مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۰، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۹

رقابت بین حالت‌های ابررسانایی اسپین- تک‌تایی و – سه‌تایی در مدل آلاییدهٔ هایزنبرگ- کیتائو گسترده

محمدحسین زارع

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی قم، قم

پست الکترونیکی: zare@qut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۱۲/۰۶ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۹۹/۰۲/۰۷)

چکیده

اخیراً مدل هایزنبرگ- کیتائوی گسترده برای توصیف عایق‌های مات اسپین- مدار لایهٔ نظیر اکسید ایریدیت‌ها و $\alpha-RuCl_۳$ با شبکهٔ لانه زنبوری مطرح شده است. در این مقاله با شروع از مدل آلاییدهٔ $t-JK\Gamma$ با حفره، پایداری فازهای ابررسانایی اسپین- تک‌تایی و – سه‌تایی را به خاطر رقابت بین برهم‌کنش‌های تبادلی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس بررسی می‌کنیم. حل عددی خودسازگار معادلات گاف خطی نشان می‌دهد که برهم‌کنش‌های تبادلی هایزنبرگ و کیتائوی فرومغناطیس به تنهایی می‌توانند باعث پایداری فاز ابررسانایی اسپین- سه‌تایی در این دسته از مواد شوند. در ضمن، برهم‌کنش غیرقطری Γ منجر به گسترش ناحیهٔ حالت اسپین- سه‌تایی در سیمای فاز مدل آلاییدهٔ هایزنبرگ- کیتائو با $K<۰$ و $J_H>۰$ می‌شود. همچنین نتایج نشان می‌دهد که برهم‌کنش غیرقطری فرومغناطیس به تنهایی در مقابل برهم‌کنش‌های هایزنبرگ و کیتائوی پادفرومغناطیس نمی‌تواند باعث پایداری فاز موج -p شود.

واژه‌های کلیدی: عایق مات اسپین مدار، ابررسانای غیرمتعارف، مدل هایزنبرگ- کیتائوی گسترده

۱. مقدمه

مطالعهٔ فاز مایع اسپین کوانتومی [۱-۲] با مشخصاتی نظیر برانگیختگی‌های کسری و نظم توپولوژیکی [۳-۴] در فیزیک مادهٔ چگال دارای حائز اهمیت است. مفهوم نظم توپولوژی اولین بار در سامانه‌های هال کوانتومی کسری مطرح شد [۵-۶] و اخیراً این مفهوم به عایق‌های نواری توپولوژی و ابررساناهای غیرمتعارف توپولوژی گسترش یافته است [۷-۸]. حالت پایهٔ مدل کیتائوی شبکهٔ لانه زنبوری دو بُعدی، که به صورت دقیق قابل حل است، فاز مایع اسپینی کوانتومی توپولوژی است [۹]. شبه ذرات برانگیختهٔ حالت مایع اسپینی کوانتومی، مایوران‌های فرمیونی هستند که از آمار غیرآبلی تبعیت می‌کنند. به خاطر اهمیت مایوران‌های فرمیونی در محاسبات کوانتومی توپولوژی، مطالعهٔ مواد کیتائو مورد توجه فیزیکدانان قرار گرفته است [۹].

اثر متقابل برهم‌کنش‌های اسپین- مدار و کولنی همراه با اثر میدان بلوری در اکسید عناصر واسطهٔ لایه‌ای که اربیتال ۴d و ۵d آنها به صورت جزئی پر شده است، این دسته از مواد را در

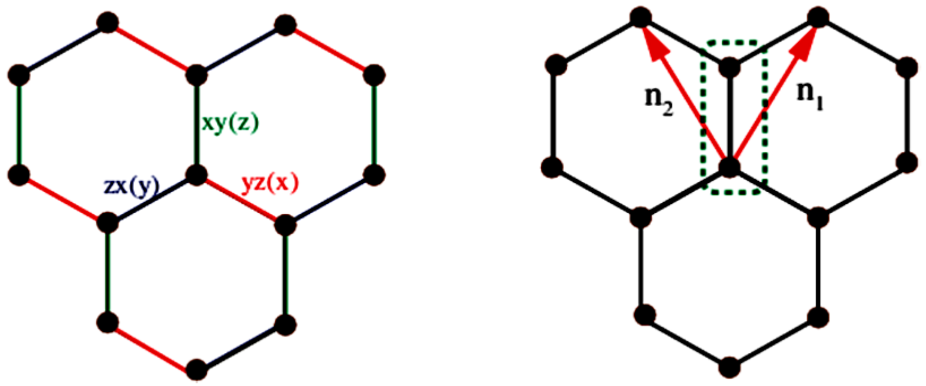
ردهٔ عایق‌های مات قرار می‌دهد [۱۰]. گسترش فضایی اربیتال d در این دسته از مواد نسبت به عایق‌های مات 3d بزرگ‌تر است، بنابراین برهم‌کنش کولنی ضعیف‌تر خواهد بود. اما برهم‌کنش اسپین- مدار در این عایق‌های مات جدید قوی‌تر است زیرا شدت بزرگی جفت‌شدگی اسپین- مدار متناسب با توان ۴ عدد اتمی است. درهم‌تنیدگی درجات آزادی اربیتالی و اسپینی به خاطر برهم‌کنش اسپین- مدار، منجر به شکافتگی اربیتال t_{2g} به حالت‌های کاملاً پر $J_{eff} = 3/2$ و نیمه‌پر $J_{eff} = 1/2$ می‌شود. شکافتگی اربیتال t_{2g} پهنای نوار انرژی را کاهش می‌دهد، بنابراین در حضور برهم‌کنش کولنی ضعیف هم تبهگنی کرامرز شکافته می‌شود و سامانه عایق مات خواهد شد [۱۰ و ۱۱]. این گونه سامانه‌ها که برهم‌کنش اسپین- مدار در آنها قوی است، به عنوان عایق‌های مات اسپین- مدار معروف هستند. در عایق‌های مات اسپین- مدار، درجات آزادی بار یخ می‌زند و فیزیک این گونه سامانه‌ها با درجات آزادی شبه اسپین $J_{eff} = 1/2$ توصیف می‌شوند. مدل اسپینی مؤثرِ عایق‌های مات اسپین- مدار، شامل برهم‌کنش‌های تبادلی هایزنبرگ همسانگرد و کیتائوی وابسته به نزدیک‌ترین پیوند هر جایگاه روی شبکهٔ لانه زنبوری است [۱۲]. رقابت بین برهم‌کنش‌های تبادلی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در مدل اسپینی مؤثر، ضامن پایداری فازهای مغناطیسی جالبی به ازای ثابت‌های جفت‌شدگی مختلف می‌شود. در موادی با برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ کوچک، حالت پایهٔ سامانه برای هر دو برهم‌کنش کیتائوی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس مایع اسپین کوانتومی Z_2 خواهد بود.

