Письма в ЖЭТФ, том 109, вып. 1, с. 48 – 53 © 2019 г. 10 января

Фазовая диаграмма двухорбитальной модели ВТСП на основе железа: вариационное кластерное приближение[1)]

Я. В. Жумагулов[+*], *В. А. Кашурников*[+], *А. В. Красавин*[+ 2)], *А. Е. Лукьянов*[+], *В. Д. Неверов*[+]

[+]*Национальный Исследовательский Ядерный Университет МИФИ, 115409 Москва, Россия*

[*]*Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, 197101 С.-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 23 октября 2018 г.
После переработки 7 ноября 2018 г.
Принята к публикации 7 ноября 2018 г.

Методом вариационного кластерного приближения рассчитана фазовая диаграмма двумерной двухорбитальной модели Хаббарда, широко используемой для описания высокотемпературных сверхпроводников на основе железа, в области электронного допирования. Получено, что сосуществование антиферромагнитной и сверхпроводящей фаз реализуется в широком диапазоне значений электронного допирования. В сверхпроводящей фазе параметр порядка имеет $s^{\pm}$-симметрию.

DOI: 10.1134/S0370274X19010090

1. Введение. Сверхпроводники на основе железа известны с 2006 года, когда сверхпроводимость была зарегистрирована ниже $T_c = 3.5$ K в LiOFeAs [1] и $T_c = 4.5$ K в LaOFeP [2]. Это открытие не получило большого значения из-за низких значений критических температур. Ситуация резко изменилась в 2008 г., когда сверхпроводимость была обнаружена в $\mathrm{LiO}_{1-x}\mathrm{F}_x\mathrm{FeAs}$ с $T_c = 26$ K [3]. Это значение критической температуры позволило классифицировать это соединение как высокотемпературный сверхпроводник (ВТСП). После этого открытия целое семейство соединений на основе FeAs (названных пниктидами) было синтезировано с критическими температурами до $T_c = 55$ K в $\mathrm{SmO}_{1-x}\mathrm{F}_x\mathrm{FeAs}$ [4].

Свойства пниктидов во многом напоминают свойства купратных ВТСП: они имеют похожие фазовые диаграммы [5]; исходные соединения в обоих случаях являются антиферромагнетиками. Кроме того, в обоих случаях существует квазидвумерная структура, т.е. эти соединения являются слоистыми: купраты основаны на слоях CuO_2, тогда как в пниктидах чередуются FeAs-слои, перемежающиеся различными другими слоями, содержащими ионы редкоземельных металлов. Из-за сильной анизотропии кристаллической структуры электронная структура пниктидов имеет ярко выраженные квазидвумерные свойства. Отличительной особенностью пниктидов является наличие фазы нематического упорядочения, в которой снимается вырождение d_{xz} и d_{yz}-орбиталей атомов железа [6]. Существенный прогресс был также достигнут в исследовании родственных соединений – халькогенидов [7]: температура сверхпроводящего перехода в монослое FeSe на подложке SrTiO_3 составила 65 K [8].

Расчеты электрон-фононной связи в $\mathrm{LiO}_{1-x}\mathrm{F}_x\mathrm{FeAs}$ показали [9], что стандартный механизм электрон-фононного спаривания не может обеспечить наблюдаемое высокое значение критической температуры. Это поставило вопрос о роли электронных корреляций в соединениях на основе железа при образовании сверхпроводящего состояния. Имеются экспериментальные данные, свидетельствующие о наличии сильных корреляций, таких как температурная реорганизация зонной структуры, измеренная с помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (*Angle-resolved photoemission spectroscopy* – ARPES) [10]. Расчеты LDA + DMFT (*Local-density approximation* – LDA, *Dynamical mean-field theory* – DMFT)(см., например, [11, 12]) показывают существенную перенормировку массы квазичастиц вблизи уровня Ферми.

Основными современными методами теоретического и численного изучения электронной структуры коррелированных электронных систем являются:

• Теория функционала плотности (*Density functional theory* – DFT) является основным методом изучения электронных систем, поскольку является

[1)]См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

[2)]e-mail: avkrasavin@mephi.ru

первопринципным методом. В теории функционала плотности отсутствует учет как динамических, так и нелокальных корреляций, которые имеют сильное влияние в электронной подсистеме ВТСП. Применительно к изучению ВТСП на основе железа с помощью DFT были получены поверхности Ферми [13], а также параметры соответствующей модели сильной связи [14].

