УДК 538.945

Статья

Спин-орбитальное взаимодействие в десятиорбитальной модели ферропниктидов

Д. А. Иванов[1,*], М. М. Коршунов[1,2]

1 Сибирский федеральный университет, Свободный просп. 79, 660041 Красноярск, Россия
2 Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр Красноярский научный центр СО РАН, ул. Академгородок, 50, стр. 38, 660036, Красноярск, Россия
* e-mail: danik.aliw@gmail.com

Поступила в редакцию 12.10.25, после переработки 19.10.25, принята к публикации 23.10.25.

Исследовано влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру и поверхность Ферми в десятиорбитальной модели ферропниктидов. Поскольку в элементарной ячейке находятся два иона железа, которые связаны через орбитали мышьяка, в эффективной модели введены константы, отвечающие за спин-орбитальное взаимодействие между ионами и внутри них, чтобы изучить, какое влияние эти вклады оказывают на зонную структуру. Показано, что внутриионная и межионная части спин-орбитального взаимодействия изменяют топологию поверхности Ферми, расщепляя четыре контура Ферми вокруг точки M = (π, π). При этом, такое изменение появляется даже при наличии только внутриионного спин-орбитального взаимодействия; наличие конечного эффективного межионного спин-орбитального взаимодействия для этого не требуется.

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

DOI: 10.62539/2949-5644-2025-8-3-72-81

1. Введение

Ферропниктидами называют слоистые соединения на основе железа и элементов V группы таблицы Менделеева. Это новый класс сверхпроводящих слоистых соединений с высокими значениями критической температуры, открытый в 2008 году [1, 2]. В этих системах реализуется комбинация таких состояний, как магнетизм, сверхпроводимость, нематическое состояние [3–5]. Многообразие экзотических фаз естественным образом является следствием многозонной природы этих систем [6].

Есть ряд экспериментов, которые указывают на значимость роли спин-орбитального взаимодействия в ферропниктидах. Так, например, в неупругом рассеянии нейтронов наблюдалась анизотропия спин-резонансного пика, нарушающая спин-вращательную инвариантность $\langle S_+S_-\rangle = 2\langle S_zS_z\rangle$, которая должна иметь место в отсутствие магнитного порядка [7]. Ранее было показано, что нарушение спин-вращательной инвариантности в рамках трехорбитальной модели вызвано эффектом спин-орбитального взаимодействия [8, 9]. Второй пример — при измерении сверхпроводящей щели посредством многократных андреевских отражений [10, 11] из анализа спектров в соединении LiFeAs выявлено три различные сверхпроводящие щели [12, 13], хотя ранее предполагалось, что имеется две щели с различными амплитудами: одна на внутреннем листе поверхности Ферми вокруг точки Г, другая — на внешнем листе поверхности Ферми вокруг точки Г и совпадающая с ней по величине на поверхности Ферми вблизи точки M [14]. Помимо этого, изучение сверхпроводящей щели проводилось методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением, в котором также наблюдались три различные щели в этом соединении [15]. Данное наблюдение может быть объяснено изменением топологии поверхности Ферми из-за спин-орбитального взаимодействия: два пересекающихся листа вблизи точки M могут разделяться на два непересекающихся — внутренний и

внешний листы с различными величинами амплитуд щелей на каждом из них.

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 десятиорбитальной модели [16, 17], и сравнить полученные данные с результатами для пятиорбитальной модели [18, 19], часто используемой для описания сверхпроводимости в пниктидах железа [3, 6].

2. Десятиорбитальная модель пниктидов железа

В общем виде гамильтониан десятиорбитальной модели ферропниктидов для *d*-орбиталей записывается как:

$$H_0 = \sum\nolimits_{\boldsymbol{k}\sigma lm} (\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{lm} - \mu) d_{\boldsymbol{k}l\sigma}^{\dagger} d_{\boldsymbol{k}m\sigma}, \tag{1}$$