اکسید ایریدیت‌ها [۱۳ و۱۴] و کلرید روتنیم [۱۵-۱۶] موادی با ساختارهای لایه هستند که به ترتیب کاتیون‌های Ir^{4+} و Ru^{3+} لایه‌های دو بُعدی لانه زنبوری را تشکیل می‌دهند که در راستای عمود بر این صفحات به طور ضعیفی به یکدیگر جفت شده‌اند. در دماهای پایین، این مواد از نظر مغناطیسی آرایش منظمی دارند؛ هر چند مطالعات تجربی بیان‌گر این نکته است که این مواد در مجاورت فاز مایع اسپین کوانتومی قرار دارند [۱۷ و ۱۸]. هامیلتونی مؤثر اسپینی مناسب برای توصیف این سامانه‌های عایق مات اسپین- مدار، شامل برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ (J_H) و همچنین برهم‌کنش‌های وابسته به پیوند کیتائو (K) و غیرقطری (Γ) است که این مدل اسپینی به عنوان مدل هایزنبرگ- کیتائوی گسترده شناخته می‌شود. در حالت کلی می‌توان مدل اسپینی مؤثر را با استفاده از نظریهٔ اختلال مرتبهٔ دوم از مدل هابارد در حد هم بستهٔ قوی به دست آورد. برای کاهش انرژی سامانه در حد همبستهٔ قوی، در هر جایگاه یک الکترون قرار می‌گیرد؛ یعنی حد نیمه پر (n=۱).

به خاطر شباهت عایق‌های مات اسپین-مدار با کوپرات‌ها [۱۹-۲۰]، در این مقاله قصد داریم پایداری انواع مختلف گاف‌های ابررسانایی را در حد دور از حالتِ با پرشدگی نیمه‌پر از طریق تحلیل میدان میانگین بوزون کمکی مطالعه کنیم. مطالعات نظری روش میدان میانگین نشان می‌دهد که فاز ابررسانایی غیرمتعارف موج d- برای مدل آلاییدهٔ هایزنبرگ پادفرومغناطیسِ شبکهٔ لانه زنبوری پایدار خواهد شد [۲۱]. اخیراً بررسی گاف فاز ابررسانایی عایق‌های مات اسپین- مدار آلاییده شده بر حسب شدت نسبی برهم‌کنش‌های هایزنبرگ به کیتائو مورد توجه فیزیکدانان شاخهٔ مادهٔ چگال قرار گرفته است [۲۲-۲۶]. نتایج به دست آمده بیانگر این است که فاز ابررسانایی موج p- می‌تواند در این دسته از مواد کیتائو پایدار شود [۲۲-۲۵].

۲. مدل آلاییدهٔ هایزنبرگ- کیتائوی گسترده

در عایق‌های مات که برهم‌کنش کولنی موضعی نسبت به انرژی جنبشی و جفت‌شدگی اسپین- مدار غالب است، با برانگیختگی‌های بار مجازی که منجر به ایجاد حالت‌های میانی می‌شود انرژی سامانه کاهش می‌یابد. این افت و خیزهای مجازی، منجر به ایجاد برهم‌کنش‌های تبادلی بین اسپین‌ها می‌شود [۱۹]. در عایق‌های مات اسپین- مدار، اثر متقابل برهم‌کنش اسپین- مدار و اثرات میدان بلوری منجر به برهم‌کنش‌های تبادلی ناهمسانگرد می‌شود که مطالعهٔ فیزیک این سامانه‌ها را بسیار جالب کرده است. اخیراً مدل هایزنبرگ- کیتائوی گسترده برای مطالعهٔ فاز مایع اسپین کوانتومی احتمالی



(الف) (ب)

شکل ۱. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (الف) هندسهٔ شبکهٔ لانه زنبوری در فضای حقیقی با یاختهٔ واحد دو اتمی با بردارهای اصلی $\vec{n}_1$ و $\vec{n}_2$ را نشان می‌دهد و (ب) هر جایگاه از طریق سه پیوند غیرمعادل به نزدیک‌ترین همسایه‌اش روی شبکهٔ لانه زنبوری متصل شده است. رنگ‌های قرمز، آبی و سبز به ترتیب پیوندهای $\alpha\beta(\gamma)=yz(x),zx(y),xy(z)$ را مشخص می‌کنند که β,α و γ مؤلفه‌های اسپین برهم‌کنشی مربوط به هر پیوند را نشان می‌دهند.