• Теория динамического среднего поля (DMFT) расширяет теорию функционала плотности в области учета динамических корреляций, однако в ней также отсутствует учет нелокальных электронных корреляций. С помощью DMFT удалось установить важную роль корреляционных эффектов в ВТСП на основе халькогенидов [15, 16].

• Квантовые решеточные алгоритмы Монте-Карло (*Quantum Monte Carlo* – QMC) способны рассчитывать как дальние нелокальные, так и динамические корреляции, однако существенно ограничены в своей применимости из-за проблемы знака, которая не позволяет проводить вычисления при низких температурах, при которых и возникает сверхпроводящее состояние. Для не слишком низких температур при помощи QMC ранее удалось исследовать корреляционные свойства рассматриваемой далее двухорбитальной модели ВСТП на основе железа [17].

• Вариационное кластерное приближение (*Variational cluster approximation* – VCA) учитывает динамические и ближние нелокальные корреляции, а также не имеет проблемы знака. Серьезным ограничением VCA является размер референсной системы, решаемой при помощи точной диагонализации.

В настоящей работе вариационное кластерное приближение было использовано для изучения фазовых состояний двухорбитальной модели ВТСП на основе железа. В этом случае минимальной референсной системой является кластер 2×2, состоящий из четырех атомов железа и восьми орбиталей, что является допустимым размером системы для точной диагонализации.

2. Модель и метод. Вариационное кластерное приближение основано на функционале Поттхоффа $\Omega[\Sigma]$ [18] для многочастичного гамильтониана $H = T + V$ с одночастичным слагаемым T и двухчастичным слагаемым V (см. дополнительный материал). В настоящей работе методом VCA была исследована двухорбитальная модель [19, 20], являющаяся минимальной моделью, способной описать физику двух орбиталей железа d_{xz}, d_{yz}, вносящих основной вклад в поверхность Ферми, полученную из *ab-initio* расчетов [21, 22]. Модель содержит четыре типа перескоков и имеет следующий гамильтониан:

$$
\begin{aligned}
H_{\rm kin} = &-t_1 \sum_{\mathbf{i},\sigma} (a^+_{\mathbf{i},x,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x},x,\sigma} + a^+_{\mathbf{i},y,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{y},y,\sigma} + h.c.) - \\
&- t_2 \sum_{\mathbf{i},\sigma} (a^+_{\mathbf{i},y,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x},y,\sigma} + a^+_{\mathbf{i},x,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{y},x,\sigma} + h.c.) - \\
&- t_3 \sum_{\mathbf{i},\sigma} (a^+_{\mathbf{i},x,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},x,\sigma} + a^+_{\mathbf{i},x,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}-\mathbf{y},x,\sigma} + \\
&a^+_{\mathbf{i},x,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},y,\sigma} + a^+_{\mathbf{i},y,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}-\mathbf{y},y,\sigma} + h.c.) - \\
&- t_4 \sum_{\mathbf{i},\sigma} (a^+_{\mathbf{i},x,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},y,\sigma} + a^+_{\mathbf{i},y,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},x,\sigma} + \\
&a^+_{\mathbf{i},x,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}-\mathbf{y},y,\sigma} + a^+_{\mathbf{i},y,\sigma} a_{\mathbf{i}+\mathbf{x}-\mathbf{y},x,\sigma} + h.c.), \qquad (1)
\end{aligned}
$$

