{L} в атомном базисе, а затем преобразовать в базис d -орбиталей. Они выражаются через сферические гармоники Y_l^m следующим образом

$$d_{xz} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^1 - Y_2^{-1}), \quad d_{yz} = -\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_2^1 + Y_2^{-1}), \quad d_{x^2-y^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_2^2 + Y_2^{-2}),$$

$$d_{xy} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_2^2 - Y_2^{-2}), \quad d_{z^2} = Y_2^0.$$

Отсюда получаем преобразование из базиса Y_l^m в базис d -орбиталей, затем преобразуем матрицу \mathbf{L} в этот базис, вычисляем прямое произведение в (2) и получаем следующую запись матрицы гамильтониана спин-орбитального взаимодействия размерности 10×10 (две проекции спина на каждую из пяти орбиталей)

$$\widehat{H}_{SO} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & i & \sqrt{3} \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & -1 & -\sqrt{3}i \\ 0 & 0 & 0 & -2i & 0 & 1 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2i & 0 & 0 & -i & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3}i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & i & -\sqrt{3} & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 1 & -\sqrt{3}i & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2i & 0 \\ -i & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2i & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & \sqrt{3}i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Данная модель применима для железосодержащих сверхпроводников, относящихся к семейству типа 1111, например, LaOFeAs , а также типа 122, с родительским соединением BaFe_2As_2 . В соответствии с кристаллической структурой пниктидов железа, в элементарной ячейке присутствует два атома Fe, даже в семействе типа 1111. Связано это с положением атомов As, находящихся в вершинах тетраэдров, основания которых образованы атомами железа. Так, один из двух соседних атомов As расположен над плоскостью Fe, а другой — под ней. Неэквивалентность позиций двух близлежащих атомов мышьяка приводит к увеличению элементарной ячейки вдвое. В ней содержится два атома железа и два атома мышьяка [6, 19]. Для двух атомов Fe на элементарную ячейку размерность матрицы гамильтониана увеличивается вдвое. Для каждого из атомов, Fe_1 и Fe_2 , гамильтониан спин-орбитального взаимодействия дается формулой (3). Далее эту часть мы называем внутриионной. Однако, поскольку мы имеем дело с эффективной моделью где в явном виде не фигурируют p -орбитали As, но в реальном кристалле присутствует перекрытие орбиталей $\text{Fe}_1\text{-As-Fe}_2$, возможно возникновение «межионного» матричного элемента спин-орбитального взаимодействия [9]. Коль скоро эффективная модель записана в базисе d -орбиталей, гамильтониан «межионного» спин-орбитального взаимодействия будет иметь такой же вид, что и формула (3). Для удобства анализа вкладов внутриионного и «межионного» взаимодействий, константу взаимодействия в последнем случае мы обозначим λ' .

Полный гамильтониан, описывающий пятиорбитальную модель ферропниктида с учетом спин-орбитального взаимодействия, записывается в виде:

$$H = H_0 + H_{SO}.$$

3. Результаты для поверхности Ферми и зонной структуры

Поскольку эффективная модель описывает квадратную решетку ионов железа, мы имеем дело с квазидвумерной задачей, в квазиимпульсном пространстве характеризующейся координатами k_x и k_y . Листы поверхности Ферми, в свою очередь, представляют собой контуры на двумерной плоскости k_x и k_y .

Сначала рассмотрим влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру. На рис. 1а она представлена без учета спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = \lambda' = 0$). При рассмотрении только внутриионной части спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0$) видно, что вдоль направлений $\Gamma - X$, $X - M$ и $M - \Gamma$ возникло расщепление ранее вырожденных по спину зон, см. рис. 1б. При построении зонной структуры, показанной на рис. 1с,

учитывалась только межионная часть спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = 0, \lambda' = 100$ мэВ). Это привело к наиболее выраженному расщеплению зон в направлениях $X - M$ и $M - \Gamma$. Учет и внутриионной, и межионной составляющих ($\lambda = \lambda' = 100$ мэВ) приводит к зонной структуре, которая представляет собой объединение двух предыдущих вариантов, см. рис. 1d. Видно расщепление зон вдоль всех изображенных направлений.