در اکسید عناصر واسطهٔ ۴d و ۵d مطرح شده است. این مدل اسپینی نزدیک‌ترین همسایه روی شبکهٔ لانه زنبوری شامل سه جمله است: (۱) برهم‌کنش هایزنبرگ همسانگرد (H_J) (۲) برهم‌کنش کیتائو (H_K) (۳) برهم‌کنش غیرقطری متقارن (H_Γ):

$$H_{JK\Gamma} = H_J + H_K + H_\Gamma = \sum_{<ij>} [J_H(\vec{S}_i.\vec{S}_j - \frac{1}{4}n_i n_j) + K S_i^\gamma S_j^\gamma + \Gamma(S_i^\alpha S_j^\beta + S_i^\beta S_j^\alpha)], \qquad (۱)$$

در این هامیلتونی، $\vec{S}_i$ عملگر شبه اسپین $J_{eff}=1/2$ را روی جایگاه iام شبکهٔ لانه زنبوری نشان می‌دهد. همان طور که از شکل ۱. الف مشخص است، شبکهٔ لانه زنبوری دارای یاختهٔ واحد دو اتمی با دو بردار انتقال اصلی $\vec{n}_1=(1/2,\sqrt{3}/2)$ و $\vec{n}_2=(-1/2,\sqrt{3}/2)$ است. پارامترهای J_H، K و Γ به ترتیب شدت بزرگی برهم‌کنش‌های تبادلی هایزنبرگ، کیتائو و غیرقطری هستند. برهم‌کنش کیتائو، یک جفت‌شدگی شبه آیزینگ بین مؤلفهٔ $\gamma\in\{x,y,z\}$ام اسپین(S_i^γ) در هر پیوند در جهت γ است. در برهم‌کنش تبادلی غیرقطری، مؤلفه‌های اسپین مخالف γ با هم برهم‌کنش می‌کنند. به عنوان مثال، در جهت پیوند x در شکل ۱. ب اندیس‌های برهم‌کنش غیرقطری $\alpha,\beta\in\{y,z\}$ خواهند بود. محاسبات نظری روش ابتدا به ساکن نشان می‌دهد که بزرگی برهم‌کنش‌های تبادلی کیتائو و غیرقطری در $\alpha-RuCl_3$ تقریباً از مرتبهٔ یکسانی هستند و به ترتیب فرومغناطیس و پادفرمغناطیس هستند [۱۶].

برای مطالعهٔ تقارن گاف‌های ابررسانایی ممکن در عایق‌های مات اسپین- مدار به خاطر اضافه کردن حامل‌های بار اضافی، نیاز است که از مدل $t-JK\Gamma$ همانند زیر شروع کنیم:

$$H_{tJK\Gamma} = H_{kin} + H_{JK\Gamma}, \qquad (۲)$$

در این معادله انرژی جنبشی، H_{kin}، عبارت است از:

$$H_{kin} = -t_\circ\mathbb{P}\sum_{<ij>,\sigma}\left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + H.c.\right)\mathbb{P} - \mu\sum_{i,\sigma}c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}, \qquad (۳)$$

جملهٔ اول، پرش مستقل از اسپین الکترون‌ها را به نزدیک‌ترین همسایه با بزرگی t_o نشان می‌دهد. با تنظیم پتانسیل شیمیایی μ_o در جملهٔ دوم، می‌توان غلظت بار متناظر با مقدار آلاییدگی را کنترل کرد. با توجه به این که برهم‌کنش کولنی روی جایگاهی در سامانه‌های عایق مات قوی است، عملگر تصویر گوتزویلر قید این که هیچ جایگاهی با دو الکترون اشغال نشود را تحمیل می‌کند که انرژی سامانه افزایش نیابد. عملگرهای $c_{i\sigma}^\dagger$ و $c_{i\sigma}$ به ترتیب عملگرهای خلق و فنای یک الکترون با اسپین $\sigma=\uparrow,\downarrow$ را در جایگاه iام نشان می‌دهند.

۳. فرمول‌بندی بوزون کمکی برای یک عایق مات اسپین- مدار آلاییده

در این مقاله برای اعمال تصویر گوتزویلر، بدین معنی که در فضای هیلبرت هیچ جایگاهی به صورت دوگانه اشغال نشده باشد، از رهیافت بوزون کمکی $U(۱)$ استفاده خواهیم کرد [۲۷–۲۸]. در این رهیافت، فضای هیلبرت الکترون‌ها متناظر با عملگرهای $c_{i\sigma}^{\dagger}$ و $c_{i\sigma}$ را با درجات آزادی فرمیونی $(f_{i\sigma})$، هولون بوزونی (b_i) و دُبلون (d_i) جایگزین می‌کنیم. با اعمال قید موضعی همانند:

$$\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + b_i^{\dagger} b_i + d_i^{\dagger} d_i = ۱. \qquad (۴)$$

سعی می‌کنیم که فضای هیلبرت افزایش یافته را کاهش دهیم و حالت‌های غیرفیزیکی را حذف کنیم. با اعمال تصویر عملگر گوتزویلر، عملگرهای دُبلون را که با خلق جایگاه‌های دوگانهٔ اشغال شده انرژی سامانه را افزایش می‌دهند، از محاسبات حذف می‌کنیم. در این رهیافت، عملگرهای خلق و فنای الکترون‌ها را همانند زیر با عملگرهای فرمیونی و بوزونی جایگزین می‌کنیم:

$$c_{i\sigma} \to b_i^{\dagger} f_{i\sigma}, \quad c_{i\sigma}^{\dagger} \to f_{i\sigma}^{\dagger} b_i. \qquad (۵)$$

در ادامه فرض می‌کنیم که برانگیختگی‌های بار بوزونی (هولون‌ها) چگالیده شده‌اند ($\langle b^{\dagger} b \rangle = \delta$). بنابراین قید موضعی فرمیون‌ها در رابطهٔ (۴)، به $\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} = ۱ - \delta$ تبدیل می‌شود، که در این رابطه δ مقدار آلایش حفره را نشان می‌دهد.