где оператор $a^+_{\mathbf{i},x(y),\sigma} (a_{\mathbf{i},x(y),\sigma})$ рождает (уничтожает) электрон со спином σ на узле $\mathbf{i}$ и орбитали $x(y)$; t_i, $i = 1, \ldots, 4$ – амплитуды перескоков между орбиталями d_{xy} и d_{yz}. В дополнение к $H_{\rm kin}$ необходимо включить также слагаемые, описывающие кулоновское взаимодействие:

$$
\begin{aligned}
H_{\rm int} = &U \sum_{\mathbf{i},\alpha} n_{\mathbf{i},\alpha,\uparrow} n_{\mathbf{i},\alpha,\downarrow} + V \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},x} n_{\mathbf{i},y} - \\
&- \mu \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}} - J \sum_{\mathbf{i}} (n_{\mathbf{i},x,\uparrow} n_{\mathbf{i},y,\uparrow} + n_{\mathbf{i},x,\downarrow} n_{\mathbf{i},y,\downarrow}) - \\
&- J \sum_{\mathbf{i}} (a^+_{\mathbf{i},x,\downarrow} a_{\mathbf{i},x,\uparrow} a^+_{\mathbf{i},y,\uparrow} a_{\mathbf{i},y,\downarrow} + a^+_{\mathbf{i},x,\uparrow} a_{\mathbf{i},x,\downarrow} a^+_{\mathbf{i},y,\downarrow} a_{\mathbf{i},y,\uparrow} + \\
&+ a^+_{\mathbf{i},x,\uparrow} a_{\mathbf{i},y,\downarrow} a^+_{\mathbf{i},x,\downarrow} a_{\mathbf{i},y,\uparrow} + a^+_{\mathbf{i},y,\uparrow} a_{\mathbf{i},x,\downarrow} a^+_{\mathbf{i},y,\downarrow} a_{\mathbf{i},x,\uparrow}), \qquad (2)
\end{aligned}
$$

где параметры U и V описывают кулоновское взаимодействие внутри и между орбиталями, соответственно; J – обменный интеграл; μ – химический потенциал. Эта модель интенсивно изучалась методами среднего поля [23, 24], точной диагонализацией малых кластеров [25] и квантовыми алгоритмами Монте-Карло [15, 20, 26–28]. Параметры кинетической части гамильтониана $H_{\rm kin}$ определяются фитированием зонной структуры, полученной в LDA-расчетах [29, 30] для базового соединения LaFeAsO класса ВТСП на основе железа. Параметры, описывающие кулоновское взаимодействие, подбираются из соответствия фотоэмиссионных спектров [31] расчетной интегральной плотности состояний. Полученные таким образом константы гамильтониана являются универсальными для всего класса соединений ВТСП на основе железа ввиду общих особенностей электронной и кристаллической структур этих веществ. На наш взгляд, наиболее удачным набором параметров, оптимально описывающим эволюцию поверхности Ферми с изменением уровня допирования, являются следующие параметры H_{kin} и H_{int}, взятые из [32, 33], соответственно (все параметры в эВ):

$$t_1 = -0.25;\ t_2 = 0.375;\ t_3 = -0.3;\\ t_4 = -0.2375;\ U = 2.0;\ V = 0.6;\ J = 0.7. \tag{3}$$

В качестве референсной системы был использован кластер из четырех атомов железа, содержащий в общей сложности восемь орбиталей.

3. Детали расчета и результаты. Для определения фазовых состояний и симметрийных свойств двухорбитальной модели в гамильтониан (6) были добавлены вейссовы поля следующего вида:

• антиферромагнитное упорядочение

$$W_{AFM} = M \sum_{i,o=(x,y),\sigma} \sigma e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} n_{i,o,\sigma},\ \mathbf{Q} = (0,\pi); \tag{4}$$

• нематичность

$$W_N = N \sum_{i,\sigma} (n_{i,x,\sigma} - n_{i,y,\sigma}); \tag{5}$$

• сверхпроводящее упорядочение наиболее общего вида, которое может быть учтено при использовании референсной системы в виде кластера размером 2×2,

$$W_{SC} = \sum_{\substack{i,j;\sigma,\sigma' \\ oo'=(x,y)}} \Delta_{ij} (c^+_{i,o,\sigma} c^+_{j,o',\sigma'} + h.c.); \tag{6}$$

• термодинамическая самосогласованность, необходимая для того, чтобы среднее число частиц в системе, вычисленное двумя независимыми способами (как производная от термодинамического потенциала либо как сумма функции Грина по всем мацубаровским частотам), давало одинаковый результат [34],

$$W_{TD} = \mu' \sum_{i,o=(x,y),\sigma} n_{i,o,\sigma}, \tag{7}$$

где M, N, Δ, μ' – соответствующие амплитуды вейссовых полей; индексы i, j нумеруют узлы референсной системы; o, o' – орбитали; σ, σ' – спиновые индексы. Заметим, что в [33] двухорбитальная модель была исследована без учета термодинамической согласованности (7) и сверхпроводящего упорядочения (6).