где $d_{\boldsymbol{k}l\sigma}^{\dagger}$ и $d_{\boldsymbol{k}m\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов с импульсом $\boldsymbol{k}$, спином σ и орбитальными индексами l и m, μ — химпотенциал, $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{lm}$ — параметры десятиорбитальной модели, включающие одноэлектронные энергии и интегралы перескока, функциональные зависимости от импульса и значения которых приведены в работах [16, 17]. Химпотенциал рассчитывался самосогласованно для простейшего случая нулевого допирования, поскольку небольшое изменение допирования качественно картину зон и поверхности Ферми не меняет. Данную модель можно применять для сверхпроводников на основе железа, относящихся к семейству типа 1111, например, LaOFeAs; типа 122, примером которого служит $BaFe_2As_2$: и для 111, например, LiFeAs. Исходя из кристаллической структуры ферропниктидов, в элементарной ячейке имеется два иона железа, даже в семействах типа 1111 и 111. Это связано с положением атомов мышьяка, которые расположены в вершинах тетраэдров, основания которых образованы атомами железа. Получается, что один из двух близлежащих ионов мышьяка находится над плоскостью железа, а другой — под ней. Неэквивалентность позиций двух соседних ионов мышьяка приводит к увеличению элементарной ячейки вдвое, т. е. в ней содержится два иона мышьяка и два атома железа [6, 20].

Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия в общем виде задается следующей формулой для одного атома железа на ячейку [21]:

$$H_{SO} = \frac{\lambda}{2} \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S} = \frac{\lambda}{2} \left[\widehat{S_z} \otimes \widehat{L_z} + \frac{1}{2} (\widehat{S_+} \otimes \widehat{L_-} + \widehat{S_-} \otimes \widehat{L_+}) \right], \tag{2}$$

где λ — константа спин-орбитального взаимодействия, отражающая насколько сильнó взаимодействие между спином частицы и ее орбитальным движением, $\boldsymbol{S}$ — оператор спина, который мы выражаем через матрицы Паули. Модель (1) — эффективная, поскольку она не включает *p*-орбитали мышьяка, а построена только на десяти *d*-орбиталях железа — по пять от каждого иона железа, находящегося в кристаллографической элементарной ячейке. Оператор орбитального углового момента $\boldsymbol{L}$ для каждого иона железа является матрицей размерности 5 × 5, которая описывает *d*-орбитали в некотором базисе. Проще всего выразить матрицу $\boldsymbol{L}$ в атомном базисе, а затем преобразовать в базис *d*-орбиталей. Они выражаются через сферические гармоники Y_l^m следующим образом

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

$$d_{xy} = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(Y_2^2 - Y_2^{-2} \right), \quad d_{z^2} = Y_2^0. \tag{3}$$

В данной модели изначально учтено два иона Fe на элементарную ячейку с поряд-

ком орбиталей, несколько иным в сравнении с ранее рассмотренной пятиорбитальной моделью [19]. Для одного иона Fe порядок имеет вид $\left\{d_{xy}, d_{x^2-y^2}, d_{ixz}, d_{iyz}, d_{z^2}\right\}$, а для другого — $\left\{d_{xy}, d_{x^2-y^2}, d_{-ixz}, d_{-iyz}, d_{z^2}\right\}$.С учетом этого получаем преобразование из базиса Y_l^m в базис *d*-орбиталей, затем преобразуем матрицу $\boldsymbol{L}$ в этот базис, находим прямое произведение в (2) и получаем следующую запись матрицы гамильтониана спин-орбитального взаимодействия размерности 20 × 20

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\lambda}{2}\begin{pmatrix} H_{SO\uparrow\uparrow} & H_{SO\uparrow\downarrow} \\ H_{SO\downarrow\uparrow} & H_{SO\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \tag{4}$$

где каждый блок $H_{SO\sigma\sigma'}$ имеет размерность 10 × 10 и относится к различным комбинациям спинов σ и σ' двух электронов на *d*-орбиталях,

$$H_{SO\uparrow\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$H_{SO\uparrow\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2} \\ \frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

$$H_{SO\downarrow\uparrow}=\begin{pmatrix}
0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0\\
0 & 0 & \frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\
-\frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2}\\
\frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}\\
0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\
0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0\\
0 & 0 & \frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\
\frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2}\\
-\frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{i}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\
0 & 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0
\end{pmatrix}, \tag{7}$$

$$H_{SO\downarrow\downarrow}=\begin{pmatrix}
0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0\\
i & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0\\
0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0\\
i & 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0\\
0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}. \tag{8}$$

