

ВЛИЯНИЕ НЕМАТИЧНОСТИ НА СТРУКТУРУ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА И СПИНОВЫЙ ОТКЛИК В СОЕДИНЕНИЯХ ЖЕЛЕЗА

М. М. Коршунов ^{a*}, Ю. Н. Тогущова ^b

^a Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

^b Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 18 июля 2025 г.,
после переработки 20 июля 2026 г.
Принята к публикации 21 июля 2026 г.

Электронный нематический порядок, обнаруженный в пниктидах и халькогенидах железа, сопутствует сверхпроводящему состоянию. Мы моделируем нематический порядок как нестабильность Померанчука d -типа и описываем его в рамках теории среднего поля. Компоненты полученного нематического параметра порядка меняются скачком при увеличении коэффициента нематического взаимодействия — имеет место ряд фазовых переходов первого рода. Присутствуют четыре области, где различные орбитальные компоненты параметра порядка различаются. В двух областях, соответствующих физически разумным значениям коэффициента нематического взаимодействия, в рамках спин-флуктуационной теории спаривания получены сверхпроводящие решения, главное из которых имеет тип $s_{\pi\pm}$. Показано, что такое состояние более выгодно, чем возникающие в отсутствие нематичности состояния типов $s_{\pm}$ и $d_{x^2-y^2}$. В динамической спиновой восприимчивости для состояния $s_{\pi\pm}$ возникает спин-резонансный пик.

Ключевые слова: необычная сверхпроводимость, спин-флуктуационная теория сверхпроводимости, пниктиды железа, халькогениды железа, нематический порядок, динамическая спиновая восприимчивость, неупругое рассеяние нейтронов

DOI: 10.31857/S0044451026090022

1. ВВЕДЕНИЕ

Сосуществование квантовых состояний различной природы — отличительная черта сложных систем. Характерным примером таких состояний являются магнетизм и сверхпроводимость. В то время как в металлах они, как правило, конкурируют и основное состояние формируется либо одним, либо другим дальним порядком, в высокотемпературных сверхпроводниках на основе меди или железа присутствуют области сосуществования, где сверхпроводящее состояние формируется на фоне антиферромагнитного. В свою очередь, магнитное состояние может претворяться возникновением нематического состояния. Например, в тетрагональной фазе ферропниктидов была экспериментально обнаружена разница в сопротивлении вдоль взаимно

перпендикулярных направлений a и b в плоскости железа [1], что было подтверждено неоднократно, в частности, в опытах по поглощению микроволнового излучения [2]. Эта разница свидетельствует о нарушении симметрии решетки C_4 до C_2 и формировании электронного нематического порядка [3, 4]. Здесь слово «нематический» используется для того, чтобы подчеркнуть, что переход происходит именно в электронной подсистеме, что отличает его от привычного структурного фазового перехода, в котором ионы смещаются в новые равновесные позиции, а электронная подсистема следует за ними. Аналог — переход разупорядоченной системы спинов в изинговский нематический порядок при нарушении симметрии Z_2 , что отличает данный переход от перехода в магнитоупорядоченное состояние с нарушением симметрии $O(3)$ [3]. Наступающая в нематической фазе неэквивалентность в направлениях a и b приводит к различию в величине магнитного отклика во взаимноперпендикулярных направлениях в им-

* E-mail: mkor@iph.krasn.ru

пульсном пространстве, q_x и q_y . Если далее опускаться вниз по температуре, после перехода в нематическую фазу возникает переход в магнитную или сверхпроводящую фазу [5,6]. В сверхпроводящем состоянии экспериментально обнаружено понижение симметрии параметра порядка до C_2 , что согласуется с сосуществованием нематической и сверхпроводящей фаз [7]. Аналогичное поведение наблюдается в купратных сверхпроводниках, где все усложняется наличием псевдощелевой фазы и зарядовым порядком [8–11].

Пниктиды и халькогениды железа, в которых обнаружение нематичности послужило толчком к интенсивному изучению этого явления в различных сверхпроводниках, относятся к многозонным системам. Это означает, что состояния на уровне Ферми и поверхность Ферми формируются из вкладов от нескольких зон. Такая многозонность и многоорбитальность приводит к возникновению в них необычной сверхпроводимости с параметром порядка $s_{\pm}$ -типа, имеющим противоположные знаки на разных листах поверхности Ферми. Это состояние, однако, относится к A_{1g} -представлению и является вариантом расширенной s -симметрии [12,13]. Решение $s_{\pm}$ -типа естественным образом возникает в спин-флуктуационной теории куперовского спаривания [14]. В рамках этой теории можно объяснить многообразие экспериментальных данных по сверхпроводящему состоянию [15,16]. Подтверждение наличия $s_{\pm}$ -типа параметра порядка было получено из данных по спин-резонансному пику [17–19], наблюдаемому в неупругом рассеянии нейтронов [20–22], и из обнаружения спинового экситона, специфичного для состояния $s_{\pm}$, в спектрах андreeвского отражения [23].

В данной работе рассмотрена задача о формировании сверхпроводимости на фоне нематического параметра. Сначала получен параметр порядка нематической фазы симметрии B_{2g} , формирующейся как нестабильность Померанчука d -типа [24,25]. При увеличении коэффициента нематического взаимодействия V_{nem} от 0 до 5 эВ компоненты нематического параметра порядка четыре раза скачком изменяют свои значения, формируя четыре области. Таким образом, обнаружены три фазовых перехода первого рода между состояниями с различной топологией поверхности Ферми. При физически разумном значении $V_{nem} < 4$ эВ областей только две, что ранее было получено в работе [26]. Затем проанализировано влияние понижения симметрии от C_4 до C_2 на спиновую восприимчивость, которая вычислена в приближении хаотических фаз, и на решения

уравнения для сверхпроводящего параметра порядка в рамках спин-флуктуационной теории спаривания [13]. Анализ различных областей показал, что самая большая критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние будет соответствовать нематическому сверхпроводящему состоянию.

Поскольку напрямую выразить коэффициент нематического взаимодействия V_{nem} через наблюдаемые или контролируемые в эксперименте параметры системы не представляется возможным без построения теории возникновения нематического взаимодействия, напрямую связать полученные результаты по последовательности переходов и экспериментальные наблюдения мы не можем. Чтобы обойти эту проблему, мы исследовали влияние нематической фазы на динамическую спиновую восприимчивость, мнимая часть которой может быть сопоставлена с результатами экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов. Показано, что в мнимой части спинового отклика возникает спин-резонансный пик. Такой пик характерен для знакопеременного параметра порядка. Поскольку он возникает и в нематическом сверхпроводящем состоянии, можно утверждать, что нематическая фаза не приводит к подавлению или исчезновению этого пика. А так как пик экспериментально наблюдается в подавляющем большинстве соединений железа, нематическое сверхпроводящее состояние не противоречит этим наблюдениям.

2. МОДЕЛЬ

В качестве базовой модели возьмем гамильтониан пятиорбитальной модели соединений железа [27,28]:

$$H_{5-orb} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, l, l'} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{ll'} d_{\mathbf{k}\sigma l}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma l'}, \quad (1)$$

где $d_{\mathbf{k}\sigma l}^{\dagger}$ ($d_{\mathbf{k}\sigma l}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона с импульсом $\mathbf{k}$, спином σ и орбитальным индексом l , нумерующим учитываемые в модели d -орбитали железа: d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$, d_{xy} , $d_{3z^2-r^2}$. Диагональные элементы матрицы $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{ll'}$ — одноэлектронные энергии за вычетом химического потенциала, недиагональные элементы — интегралы перескока. Величины интегралов перескока и одноэлектронных энергий приведены в работе [28].