بنابراین در رهیافت بوزون کمکی U(۱)، انتگرال پرش $t = t_۰ \delta$ و پتانسیل شیمیایی $\mu = \delta \mu_۰$ بازبهنجاریده می‌شود و انرژی جنبشی در معادلهٔ (۳) را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H_{kin} = -t \sum_{<ij>,\sigma} (f_{i,\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + H.c.) - \mu \sum_{i,\sigma} f_{i,\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma}, \qquad (۶)$$

همچنین در این روش، عملگر شبه اسپین $S = ۱/۲$ در معادلهٔ $H_{JK\Gamma}$ با یک عملگر دوتایی شامل دو فرمیون کمکی همانند $S_i^{\gamma} = (۱/۲) f_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma} f_{i\beta}$ جایگزین می‌کنیم و با تعریف عملگرهای اسپین- تک‌تایی و -سه‌تایی روی پیوندهایِ نزدیک‌ترین همسایهٔ شبکهٔ لانه زنبوری:

$$\begin{aligned} s_{ij} &= \frac{۱}{\sqrt{۲}} (f_{i\uparrow} f_{j\downarrow} - f_{i\downarrow} f_{j\uparrow}), \\ t_{ij,x} &= \frac{۱}{\sqrt{۲}} (- f_{i\uparrow} f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow} f_{j\downarrow}), \\ t_{ij,y} &= \frac{i}{\sqrt{۲}} (f_{i\uparrow} f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow} f_{j\downarrow}), \\ t_{ij,z} &= \frac{۱}{\sqrt{۲}} (f_{i\uparrow} f_{j\downarrow} + f_{i\downarrow} f_{j\downarrow}), \end{aligned} \qquad (۷)$$

قسمت برهم‌کنش هامیلتونیِ $t - JK\Gamma$ در راستای نزدیک‌ترین همسایه شکل۱. ب را می‌توان به دو قسمت برهم‌کنش تک‌تایی و -سه‌تایی همانند زیر در تقریب میدان میانگین نوشت:

$$\begin{aligned} & -(J_H + \frac{K}{۴}) \langle s_{ij} \rangle s_{ij}^{\dagger} - \frac{K}{۴} \langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,x}^{\dagger} \\ & + \frac{K}{۴} \langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,y}^{\dagger} + \frac{K}{۴} \langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,z}^{\dagger} \\ & + \frac{\Gamma}{۲} \langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,y}^{\dagger} + \frac{\Gamma}{۲} \langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,z}^{\dagger} \\ & \qquad + H.c.(x - link), \\ & -(J_H + \frac{K}{۴}) \langle s_{ij} \rangle s_{ij}^{\dagger} + \frac{K}{۴} \langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,x}^{\dagger} \\ & - \frac{K}{۴} \langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,y}^{\dagger} + \frac{K}{۴} \langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,z}^{\dagger} \\ & - \frac{\Gamma}{۲} \langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,z}^{\dagger} - \frac{\Gamma}{۲} \langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,x}^{\dagger} \\ & + H.c.(y - link), \\ & -(J_H + \frac{K}{۴}) \langle s_{ij} \rangle s_{ij}^{\dagger} + \frac{K}{۴} \langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,x}^{\dagger} \\ & + \frac{K}{۴} \langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,y}^{\dagger} - \frac{K}{۴} \langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,z}^{\dagger} \\ & + \frac{\Gamma}{۲} \langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,x}^{\dagger} + \frac{\Gamma}{۲} \langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,y}^{\dagger} + H.c.(z - link), \end{aligned}$$

هامیلتونیِ $t - JK\Gamma$ را می‌توان در تقریب میدان میانگین با جایگزین کردن عملگرهای اسپین- تک‌تایی و -سه‌تایی با مقدار چشمداشتی‌شان همانند:

$$\begin{aligned} \Delta_{\gamma} &= \frac{۱}{\sqrt{۲}} \langle s_{ij} \rangle, \\ d_{\gamma}^{\nu} &= \frac{۱}{\sqrt{۲}} \langle t_{ij,\gamma} \rangle, \end{aligned} \qquad (۸)$$

به دست آورد. در این روابط، اندیس‌های γ و ν به ترتیب جهت پیوند در راستای نزدیک‌ترین همسایه روی شبکهٔ لانه زنبوری و مؤلفهٔ میدان میانگین پارامتر نظم ابررسانایی- سه‌تایی را نمایش می‌دهند.

تبدیلات فوریهِ عملگرهای فرمیونی مربوط به دو زیر شبکهٔ

مختلف یاخته واحد شبکهٔ لانه زنبوری (شکل ۱. الف) به صورت زیر داده می‌شود:

$$f_{i,\rho,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q} f_{q,\rho,\sigma} e^{i\vec{q}.\vec{r}_i},$$