Теперь перейдем к рассмотрению того, как спин-орбитальное взаимодействие влияет на поверхность Ферми. На рис. 2а она представлена без учета спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = \lambda' = 0$). Учет только внутриионной части спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0$) приводит к небольшому изменению объема центрального контура вокруг Γ -точки, а также к возникновению дополнительных контуров вокруг M и симметричных точек на поверхности Ферми, см. рис. 2b. Учет только межионной части спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = 0, \lambda' = 100$ мэВ) приводит к изменению топологии контуров поверхности Ферми вокруг точки M и симметричных ей точек — вместо совпадающих контуров поверхности Ферми в направлении $X - M$ мы получаем четыре отдельных контура, см. рис. 2c. Учет обеих составляющих спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = \lambda' = 100$ мэВ) приводит к поверхности Ферми, показанной на рис. 2d. Она представляет собой объединенный вариант двух предыдущих случаев, а потому на ней наблюдаются и изменение формы контуров вокруг Γ -точки, и возникновение дополнительных контуров вокруг точки M и симметричных ей точек на поверхности Ферми.

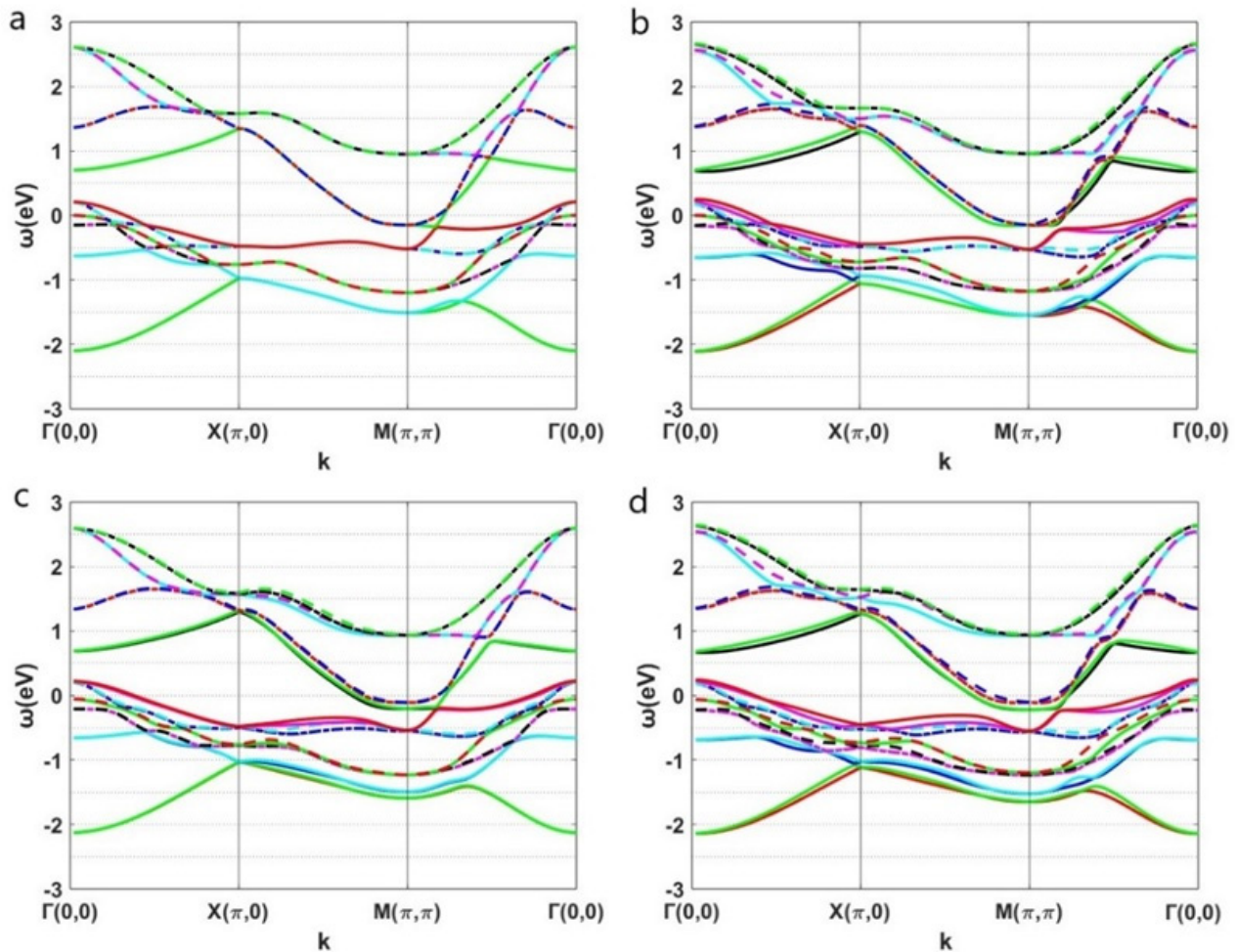


Рис. 1. Зонная структура, вычисленная в пятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: (а) $\lambda = \lambda' = 0, \mu = -0.029$ эВ; (б) $\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0, \mu = -0.0227$ эВ; (с) $\lambda = 0, \lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0069$ эВ; (д) $\lambda = \lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0129$ эВ.