Нематическое состояние будем описывать, следуя подходу среднего поля из работ [24,25]. Гамиль-

тониан двухчастичного нематического взаимодействия имеет вид

$$H_{nem} = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma', l, l'} V_{ll'}^{nem} f_{kl} f_{k'l'} n_{\mathbf{k}\sigma l} n_{\mathbf{k}'\sigma' l'}, \quad (2)$$

где $n_{\mathbf{k}\sigma l} = d_{\mathbf{k}\sigma l}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma l}$ — оператор числа частиц, $V_{ll'}^{nem}$ — матричные элементы взаимодействия, f_{kl} — структурный фактор. Для моделирования нематического порядка симметрии B_{2g} как неустойчивости Померанчука d -типа в качестве структурного фактора принимаем

$$f_{kl} = \cos k_x - \cos k_y, \quad (3)$$

как и в работах [24, 25].

Теория среднего поля строится путем разделения оператора числа частиц $n_{\mathbf{k}\sigma l} = \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma l} + \delta n_{\mathbf{k}\sigma l}$ на среднее значение числа заполнения $\bar{n}_{\mathbf{k}\sigma l}$ и отклонение от среднего $\delta n_{\mathbf{k}\sigma l}$, которое считаем малой величиной. Подставляя это выражение в гамильтониан H_{nem} и пренебрегая вторым порядком малости по отклонению от среднего, получаем

$$H_{nem}^{MF} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma', l, l'} V_{ll'}^{nem} f_{kl} f_{k'l'} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma' l'} n_{\mathbf{k}\sigma l} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma', l, l'} V_{ll'}^{nem} f_{kl} f_{k'l'} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma' l'} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma l}. \quad (4)$$

Поскольку второе слагаемое здесь константа и приводит только к полному сдвигу энергии, мы его в дальнейшем не будем писать, а эффект от него уйдет в перенормировку химического потенциала. Оставшееся слагаемое запишем как

$$H_{nem}^{MF} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, l} \Phi_l f_{kl} n_{\mathbf{k}\sigma l}, \quad (5)$$

где введен параметр порядка нематической фазы

$$\Phi_l = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', \sigma', l'} V_{ll'}^{nem} f_{k'l'} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma' l'}. \quad (6)$$

Заметим, что, благодаря записи гамильтониана двухчастичного нематического взаимодействия H_{nem} в виде плотность–плотность, гамильтониан среднего поля H_{nem}^{MF} не содержит межорбитальных перескоков и описывает изменение плотности частиц на орбитали l' под влиянием взаимодействия $V_{ll'}^{nem}$ с учетом структурного фактора $f_{k'l'}$.

Матрицу $V_{ll'}^{nem}$ положим равной $\delta_{ll'} V_{nem}$ с коэффициентом взаимодействия V_{nem} . Поскольку последний не известен, в дальнейшем используем V_{nem} как параметр.

3. НЕМАТИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР ПОРЯДКА

Сначала мы решаем уравнение для нематического параметра порядка Φ_l , а уже потом будем искать куперовскую неустойчивость. Для решения самосогласованно вычисляем параметр порядка Φ_l из уравнения (6) и среднее $\bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma' l'}$. Вычисленная зависимость Φ_l от коэффициента V_{nem} для различных l показана на рис. 1. При малых значениях коэффициента V_{nem} нематическое состояние не возникает (область I). Выше некоторого значения V_{nem} параметр порядка становится конечным, притом только для одной из орбиталей — d_{xy} (область II). Затем «подключаются» орбитали $d_{x^2-y^2}$ и $d_{3z^2-r^2}$ (область III). Лишь при дальнейшем увеличении V_{nem} все компоненты нематического параметра порядка становятся отличными от нуля (область IV).

Поверхности Ферми во всех четырех областях показаны на рис. 2. В области II ($V_{nem} = 2.64, 2.7, 2.8$ эВ) очевидно нарушение симметрии C_4 , имевшей место в области I ($V_{nem} = 0$ на рис. 2). Это видно и в дисперсии вдоль направления $(\pi, 0) - (0, \pi)$ на рис. 3.

В областях III ($V_{nem} = 4.5$ эВ) и IV ($V_{nem} = 4.6$ эВ) деформация поверхности Ферми уже существенная, равно как и изменение орбитальных вкладов в зоны, формирующие ее. Учитывая, что величина 4.5 эВ для коэффициента взаимодействия велика даже по сравнению с хаббардовским отталкиванием, области III и IV вряд ли достижимы, и рассматривать их в рамках теории среднего поля нефизично. Поэтому в дальнейшем мы ограничимся областями I и II.

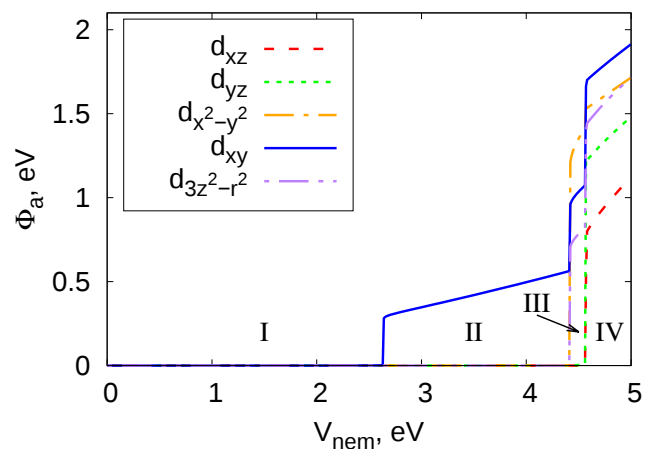


Рис. 1. Зависимость нематического параметра порядка Φ_a для орбитали a от коэффициента взаимодействия V_{nem} . Области, где параметр порядка ведет себя существенно по-разному, обозначены римскими цифрами