در این رابطه $\vec{r}_i$ بردار انتقال اصلی شبکهٔ براوه مثلثی و شاخص $\rho = 1,2$ دو زیرشبکهٔ مختلف در هر یاختهٔ واحد را نشان می‌دهد. با استفاده از این تبدیلات فوریه، هامیلتونی بوگلیوبوف- دی ژن به صورت زیر داده می‌شود:

$$\begin{aligned} H_{MF} = \sum_{q,\sigma} [& -t(q) f^{\dagger}_{q,1,\sigma} f_{q,2,\sigma} + \Delta(q) \\ & (-f^{\dagger}_{q,1,\uparrow} f^{\dagger}_{-q,2,\downarrow} + f^{\dagger}_{q,1,\downarrow} f^{\dagger}_{-q,2,\uparrow}) \\ & + d^{x}(q)(-f^{\dagger}_{q,1,\uparrow} f^{\dagger}_{-q,2,\uparrow} + f^{\dagger}_{q,1,\downarrow} f^{\dagger}_{-q,2,\downarrow}) \\ & + i d^{y}(q)(-f^{\dagger}_{q,1,\uparrow} f^{\dagger}_{-q,2,\uparrow} + f^{\dagger}_{q,1,\downarrow} f^{\dagger}_{-q,2,\downarrow}) \\ & + d^{z}(q)(f^{\dagger}_{q,1,\uparrow} f^{\dagger}_{-q,2,\downarrow} + f^{\dagger}_{q,1,\downarrow} f^{\dagger}_{-q,2,\uparrow}) \\ & + H.c.] - \mu \sum_{q,\rho,\sigma} f^{\dagger}_{q,\rho,\sigma} f_{q,\rho,\sigma} . \end{aligned} \quad (9)$$

در این رابطه:

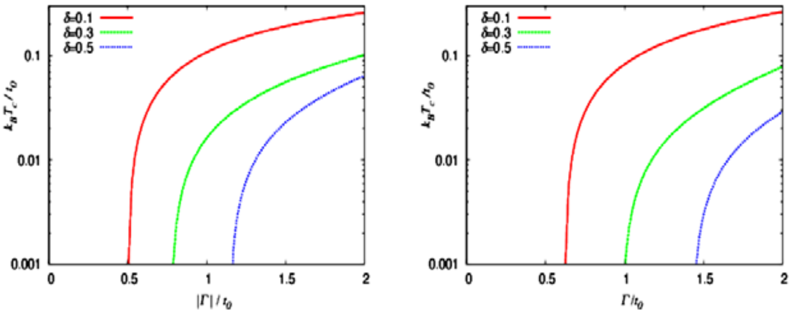
$$\begin{aligned} t(q) &= t(1 + e^{iq.n_1} + e^{iq.n_2}), \\ \Delta(q) &= -(J_H + \frac{K}{4})\Delta_z - (J_H + \frac{K}{4}) \Delta_x e^{iq.n_1} \\ & \quad - (J_H + \frac{K}{4})\Delta_y e^{iq.n_2}, \\ d^{x}(q) &= (-\frac{K}{4} d^{x}_{z} - \frac{\Gamma}{2} d^{y}_{z}) + \frac{K}{4} d^{x}_{x} e^{iq.n_1} \\ & \quad + (-\frac{K}{4} d^{x}_{y} + \frac{\Gamma}{2} d^{z}_{y}) e^{iq.n_2}, \\ d^{y}(q) &= (\frac{K}{4} d^{y}_{z} + \frac{\Gamma}{2} d^{x}_{z}) + (\frac{K}{4} d^{y}_{x} + \frac{\Gamma}{2} d^{z}_{x}) e^{iq.n_1} \\ & \quad - \frac{K}{4} d^{y}_{y} e^{iq.n_2}, \\ d^{z}(q) &= \frac{K}{4} d^{z}_{z} - (\frac{K}{4} d^{z}_{x} + \frac{\Gamma}{2} d^{y}_{x}) e^{iq.n_1} \\ & \quad - (\frac{K}{4} d^{z}_{y} - \frac{\Gamma}{2} d^{x}_{y}) e^{iq.n_2}, \end{aligned} \quad (10)$$

با توجه به این که پارامتر نظم ابررسانایی در دمای گذار بحرانی صفر می‌شود، بنابراین معادلات گاف خطی را می‌توان با بسط معادلات خود سازگار برحسب پارامترهای نظم اسپین- تک‌تایی و- سه‌تایی به دست آورد [۲۹]. در ادامه برای تعیین دمای گذار فاز ابررسانایی، ماتریس پایداری پارامترهای ابررسانایی مختلف را که از معادلات گاف خطی محاسبه شده‌اند را قطری می‌کنیم. دمای گذار بحرانی کانال‌های مختلف ابررسانایی را می‌توان با محاسبهٔ بزرگ‌ترین دمایی که یکی از ویژه مقادیر ماتریس پایداری معادل با یک شود به دست آورد. محاسبات‌مان پایداری گاف ابررسانایی موج - d را برای مدل هایزنبرگ همسانگرد تنها روی شبکه لانه زنبوری نشان می‌دهد که این نتیجه با کارهای قبلی سازگار است [۲۱]. همچنین برهم‌کنش تبادلی کیتائو منجر به پایداری فاز ابررسانایی موج -p به ازای $J_H < 1/2$ در مدل آلاییده هایزنبرگ- کیتائو می‌شود، که با نتایج گزارش شده در مرجع [۲۲] هم‌خوانی کامل دارد.