Полный гамильтониан десятиорбитальной модели ферропниктидов с учетом спин-орбитального взаимодействия имеет следующий вид

$$H = H_0 + H_{SO}. \tag{9}$$

Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия включает по пять орбиталей для каждого из ионов железа в кристаллографической элементарной ячейке, Fe_1 и Fe_2. Матричные элементы, соответствующие спин-орбитальному взаимодействию внутри одного иона, Fe_1–Fe_1 и Fe_2–Fe_2, мы будем называть внутриионными. Но так как мы работаем с эффективной моделью, где в явном виде не присутствуют *p*-орбитали As, хотя в реальном кристалле имеется перекрытие орбиталей Fe_1–As–Fe_2, возможно возникновение «межионных» матричных элементов спин-орбитального взаимодействия, Fe_1–Fe_2 и Fe_2–Fe_1. Для удобства анализа вкла-

дов внутриионного и «межионного» взаимодействий, константу взаимодействия в последнем случае мы обозначим λ'.

Величина констант спин-орбитального взаимодействия λ и λ' выбирается в дальнейшем равной 0 или 100 мэВ с целью демонстрации эффекта спин-орбитального взаимодействия.

3. Результаты для поверхности Ферми и зонной структуры

Так как эффективная модель описывает квадратную решетку ионов железа, мы имеем дело с квазидвумерной задачей, которая в квазиимпульсном пространстве определяется координатами k_x и k_y. Листы поверхности Ферми, в свою очередь, представляют собой контуры на двумерной плоскости k_x и k_y. В модели (1) мы в дальнейшем полагаем $k_z = 0$ [16].

Рассмотрим, какое влияние оказывает спин-орбитальное взаимодействия на зонную структуру. На рис. 1a она представлена без учета спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = \lambda' = 0$). Если рассматривать только внутриионную часть спин-орбитального взаимодействия (λ = 100 мэВ, $\lambda' = 0$), то происходит расщепление ранее вырожденных вдоль направления X − M зон, как показано на рис. 1b. При рассмотрении только межионной части спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = 0$, $\lambda' = 100$ мэВ) вдоль направления X − M также возникает расщепление зон, см. рис. 1c. Учет как внутриионной, так и межионной составляющих ($\lambda = \lambda' = 100$ мэВ) приводит к формированию зонной структуры, которая объединяет в себе два предыдущих варианта, как показано на рис. 1d. Хотя вдоль направлений Г – X и M – Г вырождение зон сохраняется, в точках Г, X и M вырождение снимается по сравнению со случаем $\lambda = \lambda' = 0$. Это приводит к изменению дисперсии вдоль всех направлений.