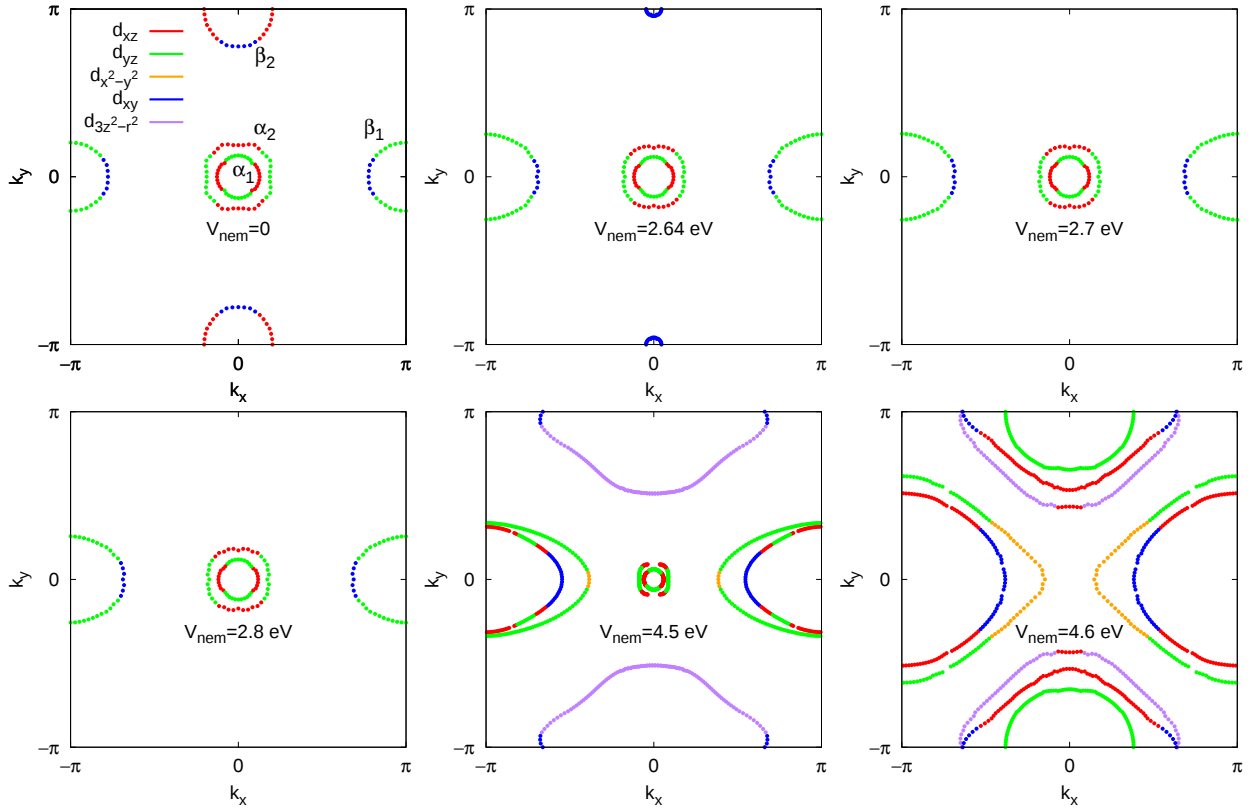


Рис. 2. Поверхность Ферми при различных значениях коэффициента взаимодействия V_{nem} . Листы поверхности Ферми обозначены $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$. Различными цветами показаны области, где максимален вклад от соответствующей орбитали

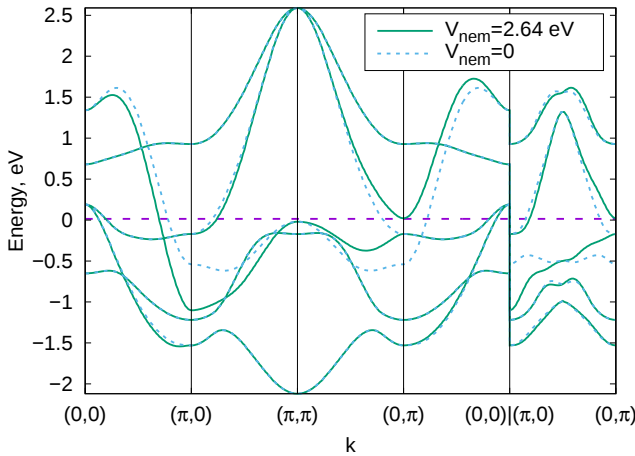


Рис. 3. Дисперсия вдоль основных направлений зоны Бриллюэна для двух значений параметра взаимодействия V_{nem} . Отсчет энергии ведется от химического потенциала

Изменение параметра порядка скачком свидетельствует о фазовом переходе первого рода. Это согласуется с ранее полученными результатами о том, что в теории среднего поля при низких температурах в некоторой области параметров температура–

химический потенциал возникает переход именно первого рода [24, 29, 30]. Переход второго рода имеет место при высоких температурах. Поскольку нас интересует сверхпроводящее состояние, здесь мы ограничимся низкими температурами.

4. СВЕРХПРОВОДЯЩЕЕ СОСТОЯНИЕ

Спин-флуктуационная теория сверхпроводящего спаривания строится на основе лестничного приближения для куперовской вершины $\tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ [13, 31], где μ и ν – зонные индексы. Ряд строится по одноузельному кулоновскому взаимодействию – внутри-орбитальному хаббардовскому U , межорбитальному U' , хундовскому обмену J и парному перескоку J' , входящему в гамильтониан H_{int} [32, 33]:

$$\begin{aligned}
 H_{int} = & U \sum_{f,m} n_{fm\uparrow} n_{fm\downarrow} + U' \sum_{f,m<l} n_{fl} n_{fm} + \\
 & + J \sum_{f,m<l} \sum_{\sigma,\sigma'} d_{fl\sigma}^\dagger d_{fm\sigma}^\dagger d_{fl\sigma'} d_{fm\sigma'} + \\
 & + J' \sum_{f,m \neq l} d_{fl\uparrow}^\dagger d_{fl\downarrow}^\dagger d_{fm\downarrow} d_{fm\uparrow}, \quad (7)
 \end{aligned}$$

где $n_{fm} = n_{fm\uparrow} + n_{fm\downarrow}$, $n_{fm\sigma} = d_{fm\sigma}^\dagger d_{fm\sigma}$ — оператор числа частиц на узле f .

Куперовская вершина $\tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ зависит от куперовских параметров и от действительной части спиновой восприимчивости на нулевой частоте, $\text{Re}\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$ [13]. Спиновая восприимчивость вычисляется как спин-спиновый коррелятор

$$\chi^{ll'mm'}(\mathbf{q}, \Omega) = \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega\tau} \langle T_\tau S_{ll'}^+(\mathbf{q}, \tau) S_{ll'}^-(\mathbf{q}, 0) \rangle, \quad (8)$$

где Ω — мацубаровская частота, $\beta = 1/T$ — обратная температура, T_τ — оператор упорядочения по мацубаровскому времени τ , S^+ и S^- — спиновые операторы. Усреднение проводится по ансамблю со взаимодействием H_{int} . В нулевом приближении имеем

$$\chi_{(0)}^{ll'mm'}(\mathbf{q}, \Omega) = -T \sum_{\mathbf{p}, \omega_n, \mu, \nu} \left[\varphi_{\mathbf{p}m}^\mu \varphi_{\mathbf{p}l}^{*\mu} G_{m\uparrow}(\mathbf{p}, \omega_n) \times \right. \\ \left. \times G_{\nu\downarrow}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \Omega + \omega_n) \varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}l'}^\nu \varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}m'}^{*\nu} \right]. \quad (9)$$

Здесь ω_n — мацубаровская частота, $\varphi_{\mathbf{k}m}^\mu$ — коэффициенты перехода между орбитальным (m) и зонным (μ) представлениями такие, что $d_{\mathbf{k}m\sigma} = \sum_\mu \varphi_{\mathbf{k}m}^\mu b_{\mathbf{k}\mu\sigma}$.

Здесь $b_{\mathbf{k}\mu\sigma}$ — оператор уничтожения электрона в зонном представлении, в котором функция Грина диагональна, $G_{\mu\sigma}(\mathbf{k}, \omega_n) = 1/(i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}\mu\sigma})$.