Варьирование функционала $\Omega[\Sigma']$, где Σ' – собственная энергетическая составляющая референсной системы, производится в присутствии всех или нескольких вейссовых полей (4)–(7). Из всех стационарных точек $\Omega[\Sigma']$ точка, отвечающая минимальному значению $\Omega[\Sigma']$, определяет физическое термодинамическое состояние системы. Если в этой точке амплитуда какого-либо вейссова поля имеет ненулевое значение, то в системе имеется соответствующее упорядочение (система дает отклик на определенный тип симметрии), а отвечающий этому упорядочению параметр порядка может быть найден из функции Грина [35].

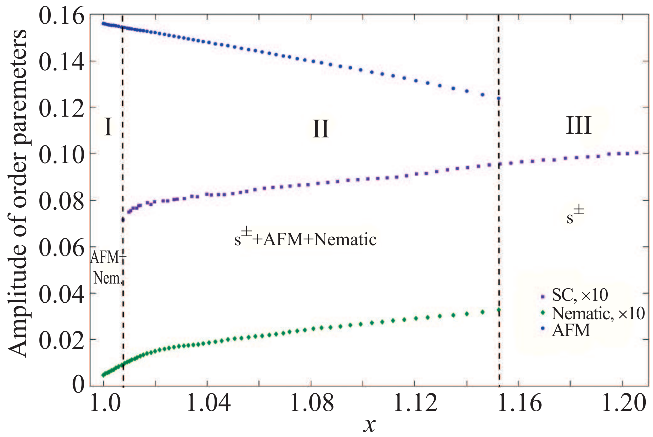

Рис. 1. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма двумерной двухорбитальной модели Хаббарда в области электронного допирования. Показаны амплитуды соответствующих параметров порядка: средний магнитный момент на узле $\langle m_i \rangle$ (круги); поляризация орбиталей $\langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle$ (ромбы); концентрация куперовских пар $\langle c^+_i c^+_j \rangle$ (квадраты). В области II наблюдается сосуществование трех фаз, отвечающих антиферромагнитному, нематическому и сверхпроводящему упорядочению

В настоящей работе варьирование $\Omega[\Sigma']$ производилось в присутствии вейссовых полей (4), (5), (7), либо (5)–(7). Поиск стационарных точек осуществлялся с использованием алгоритма Ньютона. Была исследована фазовая диаграмма модели при электронном допировании (при дырочном допировании двухорбитальная модель не является полностью корректной для описания ВТСП на основе железа, так как из характера зонной структуры следует, что необходим учет большего числа орбиталей). В случае сверхпроводящего поля Вейсса (6) отклик в системе был получен только для симметрии $s^\pm$-wave $W_{s^\pm} = \Delta \sum_{\langle ij \rangle, o=(x,y)} (c^+_{i,o,\uparrow} c^+_{j,o,\downarrow} + h.c.)$ [36]. Фазовая диаграмма, таким образом, состоит из трех областей (рис. 1): антиферромагнитное и нематическое упорядочение при допировании $0 < x < 1.008$ (область I), сосуществование антиферромагнитного, нематического и сверхпроводящего с симметрией $s^\pm$-