۴. سیمای فاز ابررسانایی

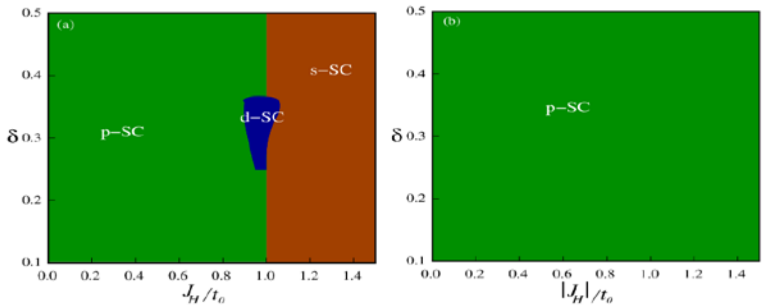
برای محاسبهٔ پارامترهای نظم ابرسانایی به ازای مقادیر مختلفِ شدت‌های برهم‌کنشِ تبادلی در مدل آلای‌یده هایزنبرگ- کیتائوی گسترده نیاز است ابتدا با انتخاب مقادیر اولیهٔ تصادفی برای پارامترهای نظم، هامیلتونی میدان میانگین را قطری کنیم و مقادیر چشمداشتی در روابط خودسازگار (۸) را محاسبه کنیم. با جایگذاری دوبارهٔ این مقادیر جدید به دست آمده در ماتریس هامیلتونی، سعی می‌کنیم با تکرار این روند مقدار پارامتر نظم را با استفاده از روش خودسازگار به دست آوریم.

نظریهٔ پیوند ظرفیتی تشدیدی پیش‌بینی می‌کند که در سامانه‌های عایق مات قبل از گذار به فاز ابررسانایی غیرمتعارف یک فاز میانی مایع اسپینی به ازای مقادیر آلایش کم تشکیل می‌شود. برای مطالعهٔ فاز مایع اسپینی در حد پرشدگی نیمه پر نیاز است که از یک روش بوزونی متفاوت استفاده کرد [۲۴]. بنابراین در این مقاله برای مطالعهٔ فاز ابررسانایی، مواردی با آلایش‌های کم را صرف نظر خواهیم کرد. در ضمن مطالعات اخیر نشان می‌دهد که بزرگی شدت برهم‌کنش‌های تبادلیِ مدل هایزنبرگ- کیتائو گسترده به تغییرات ساختار شبکه حساس است [۳۰-۳۲] و برهم‌کنش‌های هایزنبرگ و کیتائو در این دسته از مواد به ترتیب از نوع پادفرومغناطیس و فرومغناطیس



(ب) (الف)

شکل ۲. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) دمای گذار، $k_B T_c \ / \ t_o$، کانال ابررسانایی- سه‌تایی به عنوان تابعی از شدت برهم‌کنش غیرقطری، $\Gamma \ / \ t_o$، برای آلایش‌های مختلف δ، در $J_H \ = \ K \ = \ ۰$. (الف) برای $\Gamma \ > \ ۰$ و (ب) برای $\Gamma \ < \ ۰$.



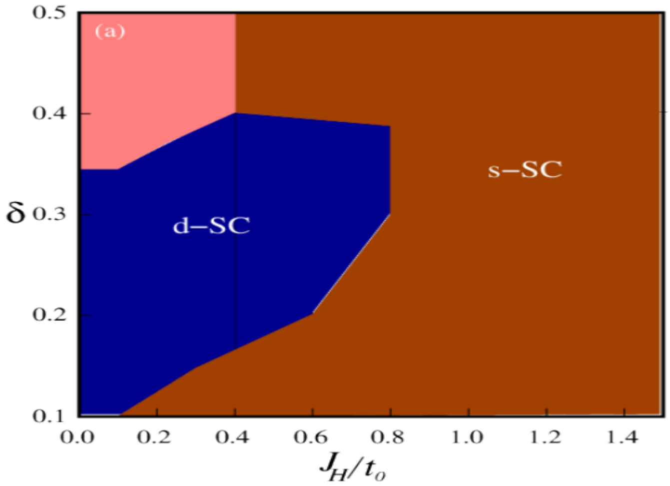
(ب) (الف)

شکل ۳. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) سیمای فاز ابررسانایی مدل کیتائو- هایزنبرگ گسترده با مقیاس $K \ = \ -\Gamma \ = \ -t_o$ با استفاده از روش میدان میانگین به عنوان تابعی از (الف) برهم‌کنش فرومغناطیس هایزنبرگ $J_H \ < \ ۰$ در واحد انتگرال پرش t_o و آلاییدگی δ و (ب) برهم‌کنش پادفرومغناطیس هایزنبرگ $J_H \ > \ ۰$ در واحد انتگرال پرش t_o و آلاییدگی δ.

هستند؛ در حالی که برهم‌کنش تبادلی غیرقطری می‌تواند از هر دو نوع پادفرومغناطیس و فرومغناطیس باشد.

سیمای فاز ابررسانایی را می‌توان با مقایسهٔ دمای گذار بحرانی مربوط به کانال‌های اسپین- تک‌تایی و -سه‌تایی مختلف به دست آورد. همان طور که از معادلهٔ مربوط به گاف تک‌تایی در رابطهٔ (۱۰) مشخص است، سهم برهم‌کنش کیتائو فقط بازبهنجارش شدت برهم‌کنش هایزنبرگ است. بنابراین گاف ابررسانایی تک‌تایی پایدار برای مدل هایزنبرگ- کیتائو گسترده باید موج-s یا موج –d باشد که تقارن وارون زمانی در برای حالت موج –d شکسته است. محدودهٔ پایداری حالت‌های تک‌تایی به شدت برهم‌کنش و مقدار آلاییدگی بستگی دارد [۲۱]. قابل ذکر است که رفتار دمای بحرانیِ این کانال‌های اسپین- تک‌تایی بر حسب پارامترهای هامی‌لتونی مشابه نتایج گزارش شده در مرجع [۲۱] خواهد بود. برای بررسی اهمیت برهم‌کنش تبادلی غیرقطری در پایداری فاز ابررسانایی اسپین- سه‌تایی، دمای بحرانیِ شروع این فاز را بر حسب شدت برهم‌کنش غیرقطری Γ برای آلایش‌های مختلف در شکل ۲ رسم کرده‌ایم. این نتیجه به صورت کلی بیان‌گر این است که با کنترل مقیاس $\Gamma \ / \ t_o$ می‌توان در هر دو حالت با برهم‌کنش‌های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، دمای گذار بحرانی کانال -سه‌تایی را قویاً تحت تاثیر قرار داد.