Схема расчетов следующая. Сначала мы вычисляем $\chi_{(0)}^{ll'mm'}(\mathbf{q}, \Omega)$ с гамильтонианом $H_0 = H_{5-orb} + H_{nem}^{MF}$. Затем, в рамках приближения хаотических фаз (random phase approximation, RPA) получаем

$$\chi(\mathbf{q}, \Omega) = \sum_{l,m} \chi^{llmm}(\mathbf{q}, \Omega).$$

Матрица спиновой восприимчивости в приближении RPA, соответствующем сумме лестничных диаграмм, включающих электрон-дырочную петлю в матричном виде $\hat{\chi}_{(0)}(\mathbf{q}, \Omega)$, равна [13]

$$\hat{\chi}(\mathbf{q}, \Omega) = \left[\hat{I} - \hat{U}_s \hat{\chi}_{(0)}(\mathbf{q}, \Omega) \right]^{-1} \hat{\chi}_{(0)}(\mathbf{q}, \Omega), \quad (10)$$

где $\hat{I}$ — единичная матрица, а $\hat{U}_s$ — матрица взаимодействия в орбитальном представлении, в явном виде записанная в работе [28]. В дальнейшем будут приведены результаты для физической восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \Omega)$, аналитически продолженной на ось действительных частот ω ($i\Omega \rightarrow \omega + i\delta$, $\delta \rightarrow 0+$).

Для оценки влияния параметров взаимодействия, входящих в H_{int} , на сверхпроводящее

состояние мы выполнили расчеты для ряда их значений. Предположение, что присутствует спин-вращательная инвариантность, фиксирует два из четырех параметров хаббардовского взаимодействия условиями $U' = U - 2J$ и $J' = J$. Оставшиеся два параметра, U и J , будем варьировать. Исходя из оценки разумных значений [34] и из условия отсутствия магнитной неустойчивости, проявляющейся в расходимости спиновой восприимчивости, мы выбрали приведенные ниже наборы параметров (значения в электронвольтах):

#	1	2	3	4	5	6	7	8
U	1	1.1	1	1.2	1.1	1.2	1	1.3
J	0	0	0.1	0	0.1	0.1	0.2	0
#	9	10	11	12	13	14	15	16
U	1.1	1.3	1.4	1.2	1.4	1	1.4	1.3
J	0.2	0.1	0	0.2	0.1	0.3	0.15	0.2

Нарушение симметрии зонной структуры и поверхности Ферми приводит к понижению симметрии C_4 до C_2 в зависимости спиновой восприимчивости от волнового вектора $\mathbf{q}$. Это видно на рис. 4, где приводится действительная часть восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$ для набора параметров #16 ($U = 1.3$, $J = 0.2$). Увеличение коэффициента V_{nem} приводит к увеличению параметра порядка Φ_l , что влечет возрастание пика вблизи точки $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ по сравнению с точкой $\mathbf{q} = (0, \pi)$. Связано это с тем, что листы поверхности Ферми вблизи точек $(0, \pm\pi)$ становятся меньше листов вблизи точек $(\pm\pi, 0)$, что приводит к превалированию рассеяния между зонами, формирующими листы $\alpha_{1,2}$, и зонами, формирующими

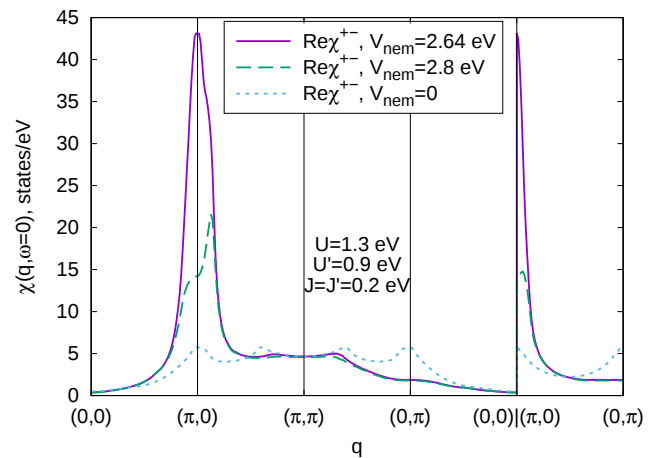


Рис. 4. Действительная часть спиновой восприимчивости в приближении RPA на нулевой частоте как функция волнового вектора $\mathbf{q}$ для трех значений коэффициента взаимодействия V_{nem}

листы β_1 , по сравнению с листами β_2 , см. рис. 2. Заметим, что при $V_{nem} = 2.64$ эВ пик вблизи $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ больше, чем при $V_{nem} = 2.8$ эВ. Обусловлено это, очевидно, тем, что в первом случае вектор рассеяния ближе к соизмеримому вектору нестинга, чем во втором. Во втором случае максимум рассеяния переходит на несоизмеримый волновой вектор.

Для описания сверхпроводящего состояния на фоне нематической фазы мы из вычисленной восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \Omega)$ получаем куперовскую вершину $\tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Имея ее, ищем решение линеаризованного уравнения для параметра порядка $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 g_{\mathbf{k}}$, записанного как уравнение для собственных значений λ и собственных векторов $g_{\mathbf{k}}$ [13, 28, 31, 35, 36]:

$$\lambda g_{\mathbf{k}} = - \sum_{\nu} \oint \frac{d\mathbf{k}'_{\parallel}}{2\pi} \frac{1}{2\pi v_{F\mathbf{k}'}} \tilde{\Gamma}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') g_{\mathbf{k}'}, \quad (11)$$

где $v_{F\mathbf{k}'}$ — скорость Ферми. Контурный интеграл берется по параллельной ν -му листу поверхности Ферми компоненте импульса $\mathbf{k}'_{\parallel}$, а зонный индекс μ однозначно определяется положением вектора $\mathbf{k}$. В результате решения имеем набор λ и соответствующих им $g_{\mathbf{k}}$. Положительные λ соответствуют притяжению в канале частица-частица. Максимальное из них определяет состояние с максимальной критической температурой T_c , т.е. наиболее выгодное сверхпроводящее состояние с импульсной зависимостью, определяемой соответствующим собственным вектором $g_{\mathbf{k}}$. По сути, λ — это эффективная константа связи, определяющая $T_c \propto e^{-1/\lambda}$.

Для набора хаббардовских параметров #16 ($U=1.3$, $J=0.2$) на рис. 5–7 показаны по три решения уравнения (11) с максимальными значениями λ в трех различных случаях: отсутствие нематичности ($V_{nem}=0$, область I) на рис. 5; переход в нематическую фазу только совершен, и остались небольшие участки листов β_2 поверхности Ферми ($V_{nem}=2.64$, область II) на рис. 6; «глубоко» в нематической фазе, где не осталось листов β_2 поверхности Ферми ($V_{nem}=2.8$, область II) на рис. 7.

В области I для данного набора кулоновских параметров конкурируют решения $d_{x^2-y^2}$ - и $s_{\pm}$ -типов, но выигрывает решение $d_{x^2-y^2}$ -типа с большим значением λ . Третье по величине λ решение соответствует d_{xy} -типу симметрии. В области II — нематической фазе — большее значение λ имеет состояние $s_{\pi\pm}$ [26], см. рис. 6 и 7. Состояние с меньшим значением λ на этих рисунках мы назовем состоянием $d_{\pi xy}$ -типа, поскольку оно аналогично состоянию d_{xy} в случае тетрагональной симметрии,