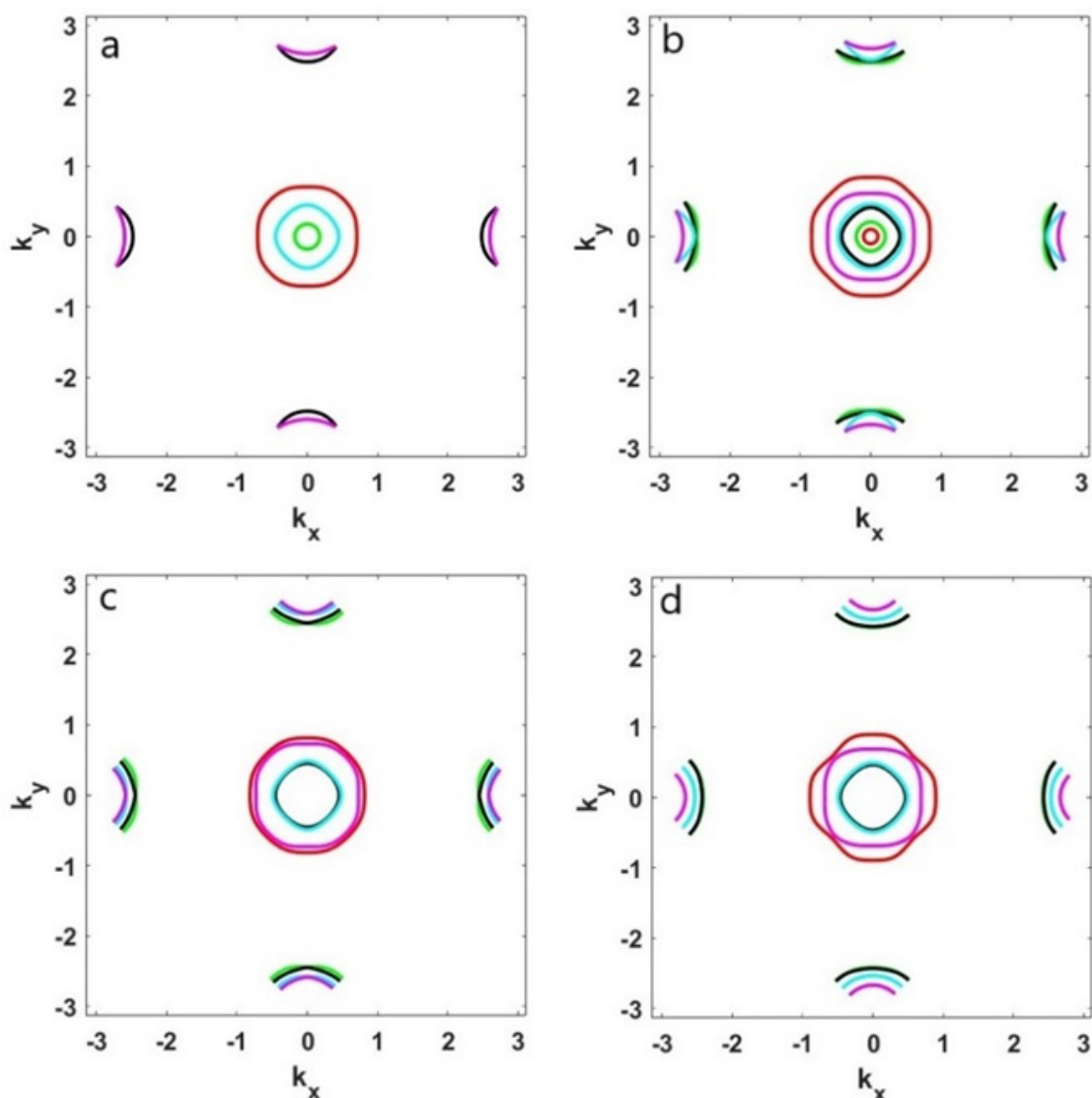


Рис. 2. Поверхность Ферми, полученная в пятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: (a) $\lambda = \lambda' = 0$, $\mu = -0.029$ эВ; (b) $\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0$, $\mu = -0.0227$ эВ; (c) $\lambda = 0$, $\lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0069$ эВ; (d) $\lambda = \lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0129$ эВ.

4. Выводы

В данной работе мы вводим константы внутри- и межзонного спин-орбитального взаимодействия λ и λ' , что позволяет разделить влияние соответствующих взаимодействий на зонную структуру и поверхность Ферми. Показано, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению ранее вырожденных зон вдоль направлений $\Gamma - X$, $X - M$ и $M - \Gamma$ и к изменениям топологии поверхности Ферми. Данные изменения окажут существенное влияние на структуру параметра порядка при построении теории сверхпроводимости поскольку, например, результаты спин-флуктуационной теории куперовского спаривания в ферропниктидах сильно зависят от формы и, особенно, топологии поверхности Ферми [18, 20].

Благодарности

Авторы выражают благодарность Д. М. Дзедзисашвили за полезные обсуждения. Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

Литература

[1] М.В. Садовский, УФН **178**, 1243 (2008). DOI: 10.3367/UFNr.0178.200812b.1243