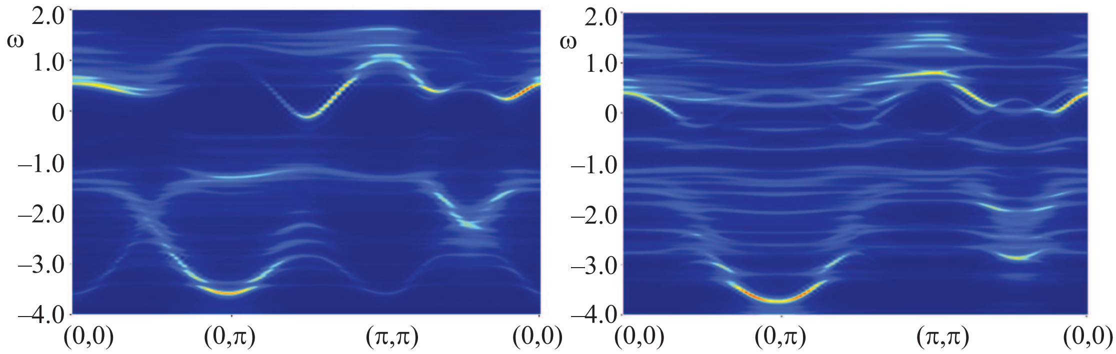

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зонная структура в области II ((a) – допирование $x = 1.1$) и в области III ((b) – $x = 1.175$) фазовой диаграммы. Красный и синий цвет соответствуют максимальному и нулевому значениям плотности состояний соответственно

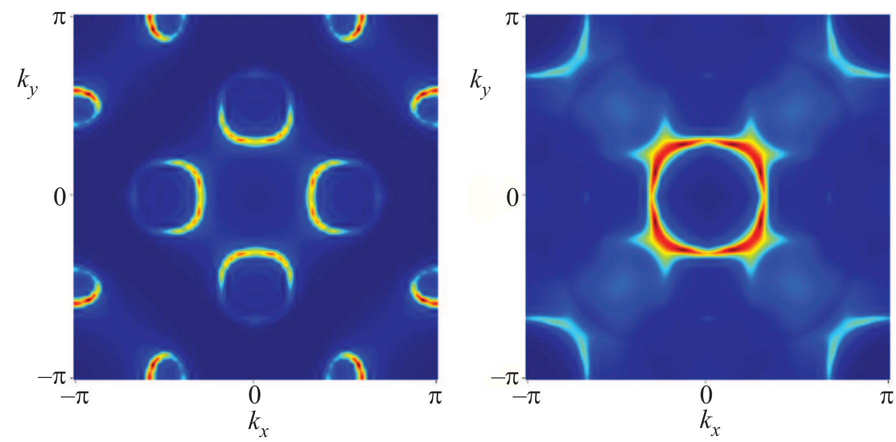

Рис. 3. (Цветной онлайн) Поверхность Ферми в областях II (a) и III (b) фазовой диаграммы. Степень допирования та же, что и на рис. 2. Красный и синий цвет соответствуют максимальному и нулевому значениям плотности состояний на уровне Ферми соответственно

wave упорядочения при $1.008 < x < 1.152$ (область II) и сверхпроводящая фаза при $x > 1.152$ (область III).

При слабом допировании в области I фазовой диаграммы присутствуют сильные антиферромагнитные корреляции, о чем свидетельствует наличие плоских зон в зонной структуре; наблюдается высокая поляризация орбиталей, сверхпроводимость отсутствует. Магнитные свойства этой фазы были исследованы вскоре после формулировки модели [23, 25].

В области II с увеличением допирования антиферромагнитные корреляции начинают уменьшаться, что прослеживается на ослаблении высококогерентной плоской зоны ниже уровня Ферми на зонной структуре (рис. 2a), которая исчезает в области III (рис. 2b). Поляризация орбиталей монотонно растет с ростом допирования вплоть до точки фазового перехода $x = 1.152$, в которой спонтанно исчезает; в фазе III нематическое упорядочение отсутствует (см. дополнительный материал). Наблюдаемые корреляции в поведении антиферромагнитной и нематической фаз (общие фазовые границы), объясняются, вероятно, малостью размеров референсной системы. В фазе II, как и в фазе I, на плотности состояний четко различимы две хаббардовские зоны.

В присутствии антиферромагнитного упорядочения (фазы I и II) поверхность Ферми имеет нули на обоих листах, которые исчезают при переходе системы в фазу III – собственная энергетическая составляющая имеет четко выраженную импульсную зависимость (рис. 3). Вид поверхности Ферми согласуется с ARPES [10]. Расчетные поверхности Ферми на рис. 3 не имеют особенностей вблизи точки Г, которые проявляются при учете трех и более орбиталей [22]. Импульсное распределение сверхпроводящего параметра порядка в фазе III (рис. 4b) свидетельствует о наличии $s^{\pm}$-симметрии – значения параметра порядка имеют разный знак на разных листах поверхности