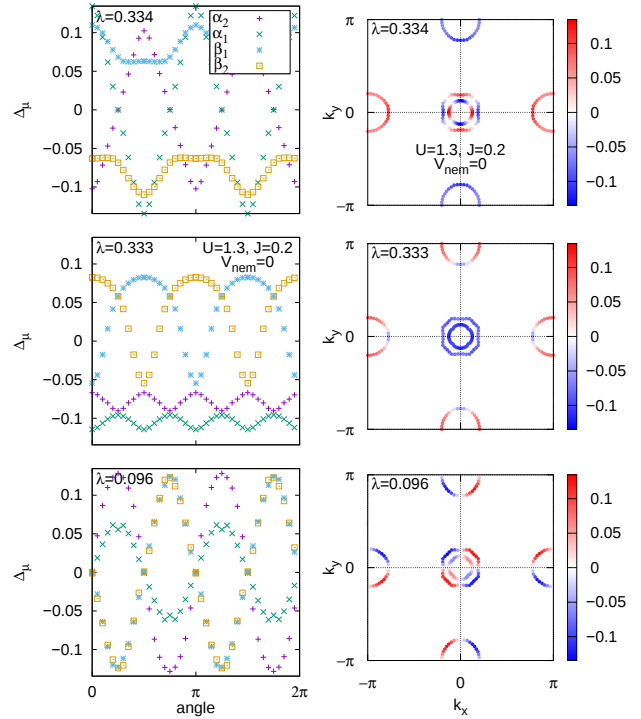


Рис. 5. Параметр порядка при $U = 1.3$, $J = 0.2$ и $V_{nem} = 0$ для трех наибольших собственных значений λ на листах поверхности Ферми ($\alpha_{1,2}$, $\beta_{1,2}$). Слева — угловая зависимость на каждом листе; справа — величина параметра порядка показана интенсивностью в пределах зоны Бриллюэна. Все значения приведены в электронвольтах

см. рис. 5. Соответствующие этим состояниям щели $\Delta_{\mathbf{k}}$ инвариантны относительно поворота на π , что и должно быть для присущей нематической фазе симметрии C_2 .

На рис. 6, а особенно на угловых зависимостях щелей, видно, что на листах β_2 поверхности Ферми щель очень мала. Из-за этого качественной разницы между результатами на рис. 6 и 7 нет, хотя наличие малых листов β_2 приводит к небольшому увеличению λ .

Для различных наборов параметров одноузельного кулоновского взаимодействия при $V_{nem} = 0$, $V_{nem} = 2.64$ эВ и $V_{nem} = 2.8$ эВ иерархия сверхпроводящих решений различается. Сводный график значений λ приведен на рис. 8. Разные линии соответствуют различным получающимся в расчете структурам параметра порядка. Видно, что в отсутствие нематичности $s_{\pm}$ -тип конкурирует с $d_{x^2-y^2}$ -типом, а именно, для некоторых значений параметров одноузельного кулоновского взаимодействия значение λ больше для $s_{\pm}$ -типа, а для некоторых — для $d_{x^2-y^2}$ -типа. В нематической же фазе значе-

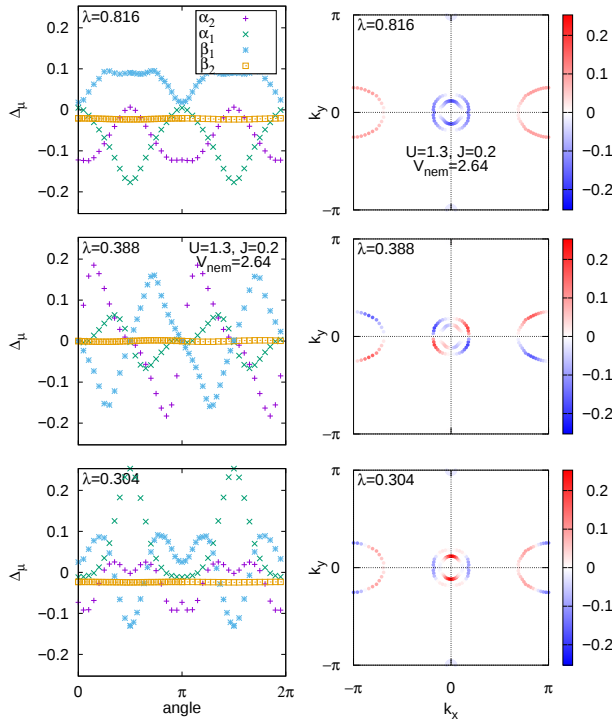


Рис. 6. То же, что на рис. 5, но для $V_{nem} = 2.64$ эВ

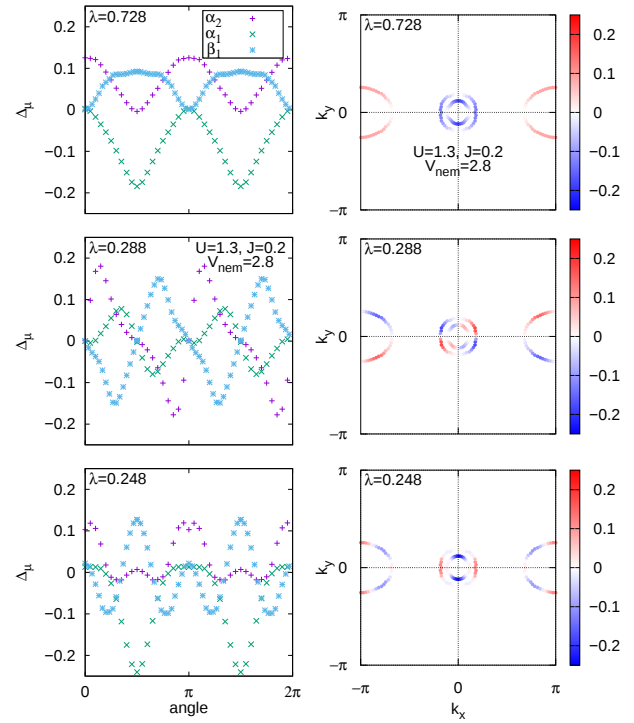


Рис. 7. То же, что на рис. 5, но для $V_{nem} = 2.8$ эВ

ние λ для $s_{\pi\pm}$ -состояния всегда больше, чем для $d_{\pi xy}$ -состояния. Также отметим, что для $s_{\pi\pm}$ -типа значение λ всегда больше, чем для решений $s_{\pm}$ - и $d_{x^2-y^2}$ -типов. Поскольку температура T_c определяется значением эффективной константы связи λ , то для сверхпроводящего состояния, возникающего на фоне нематичности, T_c будет больше, чем для чистого сверхпроводящего состояния.

5. СПИНОВЫЙ ОТКЛИК

Возникновение спинового экситона в сверхпроводящем состоянии является характерной чертой знакопеременного параметра порядка, и его проявление в виде спин-резонансного пика для состояния $s_{\pm}$ было получено на заре теоретического исследования ферропниктидов [17, 18]. Поскольку спин-резонансный пик является измеримой величиной (его можно обнаружить в неупругом рассеянии нейтронов), далее мы рассмотрим спиновый отклик в трех сверхпроводящих состояниях, обсуждаемых в данной работе: в сверхпроводящем состоянии с параметром порядка $d_{x^2-y^2}$ -типа и в нематическом сверхпроводящем состоянии со щелью $s_{\pi\pm}$ -типа для двух различных значений коэффициента нематиче-

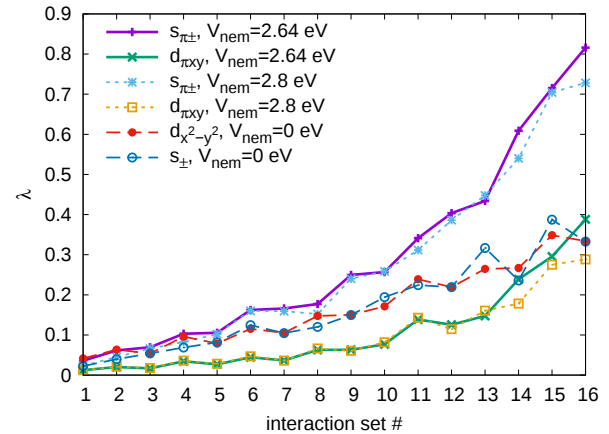


Рис. 8. Максимальные собственные значения λ для трех значений параметра нематического взаимодействия V_{nem} при различных наборах кулоновских параметров

ского взаимодействия V_{nem} . Следуя подходу работ [13, 19], мы вычисляем частотную зависимость поперечной компоненты динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ в приближении RPA в сверхпроводящем состоянии с параметром порядка, параметризованным так, чтобы воспроизводилась угловая зависимость, полученная нами ранее.