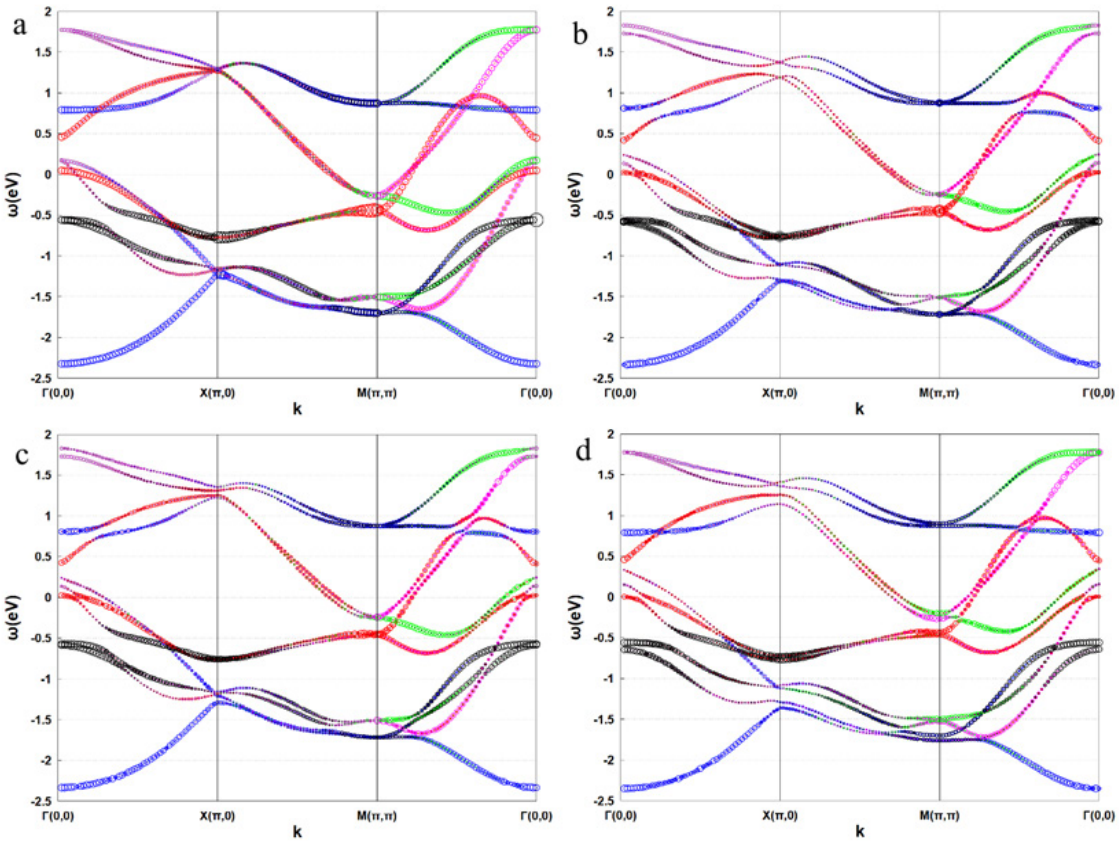


Рис. 1. Зонная структура десятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум ионам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: (a) $\lambda = \lambda' = 0$, $\mu = -0.0126$ эВ; (b) $\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0$, $\mu = -0.0059$ эВ; (c) $\lambda = 0$, $\lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0092$ эВ; (d) $\lambda = \lambda' = 100$ мэВ, $\mu = 0.0057$ эВ. Здесь кружками обозначен вклад орбиталей: размер пропорционален вкладу соответствующей орбитали в зону, а цветом показан вклад конкретной орбитали: d_{xy} — красный, $d_{x^2-y^2}$ — синий, $d_{ixz,-ixz}$ — зеленый, $d_{iyz,-iyz}$ — пурпурный, d_{z^2} — черный.

Перейдем к рассмотрению влияния спин-орбитального взаимодействия на поверхность Ферми. На рис. 2a она представлена без учета спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = \lambda' = 0$). При учете только внутриионной части спин-орбитального взаимодействия (λ = 100 мэВ, $\lambda' = 0$) можно увидеть небольшое изменение объема центрального контура вокруг Г-точки, а также расщепление контуров вокруг M и симметричных точек на поверхности Ферми, см. рис. 2b. При рассмотрении только межионной части спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = 0$, λ' = 100 мэВ) наблюдается более заметное расщепление контуров поверхности Ферми вокруг точки M и симметричных ей точек. В направлении X − M формируются два отдельных контура, как показано на рис. 2c. При учете обеих составляющих спин-орбитального взаимодействия ($\lambda = \lambda' = 100$ мэВ) получается поверхность Ферми, показанная на рис. 2d. Она является комбинацией двух предыдущих случаев, поэтому на ней можно наблюдать как изменение объема контуров вокруг Г-точки, так и расщепление контуров вокруг точки M и симметричных ей точек на поверхности Ферми.