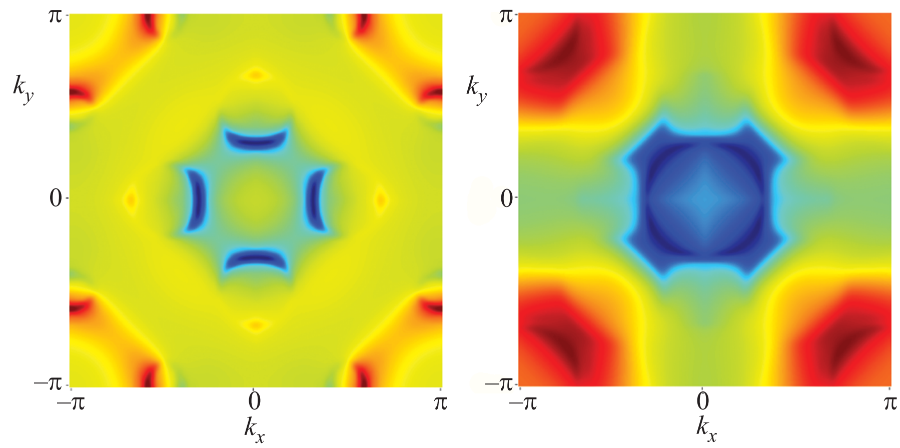

Рис. 4. (Цветной онлайн) Импульсная зависимость сверхпроводящего параметра порядка в областях II (a) и III (b) фазовой диаграммы. Степень допирования та же, что и на рис. 2. Красный и синий цвет соответствует положительным и отрицательным значениям соответственно. В системе реализуется $s^{\pm}$-симметрия

Ферми. При уменьшении допирования одновременно с появлением антиферромагнитного упорядочения нули сверхпроводящего параметра порядка выходят на поверхность Ферми (рис. 4a).

Как следует из фазовой диаграммы, оба фазовых перехода при допированиях $x = 1.008$ и $x = 1.152$ имеют характер фазовых переходов первого рода, поскольку производные соответствующих параметров порядка терпят разрывы на границах фаз. Это утверждение, однако, требует дополнительного исследования, так как расчет проводился на ограниченной по размеру референсной системе, а варьирование функционала $\Omega[\Sigma']$ проводилось по отдельности либо с включением антиферромагнитного поля Вейсса (4), либо с включением сверхпроводящего поля Вейсса (6). Варьирование по всем вейссовым полям – технически намного более сложная задача, которая является предметом дальнейшей работы. Положение границ между фазами на рис. 1 также может являться следствием ограниченности референсной системы, и при учете кластера бóльшего размера и, соответственно, более точном расчете, границы фаз могли бы сместиться в ту или иную сторону по оси допирования, что, однако, не изменило бы основных результатов работы, а именно реализации $s^{\pm}$-симметрии сверхпроводящего параметра порядка и сосуществования антиферромагнитного упорядочения и сверхпроводимости в достаточно широком диапазоне значений электронного допирования. Эти результаты являются универсальными ввиду самого построения теории VCA.

4. Заключение. Фазовая диаграмма двумерной двухорбитальной модели Хаббарда, широко используемой для описания высокотемпературных сверхпроводников на основе железа, была рассчитана при помощи вариационного кластерного приближения с учетом термодинамической согласованности. В зависимости от степени электронного допирования было исследовано поведение трех фазовых состояний: антиферромагнитного, нематического и сверхпроводящего упорядочений. Получено, что сосуществование антиферромагнитной и сверхпроводящей фаз реализуется в широком диапазоне значений электронного допирования; в сверхпроводящей фазе параметр порядка имеет $s^{\pm}$-симметрию. В пользу выбора вариационного кластерного приближения применительно к исследованию подобных мультиорбитальных моделей свидетельствует выраженная импульсная зависимость собственной энергетической составляющей.

Авторы выражают благодарность П.Ф. Карцеву за обсуждение результатов. Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект # 16-19-00168).

1. Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **128**, 10012 (2006).
2. М. В. Садовский, УФН **178** 1243 (2008).
3. Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).
4. Y. J. Ren Zhi-An and Lu Wei, Chin. Phys. Lett. **25**, 2215 (2008).
5. D. N. Basov and A. V. Chubukov, Nature Phys. **7**, 272 (2011).
6. E. P. Rosenthal, E. F. Andrade, C. J. Arguello, R. M. Fernandes, L. Y. Xing, X. C. Wang, C. Q. Jin, A. J. Millis, and A. N. Pasupathy, Nature Phys. **10**, 225 (2014).

7. М. В. Садовский, УФН **186**, 1035 (2016).
8. Sh. He, J. He, W. Zhang et al. (Collaboration), Nature Materials **12**, 605 (2013).
9. K. Haule, J. H. Shim, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **100**, 226402 (2008).
10. D. Lu, M. Yi, S.-K. Mo, J. G. Analytis, J.-H. Chu, A. S. Erickson, D. J. Singh, Z. Hussain, T. H. Geballe, I. R. Fisher, and Z.-X. Shen, Physica C: Superconductivity **469**, 452 (2009).
11. A. O. Shorikov, M. A. Korotin, S. V. Streltsov, S. L. Skornyakov, Dm. M. Korotin, and V. I. Anisimov, JETP **108**, 121 (2009).
12. M. Aichhorn, L. Pourovskii, V. Vildosola, M. Ferrero, O. Parcollet, T. Miyake, A. Georges, and S. Biermann, Phys. Rev. B **80**, 085101 (2009).
13. I. A. Nekrasov and M. V. Sadovskii, Письма в ЖЭТФ **93**, 182 (2011).
14. H. Yamase and R. Zeyher, Phys. Rev. B **88** 180520(R) (2013).
15. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, Письма в ЖЭТФ **95**, 659 (2012).
16. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **143**, 713 (2013).
17. V. A. Kashurnikov, A. V. Krasavin, and Ya. V. Zhumagulov, Phys. Rev. B **23**, 235145 (2016).
18. M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **32**, 429 (2003).
19. S. Raghu, X.-L. Qi, C.-X. Liu, D. J. Scalapino, and Sh.-Ch. Zhang, Phys. Rev. B **77**, 220503(R) (2008).
20. P. T. Dumitrescu, M. Serbyn, R. T. Scalettar, and A. Vishwanath, Phys. Rev. B **94**, 155127 (2016).
21. S. Graser, T. A. Maier, and P. J. Hirschfeld, New J. Phys. **11**, 025016 (2009).
22. M. Daghofer, A. Nicholson, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **81**, 014511 (2010).
23. R. Yu, K. T. Trinh, A. Moreo, M. Daghofer, J. A. Riera, S. Haas, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **79**, 104510 (2009).
24. A. V. Chubukov, D. V. Efremov, and I. Eremin, Phys. Rev. B **78**, 134512 (2008).
25. A. Moreo, M. Daghofer, J. A. Riera, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **79**, 134502 (2009).
26. В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Я. В. Жумагулов, Письма в ЖЭТФ **103**, 378 (2016).
27. В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Письма в ЖЭТФ **100**, 18 (2014).
28. В. А. Кашурников, А. В. Красавин, Письма в ЖЭТФ **97**, 378 (2013).
29. D. J. Singh and M. H. Du, Phys. Rev. Lett. **100** 237003 (2008).
30. Z. P. Yin, S. Lebègue, M. J. Han, B. P. Neal, S. Y. Savrasov, and W. E. Pickett, Phys. Rev. Lett. **101**, 047001 (2008).
31. S. de Jong, Y. Huang, R. Huisman, F. Massee, S. Thirupathaiah, M. Gorgoi, F. Schaefers, R. Follath, J. B. Goedkoop, and M. S. Golden, Phys. Rev. B **79**, 115125 (2009).
32. Z.-J. Yao, J.-X. Li, and Z. D. Wang, New J. Phys. **11**, 025009 (2009).
33. Z. Wang and A. H. Nevidomskyy, J. Phys. Condens. Matter **27**, 225602 (2015).
34. M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, and W. Hanke, Phys. Rev. B **74**, 024508 (2006).
35. D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois, and A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. Lett. **94**, 156404 (2005).
36. A. Chubukov, Ann. Rev. Cond. Mat. Phys. **3**, 57 (2012).