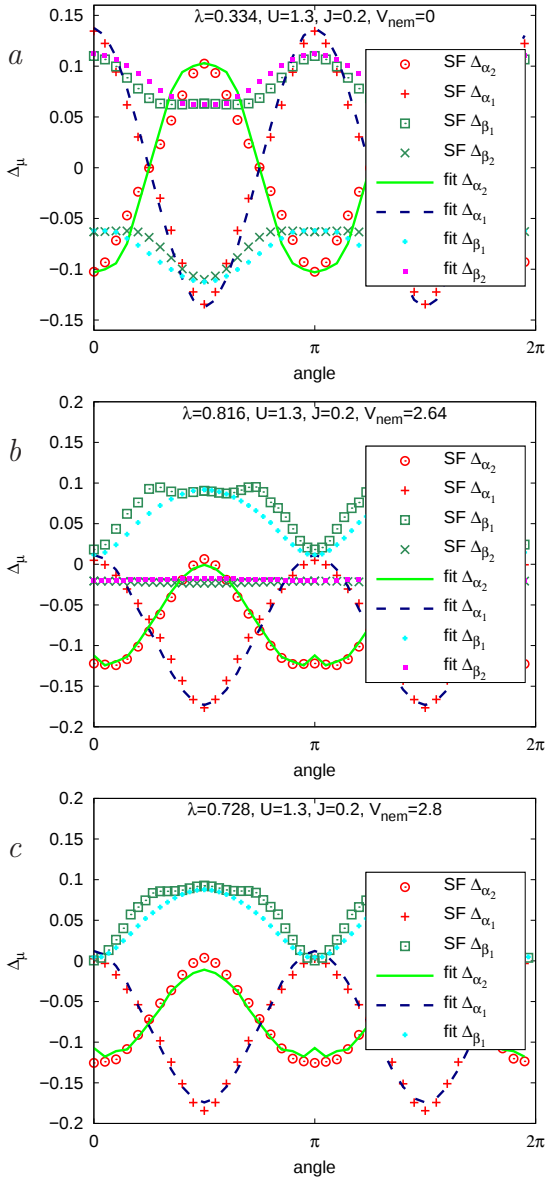


Рис. 9. Сравнение угловых зависимостей щелей, полученных из спин-флуктуационной теории спаривания (SF) и аналитических зависимостей с подобранными параметрами (fit). Показаны состояния типа $d_{x^2-y^2}$ для случая $V_{nem} = 0$ (a) и $s_{\pi\pm}$ для $V_{nem} = 2.64$ эВ (b) и 2.8 эВ (c)

Параметр порядка B_{1g} -типа параметризуем как

$$\Delta_{k\mu} = \frac{\Delta_{\mu}^{d1}}{2} (\cos k_x - \cos k_y) + \frac{\Delta_{\mu}^{d2}}{2} (\cos 2k_x - \cos 2k_y) + \frac{\Delta_{\mu}^{d3}}{2} (\cos 3k_x - \cos 3k_y), \quad (12)$$

где параметры Δ_{μ}^i для зоны μ были выбраны так, чтобы воспроизводить угловые зависимости, приведенные на рис. 5 для наибольшего собственного значения λ : $\Delta_{\alpha_1}^{d1} = 0$, $\Delta_{\alpha_1}^{d2} = 0.33$, $\Delta_{\alpha_1}^{d3} = 0$, $\Delta_{\alpha_2}^{d1} = -3.5$,

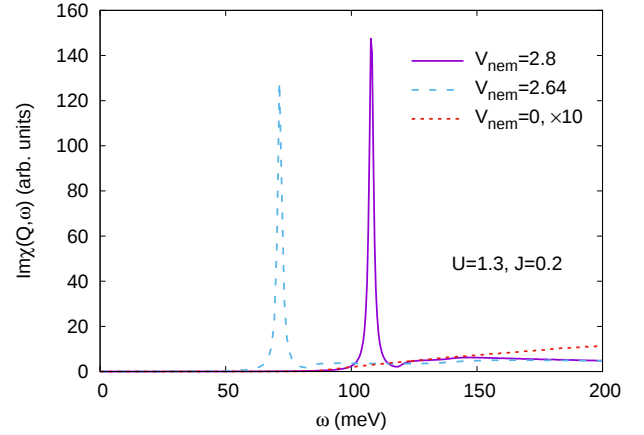


Рис. 10. Мнимая часть динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}, \omega)$ в зависимости от частоты ω . Приведены результаты для сверхпроводящего состояния с наибольшим значением λ для трех различных значений V_{nem} . Первые два соответствуют состоянию $s_{\pi\pm}$ -типа, последнее — состоянию $d_{x^2-y^2}$ -типа

$$\Delta_{\alpha_2}^{d2} = 0, \Delta_{\alpha_2}^{d3} = 0, \Delta_{\beta}^{d1} = 0.09, \Delta_{\beta}^{d2} = -0.06, \Delta_{\beta}^{d3} = 0.03.$$

Параметр порядка A_{1g} -типа в нематической фазе параметризуем как

$$\Delta_{k\mu} = \Delta_{\mu}^0 + \frac{1}{2} (\Delta_{\mu}^{1x} \cos k_x + \Delta_{\mu}^{1y} \cos k_y) + \frac{1}{2} (\Delta_{\mu}^{2x} \cos 2k_x + \Delta_{\mu}^{2y} \cos 2k_y) \quad (13)$$

со следующими параметрами Δ_{μ}^i :

для $V_{nem} = 2.64$ эВ (угловые зависимости на рис. 6)
 $\Delta_{\alpha_1}^0 = -0.24$, $\Delta_{\alpha_1}^{1x} = 0$, $\Delta_{\alpha_1}^{1y} = 0$, $\Delta_{\alpha_1}^{2x} = 0.46$,
 $\Delta_{\alpha_1}^{2y} = 0.04$, $\Delta_{\alpha_2}^0 = -0.08$, $\Delta_{\alpha_2}^{1x} = 0$, $\Delta_{\alpha_2}^{1y} = 0$,
 $\Delta_{\alpha_2}^{2x} = -0.7$, $\Delta_{\alpha_2}^{2y} = 0.7$, $\Delta_{\beta}^0 = 0.07$, $\Delta_{\beta}^{1x} = -0.04$,
 $\Delta_{\beta}^{1y} = 0$, $\Delta_{\beta}^{2x} = 0$, $\Delta_{\beta}^{2y} = -0.14$;

для $V_{nem} = 2.8$ эВ (угловые зависимости на рис. 7)
 $\Delta_{\alpha_1}^0 = -0.22$, $\Delta_{\alpha_1}^{1x} = 0$, $\Delta_{\alpha_1}^{1y} = 0$, $\Delta_{\alpha_1}^{2x} = 0.4$,
 $\Delta_{\alpha_1}^{2y} = 0.04$, $\Delta_{\alpha_2}^0 = -0.08$, $\Delta_{\alpha_2}^{1x} = 0$, $\Delta_{\alpha_2}^{1y} = 0$,
 $\Delta_{\alpha_2}^{2x} = -0.7$, $\Delta_{\alpha_2}^{2y} = 0.7$, $\Delta_{\beta}^0 = 0.07$, $\Delta_{\beta}^{1x} = 0$, $\Delta_{\beta}^{1y} = 0$,
 $\Delta_{\beta}^{2x} = 0.03$, $\Delta_{\beta}^{2y} = -0.12$.