در ادامه برای مطالعهٔ سیمای فاز ابررسانایی، با ثابت در نظر گرفتن مقدار برهم‌کنش‌های کیتائو و غیرقطری همانند $K \ = -t_o$ و $\Gamma \ = \ t_o$، تعداد پارامترهای هامیلتونی را کاهش می‌دهیم. سیمای فاز در شکل ۳. الف با استفاده از تحلیل میدان میانگین به عنوان تابعی از شدت جفت‌شدگی هایزنبرگ



شکل ۴. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) سیمای فاز ابررسانایی مدل کیتائو- هایزنبرگ گسترده با برهم‌کنش‌های تبادلی در مقیاس $K = -\Gamma = t_o$ با استفاده از روش میدان میانگین به عنوان تابعی از برهم‌کنش هایزنبرگ پادفرومغناطیس $(J_H > ۰)$ در واحد انتگرال پرش (t_o) و مقدار آلاییدگی (δ).

فرومغناطیس $(J_H < ۰)$ و مقدار آلاییدگی δ به دست آورده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که به ازای همهٔ مقادیر شدت برهم‌کنش تبادلی و آلاییدگی به ترتیب در بازهٔ $۰ < J_H < ۱/۵$ و $۰/۱ < \delta < ۰/۵$ ابررسانای موج p- پایدار خواهد بود. هر دو برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ و کیتائو فرومغناطیس به پایداری فاز اسپین- سه‌تایی کمک می‌کند و بنابراین هیچ گذار فازی بین کانال‌های اسپین- تک‌تایی و –سه‌تایی مشاهده نمی‌شود. برهم-کنش تبادلی هایزنبرگ فرومغناطیس، موجب قطبیده شدن حالت‌های الکترونی می‌شود که این امر موجب تشکیل جفت-های کوپر در کانال –سه‌تایی خواهد شد.

در شکل ۳. ب کانال چگالش غالب به عنوان تابعی از برهم‌کنش هایزنبرگ پادفرومغناطیس $(J_H < ۰)$ و آلایش محاسبه شده است. در این حالت، یک گذار فاز بین کانال‌های اسپین- تک‌تایی و –سه‌تایی در شدت برهم‌کنش‌های نسبی $J_H / |K| = J_H / \Gamma \simeq ۱$ وجود دارد. فاز ابررسانایی موج p- به ازای $J_H < t_o$ در حضور برهم‌کنش هایزنبرگ پایدار است. از آنجایی که برهم‌کنش‌های کیتائو و غیرقطری در اکسید ایریدیت‌ها و $\alpha-RuCl_۳$ غالب هستند، بنابراین پایداری این نوع جفت‌شدگی را می‌توان برای زمانی که این مواد با حفره آلاییده شود پیش‌بینی کرد. فاز تک‌تایی موج d-، با تقارن وارون زمانی شکسته شده، در محدودهٔ حول و حوش مقدار آلاییدگی $\delta \simeq ۰/۳$ و شدت جفت‌شدگی $J_H \simeq t_o$ بین دو فازهای موج p- و موج s- پایدار خواهد شد. همچنین به ازای برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ با شدت $J_H > t_o$ برای همه مقادیر آلایش، ابررسانای متعارف موج s- پایدار می‌شود. ناپایداری ابررسانایی اسپین- سه‌تایی به اسپین- تک‌تایی به خاطر غالب شدن افت و خیزهای پادفرومغناطیس است که از برهم‌کنش هایزنبرگ ناشی می‌شود. ناحیهٔ پایداری ابررسانایی موج p- در مقایسه با سیمای فاز مدل هایزنبرگ- کیتائو به دست آمده در مرجع‌های [۲۲-۲۳] گسترهٔ بیشتری دارد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که برهم‌کنش تبادلی غیرقطری نقش مهمی را در گسترش ناحیهٔ پایداری حالت اسپین- سه‌تایی بازی می-کند.

در این قسمت به بررسی سیمای فاز ابررسانایی مدل آلاییدهٔ $JK\Gamma$ با برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ پادفرومغناطیس و همچنین کیتائو و غیرقطری با مقادیر ثابت همانند $K = -\Gamma = t_o$ متمرکز می‌شویم. سیمای فاز این حالت در شکل ۴ نشان داده شده است، که برخلاف دو سیمای فاز قبلی ناحیهٔ با پایداری

موج p– وجود ندارد. این نتیجه بیان‌گر این است که پایداری فاز ابررسانایی اسپین– سه‌تایی در مدل آلاییده هایزنبرگ– کیتائو گسترده، تنها از افت و خیزهای اسپینی ناشی از برهم‌کنش‌های تبادلی هایزنبرگ و کیتائو فرومغناطیس ناشی می‌شود و برهم‌کنش تبادلی غیرقطری فرومغناطیس به تنهایی نمی‌تواند موجب پایداری فاز ابررسانایی موج p– در مواد عایق مات اسپین– مدار شود.