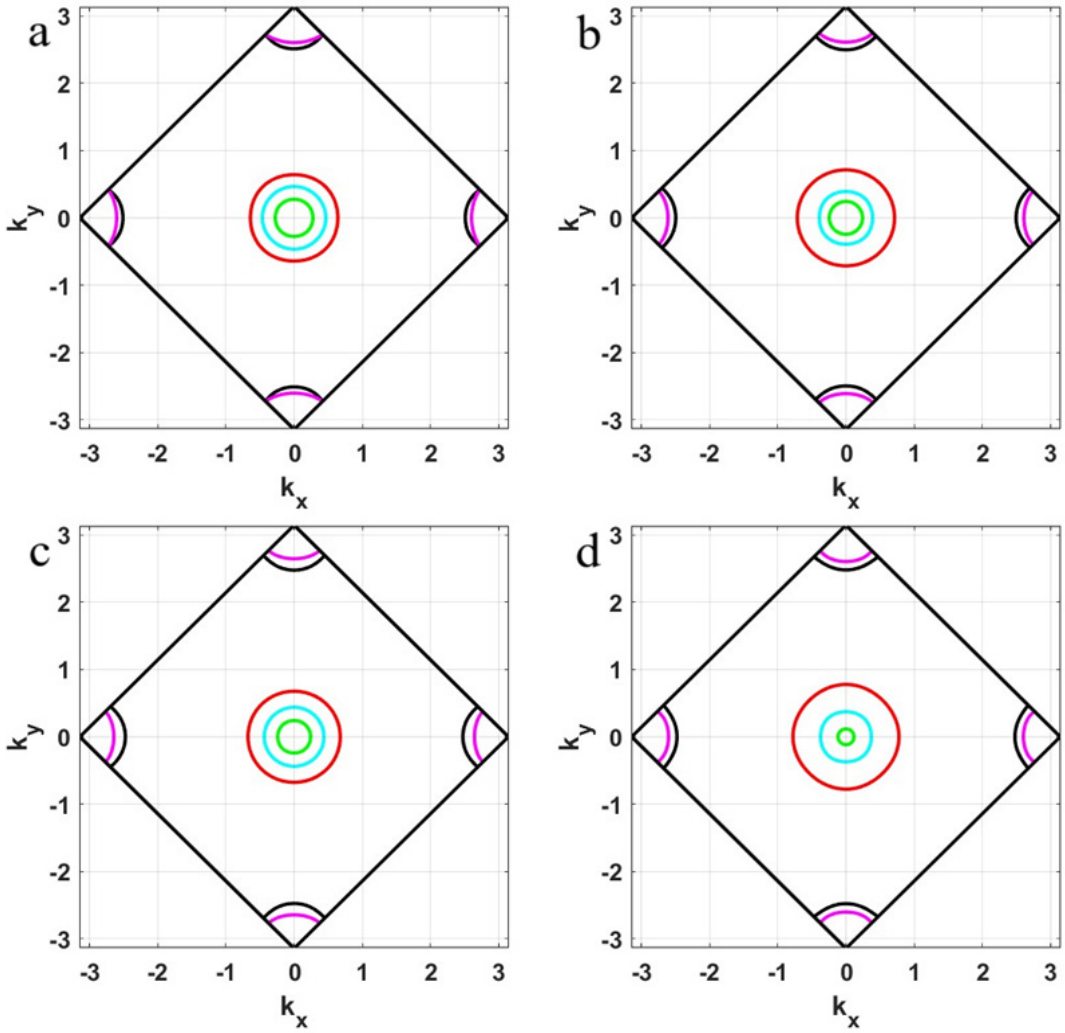


Рис. 2. Поверхность Ферми в десятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум ионам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: (a) $\lambda = \lambda' = 0$, $\mu = -0.0126$ эВ; (b) λ = 100 мэВ, $\lambda' = 0$, $\mu = -0.0059$ эВ; (c) $\lambda = 0$, λ' = 100 мэВ, $\mu = -0.0092$ эВ; (d) $\lambda = \lambda'$ = 100 мэВ, $\mu = 0.0057$ эВ.

4. Обсуждение

Сравним результаты, полученные для пяти- и десятиорбитальной моделей ферропниктидов. Сначала обсудим, как спин-орбитальное взаимодействие отразилось на зонной структуре. Влияние в каждой из моделей имеет схожий характер — расщепление зон. Отличия состоят в том, что

1) в случае десятиорбитальной модели это расщепление менее выражено по сравнению

с пятиорбитальной моделью [19], см. рис. 3,

2) а также в случае той же десятиорбитальной модели при учете как внутриионной, так и межионной компонент спин-орбитального взаимодействия происходит снятие вырождения в точках Г, X и M, чего в пятиорбитальной модели не наблюдается.