Сравнение угловых зависимостей щелей, полученных из спин-флуктуационной теории спаривания и построенных из аналитических зависимостей (12), (13) с приведенными выше подобранными параметрами, показано на рис. 9.

Полученные результаты для $\text{Im}\chi(\mathbf{Q}, \omega)$ на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, когда спиновый отклик максимален (см. рис. 4), приведены на рис. 10. Видно, что для $d_{x^2-y^2}$ -типа спин-резонансного пика нет. Это согласуется с ранними результатами работы [17], где отмечалось, что, хотя $d_{x^2-y^2}$ -тип па-

раметра порядка и знакопеременный, вектор $\mathbf{Q}$ соединяет состояния из зоны β с состояниями из зон α , где имеются нули параметра порядка, из-за чего фазовое пространство, дающее вклад в рассеяние на этом векторе, мало и, соответственно, мала восприимчивость. Последнее приводит к отсутствию условий для возникновения спин-резонансного пика для разумных значений кулоновских параметров в РРА.

С другой стороны, для нематического сверхпроводящего состояния со щелью типа $s_{\pi\pm}$ условия для возникновения спин-резонансного пика выполняются, и для использованных при расчете сверхпроводящего состояния параметров U и J возникает пик для $V_{nem} = 2.64$ эВ и $V_{nem} = 2.8$ эВ. Спин-резонансный пик наблюдается в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов для подавляющего большинства соединений железа (см. подробное обсуждение и сравнение с экспериментальными данными в работе [19]). Мы показали, что такой пик возникает и в нематической фазе. Таким образом, факт экспериментального наблюдения спинового экситона не противоречит наличию нематического сверхпроводящего состояния.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы рассмотрели электронный нематический порядок в рамках теории среднего поля и возникновение на его фоне сверхпроводимости в теории спин-флуктуационного механизма спаривания в пятиорбитальной модели соединений железа. Самосогласованно вычисленный нематический параметр порядка Φ_l равен нулю при значениях коэффициента нематического взаимодействия V_{nem} от нуля до критического значения, когда одна из компонент параметра порядка Φ_l скачком становится конечной. Эта компонента соответствует орбитали $l = d_{xy}$. При дальнейшем увеличении V_{nem} скачком меняются сначала компоненты, связанные с орбиталями $d_{x^2-y^2}$ и $d_{3z^2-r^2}$, а затем и d_{xz} с d_{yz} . Таким образом, имеем четыре области, разделенные тремя фазовыми переходами первого рода. Далее мы исследуем только первые две области, поскольку остальные реализуются при очень больших значениях $V_{nem} > 4$ эВ. Найдено сверхпроводящее решение в обеих областях. Два главных конкурирующих решения в отсутствие нематического порядка соответствуют параметру порядка типов $s_{\pm}$ и $d_{x^2-y^2}$. В нематической фазе два решения с наибольшим значением эффективной константы связи λ имеют тип $s_{\pi\pm}$ и $d_{\pi xy}$. При этом первому решению всегда

соответствует большее значение λ , следовательно, и большая критическая температура T_c . Из оценки критических температур для различных исследованных здесь фаз мы делаем вывод, что самая большая T_c будет соответствовать нематическому сверхпроводящему состоянию типа $s_{\pi\pm}$.

Вычислена динамическая спиновая восприимчивость для сверхпроводящего состояния с параметром порядка типа $d_{x^2-y^2}$ и для нематического сверхпроводящего состояния с параметром порядка типа $s_{\pi\pm}$. Показано, что для двух различных значений коэффициента нематического взаимодействия, $V_{nem} = 2.64$ эВ и $V_{nem} = 2.8$ эВ, в нематическом сверхпроводящем состоянии возникает спин-резонансный пик. Поскольку пик экспериментально наблюдается в подавляющем большинстве соединений железа, нематическое сверхпроводящее состояние не противоречит этим наблюдениям.

Финансирование. Работа выполнена в рамках научной тематики Государственного задания ИФ СО РАН.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ЛИТЕРАТУРА

1. J.-H. Chu, J. G. Analytis, K. D. Greve, P. L. McMahon, Z. Islam, Y. Yamamoto, and I. R. Fisher, *In-Plane Resistivity Anisotropy in an Underdoped Iron Arsenide Superconductor*, Science **329**, 824 (2010).
2. Y. I. Talanov, I. I. Gimazov, and D. E. Zhelezniakova, *Impact of Spin Correlations on Resistivity and Microwave Absorption of $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$* , Magn. Reson. Solids **26**, 24110 (2024).
3. R. M. Fernandes, A. V. Chubukov, J. Knolle, I. Eremin, and J. Schmalian, *Preemptive Nematic Order, Pseudogap, and Orbital Order in the Iron Pnictides*, Phys. Rev. B **85**, 024534 (2012).
4. R. M. Fernandes, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *What Drives Nematic Order in Iron-Based Superconductors?* Nat. Phys. **10**, 97 (2014).
5. J. Li, P. J. Pereira, J. Yuan, Y.-Y. Lv, M.-P. Jiang, D. Lu, Z.-Q. Lin, Y.-J. Liu, J.-F. Wang, L. Li, X. Ke, G. Van Tendeloo, M.-Y. Li, H.-L. Feng, T. Hatano, H.-B. Wang, P.-H. Wu, K. Yamaura, E. Takayama-Muromachi, J. Vanacken, L. F. Chibotaru, and V. V. Moshchalkov, *Nematic Superconducting State in Iron Pnictide Superconductors*, Nat. Commun. **8**, 1880 (2017).