۵. نتیجه‌گیری

ترکیباتی نظیر اکسید ایریدیم و $\alpha - RuCl_۳$، عایق‌های مغناطیسی با ساختار لانه زنبوری هستند. به خاطر اثر متقابل همبستگی الکترون و جفت‌شدگی اسپین– مدار در این دسته از مواد، هامیلتونی مؤثر اسپینی این گونه سامانه‌ها شامل برهم‌کنش‌های تبادلی کیتائو و غیرقطری وابسته به پیوند است. به خاطر شباهت مواد کیتائو با کوپرات‌ها، مطالعهٔ سیمای فاز ابررسانایی مدل آلاییدهٔ هایزنبرگ– کیتائو گسترده روی شبکهٔ لانه زنبوری با استفاده از روش میدان میانگین بوزون کمکی U(۱) مورد علاقهٔ ما بوده است. بررسی سیمای فاز مدل آلاییدهٔ $t - JK\Gamma$ نشان می‌دهد که برهم‌کنش‌های تبادلی هایزنبرگ و کیتائوی فرومغناطیس نقش مهمی را در پایداری فاز موج p– در مواد کیتائو دارند. همچنین نتایج به دست آمده بیانگر این است که برهم‌کنش تبادلی غیرقطری، ناحیهٔ پایداری ابررسانای اسپین– سه‌تایی را افزایش می‌دهد؛ در حالی که برهم‌کنش تبادلی غیرقطری فرومغناطیس در مقابل برهم‌کنش‌های هایزنبرگ و کیتائوی پادفرومغناطیس به تنهایی نمی‌تواند پایداری فاز موج p– را تضمین کنند. ابررساناهای توپولوژی را که با حالت‌های مرزی و ناورداهای توپولوژی غیرصفر توصیف می‌شوند، غالباً می‌توان در ابررساناهای اسپین– سه‌تایی مشاهده کرد. قابل ذکر است که وجود مایوران‌های فرمیونی در ابررساناهای توپولوژی، مطالعهٔ مواد کیتائو را مهیج و جذاب کرده است [۳۳-۳۴].

مراجع

1. P Fazekas, "*Lecture note on electron correlation and magnetism*". London, World Scientific (1999).
2. L Balents, *Nature.* **464** (2010) 199.
3. X-G Wen and Q Niu, *Phys. Rev.* B **41** (1990) 9377.
4. X-G Wen, *Adv. Phys*. **44** (1995) 405.
5. D C Tsui, H L Stormer, and A C Gossard, *Phys. Rev. Lett*. **48** (1982) 1559.
6. F D M Haldane, *Phys. Rev. Lett*. **51** (1983) 605.
7. M Z Hasan and C L Kane, *Rev. Mod. Phys*. **82** (2010) 3045.
8. X-L Qi and S-C Zhang, *Rev. Mod. Phys*. **83** (2011) 1057.
9. A Kitaev, *Ann. Phys*. **321** (2006) 2.
10. W Witczak-Krempa, G Chen, Y B Kim, and L Balents, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys*. **5** (2014) 57.
11. G Cao and P Schlottmann, *Rep. Prog. Phys*. **81** (2018) 042502.
12. G Jackeli and G Khaliullin, *Phys. Rev. Lett*. **102** (2009) 017205.
13. M Hermanns, I Kimichi, and J Knolle, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys*. **9** (2018) 17.
14. H Takagi, T Takayama, G Jackeli, G Khaliullin, and S E Nagler, *Nature Reviews Physics*. **1** (2019) 264.
15. K W Plumb, J P Clancy, L J Sandilands, V V Shankar, Y F Hu, K S Burch, H Y Kee, and Y J Kim, *Phys. Rev*. B **90** (2014) 041112.
16. S M Winter, Y Li, H O Jeschke, and R Valenti, *Phys. Rev.* B **93** (2016) 214431.
17. R Yadav, R Ray, M S Eldeeb, S Nishimoto, L Hozoi, and J van den Brink, *Phys. Rev. Lett.* **121** (2018) 197203.
18. A Banerjee, J Yan, J Knolle, C A Bridges, M B Stone, M D Lumsden, D G Mandrus, D A Tennant, R Moessner, and S E Nagler, *Science*. **356** (2017) 1055.
19. P A Lee, N Nagaosa, and X-G Wen, *Rev. Mod. Phys*. **78** (2006) 17.
20. K L Hur and T M Rice, *Ann. Phys.* **324** (2009) 1452.
21. A M Black-Schaffer and S Doniach, *Phys. Rev.* B **75** (2007) 134512.
22. T Hyart, A R Wright, G Khaliullin, and B Rosenow, *Phys. Rev.* B **85** (2012) 140510.
23. D D Scherer, M M Scherer, G Khaliullin, C Honerkamp, and B Rosenow, *Phys. Rev*. B **90** (2014) 045135.
24. Y-Z You, I Kimchi, and A Vishwanath, *Phys. Rev*. B **86** (2012) 085145.
25. J Schmidt, D D Scherer, and A M Black-Schaffer, *Phys. Rev.* B **97** (2018) 014504.
26. M H Zare, M Biderang, and A Akbari, *Phys. Rev.* B **96** (2017) 205156.
27. G Baskaran, Z Zou, and P W Anderson, *Solid State Commun.* **63** (1987) 973.
28. G Kotliar, *Phys. Rev.* B **37** (1988) 3664.

29. M Sigrist and K Ueda, *Rev. Mod. Phys.* **63** (1991) 239.
30. V M Katukuri, S Nishimoto, V Yushankhai, A Stoyanova, H Kandpal, S Choi, R Coldea, I Rousochatzakis, L Hozoi, and J van den Brink, *New J. Phys.* **16** (2014) 013056.
31. R Yadav, N A Bogdanov, V M Katukuri, S Nishimoto, J van den Brink, and L Hozoi, *Sci. Rep.* **6** (2016) 37925.
32. H-S Kim and H-Y Kee, *Phys. Rev.* B **93** (2016) 155143.
33. A F Volkov, A Anishchanka and K B Efetov, *Phys. Rev.* B **73** (2015) 104412.
34. C W J Beenakker, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **4** (2013) 113.