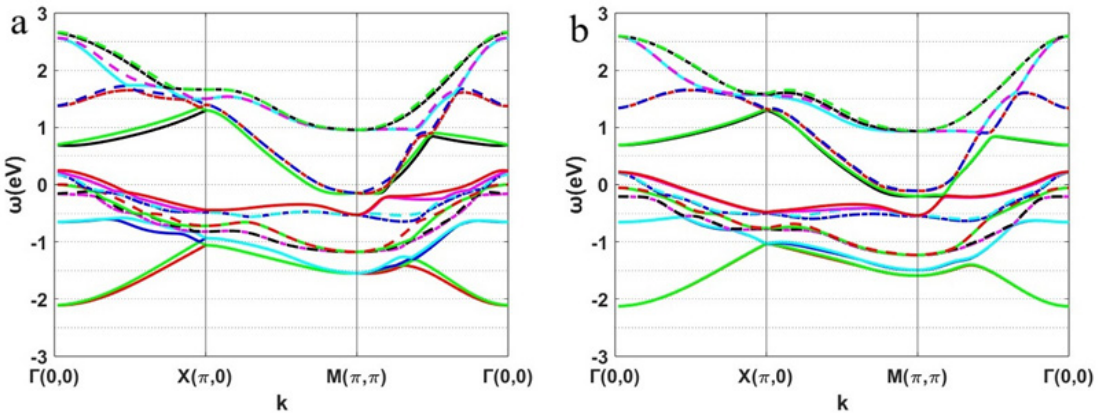


Рис. 3. Зонная структура пятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум ионам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: (a) $\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0$, $\mu = -0.0227$ эВ; (b) $\lambda = 0$, $\lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0069$ эВ.

Теперь обсудим результаты для ферми-поверхности. Заметное сходство обеих моделей состоит в том, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению контуров вокруг точки M и симметричных ей точек на поверхности Ферми. Однако, в пятиорбитальной модели, как и в трехорбитальной [9], для снятия вырождения контуров на границах зоны Бриллюэна требуется конечное значение межионного матричного элемента спин-орбитального взаимодействия, см. рис. 4. В десятиорбитальной модели аналогичный результат получается даже при отсутствии межионного матричного элемента, см. рис. 2b. Главным отличием моделей являются дополнительные контуры, возникающие только в пятиорбитальной модели вокруг Г-точки, а также вокруг точки M и симметричных ей точек. Кроме этого, к отличительным особенностям моделей можно отнести неизменность формы контура (круг) вокруг точки Г при различных вкладах спин-орбитального взаимодействия в случае десятиорбитальной модели, происходит лишь изменение его объема. В пятиорбитальной модели изменяется не только объем, но и форма контура вокруг точки Г, но все это имеет место только при конечной величине межионного взаимодействия, см. рис. 4 [19].

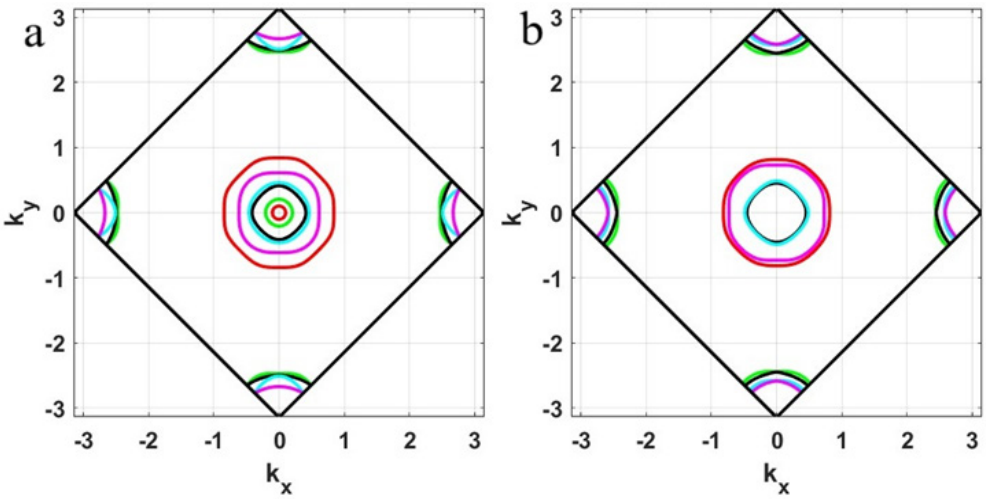


Рис. 4. Поверхность Ферми в пятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: (a) $\lambda = 100$ мэВ, $\lambda' = 0$, $\mu = -0.0227$ эВ; (b) $\lambda = 0$, $\lambda' = 100$ мэВ, $\mu = -0.0069$ эВ.