6. J. Wang, Y. Wu, X. Zhou, Y. Li, B. Teng, P. Dong, J. He, Y. Zhang, Y. Ding, and J. Li, *Progress of Nematic Superconductivity in Iron-Based Superconductors*, Adv. Phys. X **6**, 1878931 (2021).
7. P. O. Sprau, A. Kostin, A. Kreisel, A. E. Bohmer, V. Taufour, P. C. Canfield, S. Mukherjee, P. J. Hirschfeld, B. M. Andersen, and J. C. S. Davis, *Discovery of Orbital-Selective Cooper Pairing in FeSe*, Science **357**, 75 (2017).
8. J. Wu, A. T. Bollinger, X. He, and I. Božović, *Spontaneous Breaking of Rotational Symmetry in Copper Oxide Superconductors*, Nature **547**, 432 (2017).
9. N. K. Gupta, C. McMahon, R. Sutarto, T. Shi, R. Gong, H. I. Wei, K. M. Shen, F. He, Q. Ma, M. Dragomir, B. D. Gaulin, and D. G. Hawthorn, *Vanishing Nematic Order Beyond the Pseudogap Phase in Overdoped Cuprate Superconductors*, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **118**, e2106881118 (2021).
10. S. Nakata, M. Horio, K. Koshiishi, K. Hagiwara, C. Lin, M. Suzuki, S. Ideta, K. Tanaka, D. Song, Y. Yoshida, H. Eisaki, and A. Fujimori, *Nematicity in a Cuprate Superconductor Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy under Uniaxial Strain*, npj Quant. Mater. **6**, 86 (2021).
11. T. Xie, Z. Liu, Y. Gu, D. Gong, H. Mao, J. Liu, C. Hu, X. Ma, Y. Yao, L. Zhao, X. Zhou, J. Schneeloch, G. Gu, S. Danilkin, Y.-f. Yang, H. Luo, and S. Li, *Tracking the Nematicity in Cuprate Superconductors: A Resistivity Study under Uniaxial Pressure*, J. Phys. Condens. Matter **34**, 334001 (2022).
12. I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes, and M. H. Du, *Unconventional Superconductivity with a Sign Reversal in the Order Parameter of LaFeAsO_{1-x}F_x*, Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008).
13. M. M. Korshunov, *Superconducting State in Iron-Based Materials and Spin-Fluctuation Pairing Theory*, Phys. Usp. **57**, 813 (2014) [M. M. Коршунов, *Сверхпроводящее состояние в соединениях железа и спин-флуктуационная теория спаривания*, УФН **184**, 882 (2014)].
14. S. Maiti, M. M. Korshunov, T. A. Maier, P. J. Hirschfeld, and A. V. Chubukov, *Evolution of the Superconducting State of Fe-Based Compounds with Doping*, Phys. Rev. Lett. **107**, 147002 (2011).
15. P. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, and I. I. Mazin, *Gap Symmetry and Structure of Fe-Based Superconductors*, Rep. Progr. Phys. **74**, 124508 (2011).
16. P. J. Hirschfeld, *Using Gap Symmetry and Structure to Reveal the Pairing Mechanism in Fe-Based Superconductors*, C. R. Phys. **17**, 197 (2016).
17. M. M. Korshunov and I. Eremin, *Theory of Magnetic Excitations in Iron-Based Layered Superconductors*, Phys. Rev. B **78**, 140509 (2008).
18. T. A. Maier and D. J. Scalapino, *Theory of Neutron Scattering as a Probe of the Superconducting Gap in the Iron Pnictides*, Phys. Rev. B **78**, 020514 (2008).
19. M. M. Korshunov, *Effect of Gap Anisotropy on the Spin Resonance Peak in the Superconducting State of Iron-Based Materials*, Phys. Rev. B **98**, 104510 (2018).
20. M. D. Lumsden and A. D. Christianson, *Magnetism in Fe-Based Superconductors*, J. Phys. Condens. Matter **22**, 203203 (2010).
21. P. Dai, *Antiferromagnetic Order and Spin Dynamics in Iron-Based Superconductors*, Rev. Mod. Phys. **87**, 855 (2015).
22. D. Inosov, *Spin Fluctuations in Iron Pnictides and Chalcogenides: From Antiferromagnetism to Superconductivity*, C. R. Phys. **17**, 60 (2016).
23. M. M. Korshunov, S. A. Kuzmichev, and T. E. Kuzmicheva, *Direct Observation of the Spin Exciton in Andreev Spectroscopy of Iron-Based Superconductors*, Materials **15**, 6120 (2022).
24. H. Yamase, V. Oganessian, and W. Metzner, *Mean-Field Theory for Symmetry-Breaking Fermi Surface Deformations on a Square Lattice*, Phys. Rev. B **72**, 035114 (2005).
25. S. Sen Choudhury, S. Peterson, and Y. Idzerda, *Thermal Transport in Two-Dimensional Nematic Superconductors*, Phys. Rev. B **105**, 214515 (2022).
26. M. M. Korshunov and Yu. N. Togushova, *Superconducting Order Parameter Structure in the Nematic Phase of Iron-Based Materials*, JETP Lett. **119**, 310 (2024) [M. M. Коршунов, Ю. Н. Тогушова, *Структура сверхпроводящего параметра порядка в нематической фазе соединений железа*, Письма в ЖЭТФ **119**, 302 (2024)].
27. K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, and H. Aoki, *Unconventional Pairing Originating from the Disconnected Fermi Surfaces of Superconducting LaFeAsO_{1-x}F_x*, Phys. Rev. Lett. **101**, 087004 (2008).
28. S. Graser, T. Maier, P. Hirschfeld, and D. Scalapino, *Near-Degeneracy of Several Pairing Channels in Multiorbital Models for the Fe Pnictides*, New J. Phys. **11**, 025016 (2009).
29. H.-Y. Kee, E. H. Kim, and C.-H. Chung, *Signatures of an Electronic Nematic Phase at the Isotropic-Nematic Phase Transition*, Phys. Rev. B **68**, 245109 (2003).

30. I. Khavkine, C.-H. Chung, V. Oganessian, and H.-Y. Kee, *Formation of an Electronic Nematic Phase in Interacting Fermion Systems*, Phys. Rev. B **70**, 155110 (2004).
31. M. Korshunov, *Perturbation Theory: Advances in Research and Applications*, Nova Science Publ. Inc., New York (2018), p. 61.
32. C. Castellani, C. R. Natoli, and J. Ranninger, *Magnetic Structure of V_2O_3 in the Insulating Phase*, Phys. Rev. B **18**, 4945 (1978).
33. A. M. Oleś, *Antiferromagnetism and Correlation of Electrons in Transition Metals*, Phys. Rev. B **28**, 327 (1983).
34. V. Anisimov, D. Korotin, S. Streltsov, A. Kozhevnikov, J. Kunes, A. Shorikov, and M. Korotin, *Density-Functional Calculation of the Coulomb Repulsion and Correlation Strength in Superconducting $LaFeAsO$* , JETP Lett. **88**, 729 (2008) [Письма в ЖЭТФ **88**, 844 (2008)].
35. N. F. Berk and J. R. Schrieffer, *Effect of Ferromagnetic Spin Correlations on Superconductivity*, Phys. Rev. Lett. **17**, 433 (1966).
36. D. J. Scalapino, E. Loh, and J. E. Hirsch, *d -Wave Pairing Near a Spin-Density-Wave Instability*, Phys. Rev. B **34**, 8190 (1986).

Effect of the Nematicity on the Structure of the Order Parameter and the Spin Response in Iron-Based Materials

М. М. Коршунов^{a*}, Ю. Н. Тогушова^b

^a Kirensky Institute of Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
660036, Krasnoyarsk, Russia

^b Siberian Federal University
660041, Krasnoyarsk, Russia

*E-mail: mkor@iph.krasn.ru

Received July 18, 2025

Revised July 20, 2026

Accepted July 21, 2026

Abstract

Electronic nematic order found in iron pnictides and chalcogenides always accompanies the superconducting state. We consider the nematic order as the d -type Pomeranchuk instability and study it within the mean-field approach. Components of the obtained nematic order parameter change abruptly with the increase of the nematic interaction coefficient, thus there is a set of first order phase transitions. There are four regions where the various orbital components of the order parameter differ. In two regions corresponding to the physically reliable values of the nematic interaction coefficient, we obtain superconducting solutions within the spin-fluctuation theory of pairing. The leading solution is of $s_{\pi\pm}$ type. This superconducting state is more favorable than the $s_{\pm}$ and $d_{x^2-y^2}$ types taking place in the absence of nematicity. For the $s_{\pi\pm}$ state, we obtain the spin resonance peak in the dynamical spin susceptibility.

Keywords: unconventional superconductivity, spin fluctuation theory of superconductivity, iron pnictides, iron chalcogenides, nematic order, dynamical spin susceptibility, inelastic neutron scattering

Funding. This work was carried out within the framework of the research topic of the State Assignment of Kirensky Institute of Physics.

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflicts of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.