- [2] Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев, УФН **178**, 1307 (2008). DOI: 10.3367/UFNr.0178.200812d.1307
- [3] P.J. Hirschfeld, *Comptes Rendus Physique* **17**, 197 (2016). DOI: 10.1016/j.crhy.2016.06.001
- [4] R.M. Fernandes, A.I. Coldea, H. Ding, I. R. Fisher, P. J. Hirschfeld, G. Kotliar, *Nature* **601**, 35 (2022). DOI: 10.1038/s41586-021-04073-2
- [5] J. Wang, Y. Wu, X. Zhou, Y. Li, B. Teng, P. Dong, J. He, Y. Zhang, Y. Ding, J. Li, *Advances in Physics: X* **6**, 1878931 (2021). DOI: 10.1080/23746149.2021.1878931
- [6] P.J. Hirschfeld, M.M. Korshunov, I.I. Mazin, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 124508 (2011). DOI: 10.1088/0034-4885/74/12/124508
- [7] O.J. Lipscombe, L. W. Harriger, P. G. Freeman, M. Enderle, C. Zhang, M. Wang, T. Egami, J. Hu, T. Xiang et al., *Phys. Rev. B* **82**, 064515 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.82.064515
- [8] M.M. Korshunov, Y.N. Togushova, I. Eremin, P.J. Hirschfeld, *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 2873 (2013). DOI: 10.1007/s10948-013-2212-6
- [9] D.A. Ivanov, Yu.N. Togushova, M.M. Korshunov, *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.* **16**, 795 (2023). EDN: RSIPYX
- [10] D. Daghero, M. Tortello, G.A. Ummarino, R.S. Gonnelli, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 124509 (2011). DOI: 10.1088/0034-4885/74/12/124509
- [11] Т.Е. Кузьмичёва, А.В. Муратов, С.А. Кузьмичёв, А.В. Садаков, Ю.А. Алещенко, В.А. Влащенко, В.П. Мартовицкий, К.С. Перваков, Ю.Ф. Ельцев, В.М. Пудалов, УФН **187**, 450 (2017). DOI: 10.3367/UFNr.2016.10.038002
- [12] Т.Е. Кузьмичева, С.А. Кузьмичёв, И.В. Морозов, С. Вурмель, Б. Бюхнер, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 388 (2020). DOI: 10.31857/S0370274X20060090
- [13] Т.Е. Кузьмичева, С.А. Кузьмичев, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 685 (2021). DOI: 10.31857/S1234567821220110
- [14] Y.S. Kushnirenko, D. V. Evtushinsky, T. K. Kim, I. Morozov, L. Harnagea, S. Wurmehl, S. Aswartham, B. Büchner, A. V. Chubukov et al., *Phys. Rev. B* **102**, 184502 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.184502
- [15] S.V. Borisenko, D. V. Evtushinsky, Z.-H. Liu, I. Morozov, R. Kappenberger, S. Wurmehl, B. Büchner, A. N. Yaresko, T. K. Kim, M. Hoesch, T. Wolf, N. D. Zhigadlo, *Nature Phys.* **12**, 311 (2016). DOI: 10.1038/nphys3594