5. Выводы

В данной работе подобно тому, как это делалось в пятиорбитальной модели [19], мы вводим константы внутри- и межионного спин-орбитального взаимодействия λ и λ'. Это позволяет нам разделить влияние соответствующих вкладов на зонную структуру и ферми-поверхность. Мы показываем, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к небольшому расщеплению ранее вырожденных зон вдоль направления X − M, к снятию вырождения в точках Г, X и M при одновременном учете внутри- и межионной компонент этого взаимодействия и к изменениям топологии поверхности Ферми. Однако, изменение топологии поверхности Ферми вблизи точки M появляется даже при наличии только внутриионного спин-орбитального взаимодействия ($\lambda \neq 0$ и $\lambda' = 0$), что является существенным отличием от результатов для трех- и пятиорбитальной моделей, где аналогичный эффект возникает только при наличии эффективного межионного матричного элемента спин-орбитального взаимодействия.

Поскольку структура щели в спин-флуктуационной теории куперовского спаривания существенно зависят от формы и топологии поверхности Ферми [21, 22], изменения зонной структуры, вызванные спин-орбитальным взаимодействием, окажут значительное влияние на результаты теории сверхпроводящего состояния.

Благодарности

Авторы выражают благодарность Д. М. Дзебисашвили 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. Kotlia, 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. Власенко, 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] S.V. Borisenko, V.B. Zabolotnyy, A.A. Kordyuk, D.V. Evtushinsky, T.K. Kim, I.V. Morozov, R. Follath, B. Büchner, Symmetry **4**, 251 (2012). DOI: 10.3390/sym4010251
[15] 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
[16] H. Eschrig, K. Koepernik, Phys. Rev. B **80**, 104503 (2009). DOI: 10.1103/PhysRevB.80.104503
[17] S. Mukherjee, A. Kreisel, P. J. Hirschfeld, B. M. Andersen, et al., Phys. Rev. Lett. **115**, 026402 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.026402
[18] 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
[19] Д.А. Иванов, М.М. Коршунов, Сверхпроводимость: фундаментальные и прикладные исследования **4**, 12 (2024). DOI: 10.62539/2949-5644-2024-0-4-12-18
[20] J. Paglione, R.L. Greene, Nature Physics **6**, 645 (2010). DOI: 10.1038/nphys1759
[21] 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.
[22] М.М. Коршунов, УФН **184**, 882 (2014). DOI: 10.3367/UFNr.0184.201408h.0882

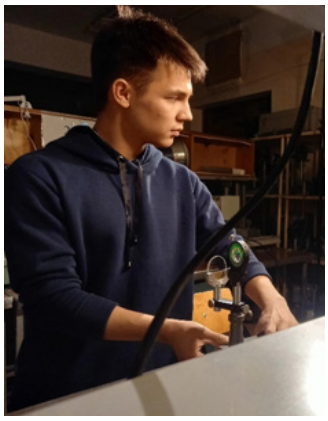
Spin-orbit Coupling in Ten-Orbital Model for Iron Pnictides

D. A. Ivanov[1,*], M. M. Korshunov[1,2]

1 Siberian Federal University, Svobodny pr., 79, 660041 Krasnoyarsk, Russia
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, Russia
* e-mail: danik.aliw@gmail.com

The effect of spin-orbit coupling on the band structure and Fermi surface in a ten-orbital model of iron pnictides is studied. Since there are two iron ions in the unit cell, which are connected through arsenic orbitals, constants responsible for the spin-orbit coupling between and within the ions are introduced in the effective model in order to study how these contributions affect the band structure. We show that the intra- and inter-ion parts of the spin-orbit coupling affect the topology of the Fermi surface by splitting four Fermi contours around the point M = (π, π). At the same time, such a change appears even if there is only an intra-ion spin-orbit coupling; the finite inter-ionic spin-orbit coupling is not required for that.

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. научн. сотр. Института физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ 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