- [16] R.P. Day, G. Levy, M. Michiardi, B. Zwartsenberg, M. Zonno, F. Ji, E. Razzoli, F. Boschini, S. Chi et al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 076401 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.076401
- [17] S. Graser, T.A. Maier, P.J. Hirschfeld, D.J. Scalapino, *New J. Phys.* **11**, 025016 (2009). DOI: 10.1088/1367-2630/11/2/025016
- [18] M.M. Korshunov, *Perturbation Theory: Advances in Research and Applications // Itinerant Spin Fluctuations in Iron-Based Superconductors / Ed. by Z. Pirogov. – New York: Nova Science Publishers, 2018.*
- [19] J. Paglione, R.L. Greene, *Nature Physics* **6**, 645 (2010). DOI: 10.1038/nphys1759
- [20] М.М. Коршунов, УФН **184**, 882 (2014). DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408h.0882

Spin-orbit Coupling in Five-Orbital Model for Iron Pnictides

D. A. Ivanov^{1,*}, M. M. Korshunov^{1,2}

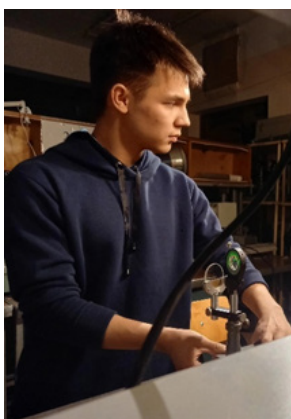
1 Siberian Federal University, Svobodny pr., 79, 660041, Krasnoyarsk, Russian Federation

2 Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center, Krasnoyarsk Scientific Center Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. Akademgorodok, 50, str. 38, 660036, Krasnoyarsk, Russian Federation

* e-mail: danik.aliw@gmail.com

The effect of spin-orbit coupling on the band structure and Fermi surface in the five-orbital model for iron-based superconductors is studied. Since there are two iron ions in the unit cell and their orbitals indirectly coupled through s orbitals, we introduce the constants of the intra- and inter-ion spin-orbit coupling in the effective model to separate the effect of the corresponding contributions on the band structure. We show that the intra- and inter-ion parts of the spin-orbit coupling lead to Fermi surface topology change – splitting of the four contours of the Fermi surface around the point $M = (\pi, \pi)$.

Keywords: Fe-based superconductors; spin-orbit coupling; band structure; Fermi surface.



Данил Алексеевич Иванов — студент Сибирского федерального университета

Danil Ivanov — Student of Siberian Federal University



Максим Михайлович Коршунов — д. ф.-м. н., чл.-корр. РАН, гл. н. с. Института физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КИЦ СО РАН

Maxim M. Korshunov — Prof., Dr. of Sci., Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, chief scientist of Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS