

## خواص مغناطیسی عایق‌های توپولوژیکی مغناطیسی سه بعدی: اثرات انحنای شش گوشه

جهانفر ابویی، مریم مقرر جهرمی و سعید عابدین پور

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۱/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۶/۰۲/۲۵)

### چکیده

در این مقاله خواص مغناطیسی عایق‌های توپولوژیکی سه بعدی آلابیده با اتم‌های مغناطیسی بررسی شده است. قفل شدگی اسپین-مدار الکترون‌های سطحی سبب بروز رفتارهای مغناطیسی جالبی می‌شود که در سیستم‌های متعارف بدون برهم‌کنش اسپین-مدار قابل مشاهده نیست. از جمله این خصوصیات می‌توان به وابستگی شدید دمای گذار فرومغناطیس-پارامغناطیس سیستم به پارامترهای مختلف آن اشاره کرد. در این مقاله اثرات انحنای شش گوشه را با استفاده از رهیافت میدان متوسط، روی پارامتر نظم، دمای بحرانی، و پذیرفتاری مغناطیسی سیستم مطالعه کرده‌ایم

واژه‌های کلیدی: عایق‌های توپولوژیکی مغناطیسی، انحنای شش گوشه

### ۱. مقدمه

می‌شود که این حالت‌های سطحی در برابر اختلال‌های آرامی که به سیستم وارد می‌شود، مادامی که تقارن محافظت کننده از آن از بین نرود، مقاوم باشند.

حالت‌های سطحی عایق‌های توپولوژیکی سه بعدی، توسط معادله نسبیتی دیراک بدون جرم دوبعدی توصیف می‌شود [۱]. خاصیت جالب توجه عایق‌های توپولوژیکی در مقایسه با مواد دیراک گونه دیگر، تعداد فرد نقاط دیراک در هر یک از سطوح این سیستم‌هاست. این خاصیت از این نظر غیر معمول است که تا قبل از پیدایش این مواد تصور بر این بود که یک مدل شبکه‌ای دو بعدی ناوردای زمان نمی‌تواند تعداد فردی نقطه

عایق‌های توپولوژیکی دسته‌ای از مواد الکترونیکی هستند که حجم آنها عایق، ولی سطحشان رسانا است [۱-۳]. در این مواد حالت‌های حجمی گاف‌دار بوده ولی حالت‌های سطحی بدون گاف هستند که این بسته شدن گاف در سطح، توسط تقارنی از سیستم، همچون تقارن وارونی زمانی محافظت می‌شود. به عنوان نمونه‌ای از این مواد می‌توان به ترکیبات  $Bi_2Se_3$  اشاره کرد که گاف حالت‌های حجمی در آنها  $0.3$  الکترون ولت بوده و تنها یک مخروط دیراک در سطحشان مشاهده می‌شود [۴]. حضور برهم‌کنش قوی اسپین مدار در این سیستم‌ها سبب

دیراک داشته باشد. برای مثال گرافین که مدلی دو بعدی روی شبکه لانه زنبوری است، دو نقطه دیراک اسپین تبهگن دارد. در واقع در عایق‌های توپولوژیکی سه بعدی، نقاط دیراک به شکل فضایی از هم جدا شده و در دو سطح متقابل ماده قرار می‌گیرند. این جدایی فضایی سبب مقاوم بودن حالت‌های سطحی بدون گاف در برابر اختلال‌های کوچک می‌شود.

از طرف دیگر بهترین روش برای آشکار کردن خواص توپولوژیکی سیستم، مستلزم این است که بتوان به گونه‌ای تقارن وارونی زمانی را از بین برد. همچنین لازمه کاربرد پذیری این موارد در ساخت ادوات الکترونیکی، اغلب ایجاد گاف انرژی کوچکی در حالت‌های سطحی آنهاست. از این رو شناخت اختلالاتی که بتوانند در حالت‌های سطحی گاف انرژی باز کنند، و بررسی تأثیر این گاف بر خصوصیات مختلف سیستم حایز اهمیت است. راه‌های مختلفی برای باز شدن گاف انرژی در حالت‌های سطحی هلیکال وجود دارد. ساده‌ترین آنها شاید اعمال یک میدان مغناطیسی عمود بر سطح این سیستم باشد که در این حالت بازشدگی گاف به واسطه جمله زیمان صورت می‌گیرد. این میدان مغناطیسی البته اثرات اوربیتالی نیز به همراه دارد که اغلب قابل چشم پوشی نیست. روش دیگر برای گاف‌دار کردن حالت‌های سطحی، آلابیدن عایق توپولوژیکی با یک ماده مغناطیسی است. میزان بازشدگی گاف انرژی به درصد ناخالصی مغناطیسی افزوده شده به سیستم بستگی خواهد داشت. برای حالتی که ۲۵ درصد آهن به  $Bi_2Se_3$  اضافه شود، گافی به اندازه ۶۰ میلی‌الکترون‌ولت در طیف حالت‌های سطحی آن مشاهده شده است [۵]. از وابستگی گاف انرژی به میزان اتم‌های مغناطیسی تزریق شده به سیستم، واضح است که گاف القایی تنظیم پذیر است. این نکته اهمیت بسزایی در تحقیقات عملی دارد.

در حضور اتم‌های مغناطیسی، الکترون‌های دیراک عایق‌های توپولوژیکی با آنها برهم‌کنش تبادلی خواهند داشت که سبب به وجود آمدن برهم‌کنش غیر مستقیم RKKY بین اتم‌های مغناطیسی می‌شود [۶-۷]. برهم‌کنش اسپین-مدار الکترون‌های هلیکال در مواد توپولوژیکی سبب می‌شود برهم‌کنش RKKY

شکل ساده‌ای نداشته باشد [۸-۹]. این برهم‌کنش‌ها می‌تواند منجر به نظم مغناطیسی در سطح عایق توپولوژیکی شود. با بررسی این نظم‌ها مشخص شده است که در عایق‌های توپولوژیکی برخلاف مواد مغناطیسی شناخته شده، دمای بحرانی سطحی نسبت به دمای بحرانی حجمی مقدار بزرگ‌تری دارد [۱۰]. این در حالی است که مثلاً در مدل شناخته شده هایزنبرگ دو بعدی، نظم مغناطیسی تنها در دمای صفر مشاهده شده ولی در سه بعد برای دماهای کمتر از یک دمای بحرانی، سیستم منظم است.

در سال‌های اخیر آزمایش‌های طیف سنجی نورگسیل با تفکیک زاویه‌ای (ARPES) نشان داده است که سطح مقطع فرمی حالت‌های توپولوژیکی محافظت شده در عایق‌های توپولوژیکی می‌تواند با افزایش انرژی فرمی در بالای نقطه دیراک از حالت دایروی به شکل برف دانه‌ای تغییر یابد [۵، ۱۱-۱۲]. سطح فرمی ناهمسانگرد مشاهده شده در آزمایش‌ها را می‌توان با در نظر گرفتن مراتب بالاتر اختلال در نظریه  $k.p$  به دست آورد. این انحنا شش گوشه در انرژی‌های فرمی بالا، بر خواص مغناطیسی عایق‌های توپولوژیکی سه بعدی اثر می‌گذارد. در واقع انحنا شش گوشه همانند یک میدان مغناطیسی مؤثر وابسته به تکانه است که عمود بر سطح بوده و سبب ایجاد برهم‌کنش RKKY وابسته به جهت بلورشناسی می‌شود. لذا اثر متقابل برهم‌کنش RKKY و هندسه شبکه اسپینی می‌تواند سبب بروز پیکربندی‌های اسپینی متفاوتی برای حالت‌های سطحی شود که از جمله آنها می‌توان به نظم فرومغناطیس، پادفرومغناطیس و درماندگی اسپینی اشاره کرد.

در این مقاله علاقه‌مند به مطالعه رفتار دمای بحرانی در عایق‌های توپولوژیکی سه بعدی که با ذرات مغناطیسی آلابیده شده‌اند، با در نظر گرفتن اثرات انحنا شش گوشه هستیم. به این منظور با استفاده از رهیافت میدان متوسط [۱۳]، مغناطش ذرات مغناطیسی و مغناطش الکترونی را محاسبه می‌کنیم. سپس مقدار دمای بحرانی سیستم را به ازای مقدارهای مختلف ضریب انحنا شش گوشه و پتانسیل شیمیایی به دست می‌آوریم. سرانجام رفتار پذیرفتاری مغناطیسی سیستم را مطالعه می‌کنیم.

که برهم‌کنش بین آنها با مدل آیزینگ داده شده باشد.

### ۳. نتایج

در ادامه ما نتایج عددی به دست آمده برای خصوصیات مغناطیسی عایق توپولوژیکی آلاییده با ذرات مغناطیسی را در دو حالتی که اسپین ذرات مغناطیسی بر سطح عمود و یا موازی سطح سیستم باشد بررسی می‌کنیم.

#### ۳.۱. اسپین‌های عمود بر سطح عایق توپولوژیکی

در ابتدا فرض کنیم جهت اسپین ذرات مغناطیسی عمود بر سطح عایق توپولوژیکی باشد. در این حالت مغناطش ذرات مغناطیسی باعث باز شدن گاف انرژی در حالت‌های سطحی می‌شود. اگر سطح عایق توپولوژیکی را در صفحه  $x-y$  در نظر بگیریم در این صورت هامیلتونی میدان متوسط (۴) به صورت زیر ساده می‌شود:

$$H^{mf} = E_A \left\{ \sum_k \psi_k^+ \left[ \tilde{k}_x \sigma_y - \tilde{k}_y \sigma_x + \gamma \tilde{k}^z \cos(\gamma \theta) \sigma_z + \tilde{J} M_z \sigma_z - \tilde{\mu} \right] \psi_k + \tilde{J} m_z \sum_I \bar{S}_I^z - N \tilde{J} m_z M_z \right\}, \quad (6)$$

که در این رابطه  $E_A = \hbar v_F A$  انرژی قطع و  $A$  تکانه قطع بوده و با توجه به گاف انرژی حالت‌های توده ماده به دست می‌آیند. این کمیت‌های قطع در واقع نشان دهنده بازه‌ای از انرژی و تکانه هستند که هامیلتونی حالت‌های سطحی، بدون وارد کردن اثرات توده می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. با استفاده از این

کمیت‌ها پارامترهای مساله را به صورت  $\tilde{\lambda} = \frac{\lambda A^z}{E_A}$ ،  $\tilde{J} = \frac{J}{E_A}$

کمیت‌ها پارامترهای مساله را به صورت  $\tilde{k} = \frac{k}{A}$  و  $\tilde{\mu} = \frac{\mu}{E_A}$

تکانه  $\tilde{k}$  با جهت تقارنی  $FK$  فضای وارون می‌سازد. با استفاده از هامیلتونی (۶) تنها مؤلفه غیر صفر مغناطش ذرات مغناطیسی، بر حسب تابع بریلونن به صورت زیر به دست می‌آید:

$$M_z = -2 S x B_S(y), \quad (7 \text{ الف})$$

که در آن  $x$  نسبت ناخالصی و  $S$  اندازه اسپین اتم‌های مغناطیسی است. همچنین  $y = \beta E_A \tilde{J} S m_z$  و  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  تابع

### ۲. مدل و فرمول بندی

هامیلتونی الکترون‌های روی سطح یک عایق توپولوژیکی سه بعدی در نزدیکی نقطه دیراک به صورت زیر داده می‌شود [۱]:

$$H_0 = \hbar v_F (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x), \quad (1)$$

که در آن  $v_F$  سرعت فرمی الکترون‌های دیراک،  $k_{x,y}$  تکانه آنها در راستاهای فضایی  $x$  و  $y$ ، و  $\sigma_{x,y}$  ماتریس‌های پاولی هستند. در حضور ذرات مغناطیسی روی سطح عایق توپولوژیکی، بین آنها و الکترون‌های دیراک برهم‌کنش تبادلی کوتاه برد زیر وجود دارد:

$$H_1 = J \sum_I \bar{S}_I \cdot \bar{\sigma}_I, \quad (2)$$

که  $J$  ثابت تبادلی،  $\bar{S}_I$  اسپین ذره مغناطیسی در محل  $I$  و  $\bar{\sigma}_I$  بردار ماتریس‌های پاولی مربوط به الکترون در محل  $I$  است. اثرات انحنای شش گوشه را می‌توان با اضافه کردن عبارت زیر به هامیلتونی  $H_0$  لحاظ کرد:

$$H_{hw} = \lambda (k_+^z + k_-^z) \sigma_z, \quad (3)$$

که ضریب  $\lambda$  معیاری از میزان انحنای شش گوشه در طیف انرژی سیستم است و  $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$ . هامیلتونی کل سیستم را در تقریب میدان متوسط به صورت زیر می‌نویسیم:

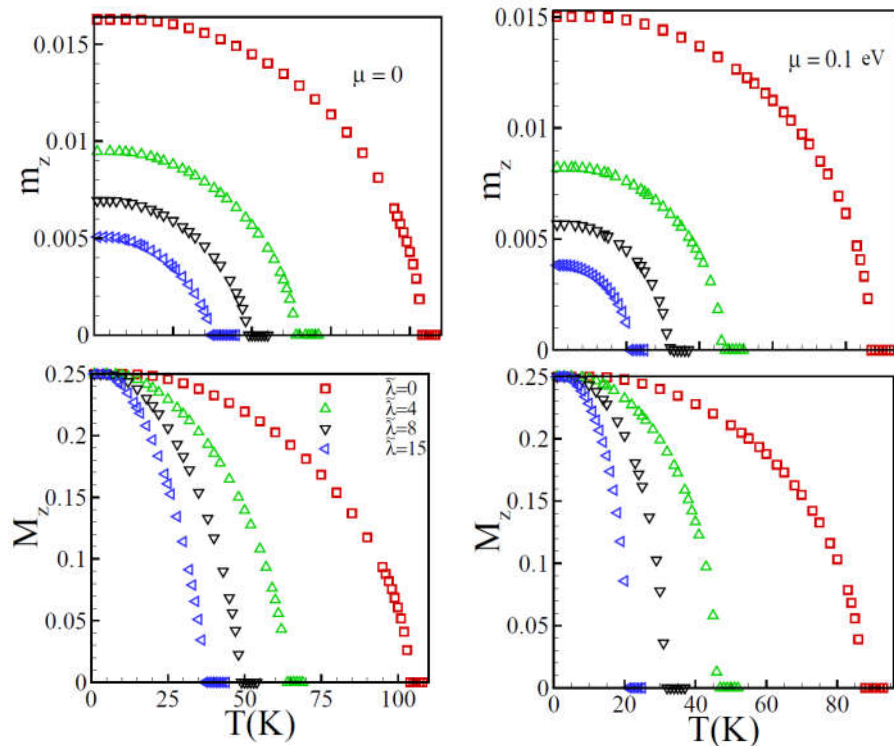
$$H^{mf} = H_e^{mf} + H_I^{mf} - N \tilde{J} \bar{m} \cdot \bar{M}, \quad (4)$$

که  $H_e^{mf}$  هامیلتونی میدان متوسط الکترونی و  $H_I^{mf}$  هامیلتونی میدان متوسط ذرات مغناطیسی است که به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$H_e^{mf} = \sum_k \psi_k^+ (H_k + \tilde{J} \bar{M} \cdot \bar{\sigma} - \tilde{\mu}) \psi_k, \quad (5)$$

$$H_I^{mf} = \tilde{J} \bar{m} \cdot \sum_I \bar{S}_I.$$

در این رابطه  $H_k = H_0 + H_{hw}$  یک ماتریس در فضای تکانه و اسپین الکترون است،  $\psi_k^+$  و  $\psi_k$  عملگرهای خلق و نابودی الکترونی هستند و  $\mu$  پتانسیل شیمیایی سیستم است.  $\bar{M} = \langle \bar{S}_I \rangle$  و  $\bar{m} = \langle \bar{\sigma}_I \rangle$  به ترتیب مغناطش ذرات مغناطیسی و مغناطش الکترونی هستند. شکل برهم‌کنش بین ذرات مغناطیسی و الکترون‌های سطحی در تعیین خصوصیات مغناطیسی سیستم نقش مهمی دارد. در این مقاله فرض می‌کنیم



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مغناطش الکترون‌های سطحی (ردیف بالا) و ذرات مغناطیسی (ردیف پایین) بر حسب دما، به ازای ضریب انحنای مختلف. مقادیر بی بعد پتانسیل شیمیایی در این نمودارها در ستون سمت چپ و ستون سمت راست به ترتیب  $\bar{\mu} = 0$  و  $\bar{\mu} = 0.184$  هستند. در دمای صفر با افزایش ضریب انحنای مغناطش الکترون‌ها کم می‌شود در حالی که مغناطش ذرات مغناطیسی ثابت است.

رسانش و ظرفیت است. در رابطه (۸) عملگر  $U$  یک ماتریس یکانی است که هامیلتونی الکترونی را قطری می‌کند و  $f(\varepsilon_{\alpha, \vec{k}})$  تابع توزیع فرمی دیراک است. اثر ماتریس یکانی بر مؤلفه  $z$  ماتریس پاولی را می‌توان به صورت زیر به دست آورد:

$$(U^+ \sigma_z U)_{\pm\pm} = \pm \frac{\gamma \tilde{\lambda} \tilde{k}^{\mp} \cos(\vartheta) + \tilde{J} M_z}{\sqrt{\gamma \tilde{k}^{\mp} + (\gamma \tilde{\lambda} \tilde{k}^{\mp} \cos(\vartheta) + \tilde{J} M_z)^2}} \quad (10)$$

همان طور که از روابط (۷) و (۸) دیده می‌شود مغناطش ذرات مغناطیسی و مغناطش الکترون‌های سطحی به هم وابسته هستند. با حل این معادلات به طور خود سازگار می‌توان مغناطش‌ها را در گستره وسیعی از دما برای ضرایب انحنای و پتانسیل‌های شیمیایی مختلف به دست آورد. وابستگی دمایی مغناطش ذرات مغناطیسی و الکترون‌های سطحی برای سیستمی که اسپین ذرات مغناطیسی  $S = \frac{5}{2}$  است و غلظت ذرات مغناطیسی موجود در سیستم ۵ درصد در نظر گرفته شده است، در شکل ۱ آورده

بریلوئن  $B_S(y)$  به صورت زیر داده می‌شود [۱۳]:

$$B_S(y) = \frac{\gamma S + 1}{\gamma S} \coth\left(\frac{(\gamma S + 1)y}{\gamma S}\right) - \frac{1}{\gamma S} \coth\left(\frac{y}{\gamma S}\right) \quad (ب. ۷)$$

همان طور که از رابطه (۷) مشخص است مغناطش ذرات مغناطیسی به مغناطش الکترون‌های سطحی وابسته است. مؤلفه غیر صفر مغناطش الکترون‌های سطحی با رابطه زیر داده می‌شود:

$$m_z = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=\pm, \vec{k}} (U^+ \sigma_z U)_{\alpha\alpha} f(\varepsilon_{\alpha, \vec{k}}), \quad (الف. ۸)$$

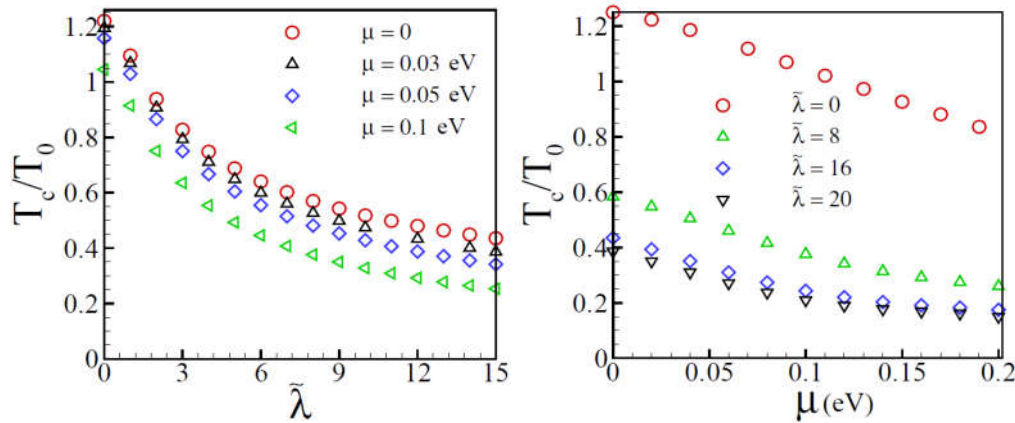
که  $\varepsilon_{\alpha, \vec{k}} = E_A \tilde{\varepsilon}_{\alpha, \vec{k}}$  است و انرژی  $\tilde{\varepsilon}_{\alpha, \vec{k}}$  از قطری کردن هامیلتونی بی بعد

$$\tilde{H}_{\vec{k}} = \tilde{k}_x \sigma_y - \tilde{k}_y \sigma_x + \gamma \tilde{\lambda} \tilde{k}^{\mp} \cos(\vartheta) \sigma_z + \tilde{J} M_z \sigma_z - \tilde{\mu}, \quad (ب. ۸)$$

به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\tilde{\varepsilon}_{\pm, \vec{k}} = \pm \frac{1}{\gamma} \sqrt{\gamma \tilde{k}^{\mp} + (\gamma \tilde{\lambda} \tilde{k}^{\mp} \cos(\vartheta) + \tilde{J} M_z)^2} - \tilde{\mu}, \quad (۹)$$

که علامت‌های مثبت و منفی به ترتیب مربوط به نوارهای



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دمای بحرانی بی بعد شده سیستم بر حسب ضریب انحنا شش گوشه بی بعد شده (سمت چپ) و پتانسیل شیمیایی (سمت راست) در حالتی که مغناطش ذرات مغناطیسی در راستای z باشد.

شده است. در این نمودارها انرژی قطع و برهم‌کنش تبدالی به ترتیب  $E = 0.54473$  و  $J = -0.75$  الکترون ولت در نظر گرفته شده‌اند که مقادیر مناسبی برای عایق توپولوژیکی  $Bi_4Se_7$  در حضور ناخالصی آهن هستند [۵]. لازم به ذکر است که مغناطش‌های تعریف شده مطابق روابط (۷) و (۸)، بدون بعد هستند.

همان‌طور که از شکل ۱ دیده می‌شود در دمای صفر ( $T = 0$ ) مغناطش ذرات مغناطیسی ( $M_z$ ) با افزایش ضریب انحنا شش گوشه تغییری نمی‌کند در حالی که مغناطش الکترون‌ها ( $m_z$ ) در دمای صفر به شدت به مقدار این ضریب وابسته است و با افزایش آن افت می‌کند. همچنین با افزایش دما، به دلیل وجود افت و خیزهای گرمایی، مغناطش‌ها به طور آرام کم شده و در دمای گذار  $T_c(\tilde{\mu}, \tilde{\lambda})$  صفر می‌شوند. در واقع با افزایش دما نظم فرومغناطیسی سیستم به تدریج کم شده و در دمای بحرانی سیستم به طور کامل از بین می‌رود. در این دما سیستم به فاز نامنظم پارامغناطیس گذار می‌کند. با افزایش پتانسیل شیمیایی دمای بحرانی سیستم کاهش می‌یابد. دلیل این کاهش را می‌توان به صورت زیر بیان کرد. فرض کنید که طیف انرژی حالت‌های سطحی بدون گاف باشد. در پتانسیل شیمیایی صفر، نوار ظرفیت کاملاً پر و نوار رسانش کاملاً خالی است. گاف دار شدن طیف انرژی در این حالت منجر به کاهش انرژی حالت‌های الکترونی پر می‌شود و در نتیجه پیدایش گاف برای

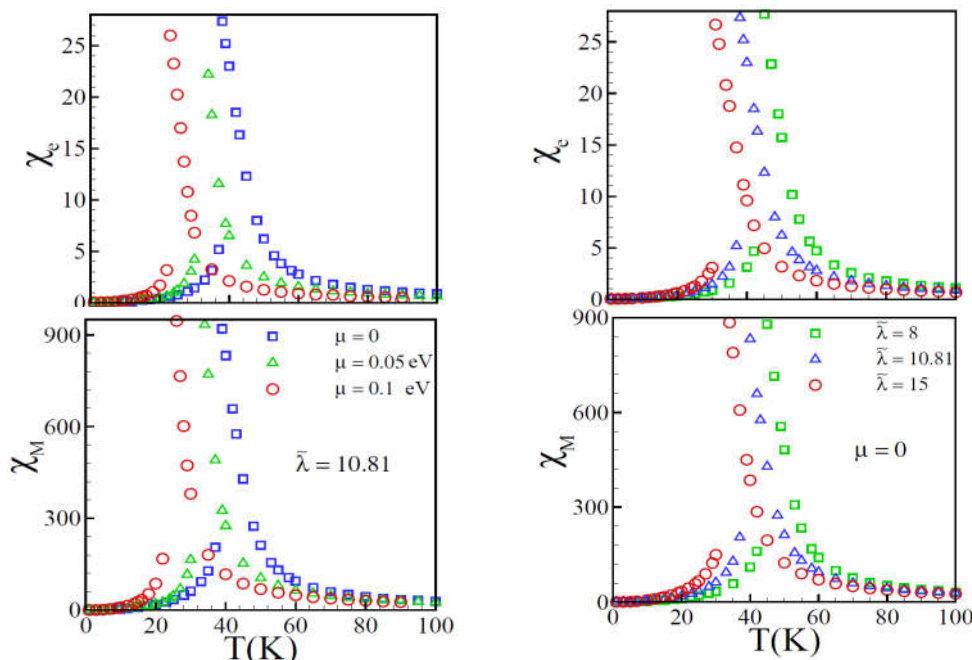
سیستم مطلوب است. از آنجا که اندازه گاف انرژی متناسب با مقدار مغناطش ذرات مغناطیسی است، پس مطلوب بودن شکل گاف دار انرژی به معنی تمایل ذرات مغناطیسی برای جهت گیری فرومغناطیسی است. افزایش پتانسیل شیمیایی در واقع به معنی افزایش چگالی الکترون‌های سیستم و در نتیجه آن افزایش انرژی سیستم با اضافه شدن الکترون به نوار رسانش است. در این شرایط رفتار بهینه برای سیستم این است که این افزایش انرژی را با بستن گاف در طیف حالت‌های سطحی جبران کند. لذا انرژی سیستم در حالتی که مغناطش ذرات مغناطیسی کمتر باشد کمینه تر است. بدین ترتیب بهره خالص انرژی ناشی از باز شدن گاف و در نتیجه آن دمای بحرانی کاهش می‌یابد. با افزایش ضریب انحنا شش گوشه نیز دمای بحرانی سیستم به شدت کم می‌شود. این کاهش را نیز می‌توان با محاسبه انرژی سیستم در حضور جمله انحنا شش گوشه تحلیل کرد. با افزایش ضریب انحنا شش گوشه، بهره خالص انرژی ناشی از باز شدن گاف در سیستم کاهش یافته و در نتیجه انتظار داریم دمای بحرانی سیستم نیز کاهش یابد.

در شکل ۲ دمای بحرانی بی بعد شده را بر حسب پتانسیل شیمیایی و ضریب انحنا شش گوشه رسم کرده‌ایم.

$$T_c = \frac{\pi S(S+1) \left(\frac{aA}{2\pi}\right)^2 J^2 x}{3k_B E_\lambda}$$

دمای بحرانی با پارامتر  $x$  بی بعد

شده است. وابستگی دمای بحرانی به اندازه اسپین ذرات



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) پذیرفتاری‌های الکترونی (ردیف بالا) و ذرات مغناطیسی (ردیف پایین) بر حسب دما. ستون سمت چپ به ازای پتانسیل شیمیایی‌های مختلف و ستون سمت راست به ازای ضریب انحنای مختلف رسم شده‌اند.

می‌توان با استفاده از رابطه‌های  $\chi_M = \frac{\partial M_z}{\partial h} \Big|_{h=0}$  و  $\chi_e = \frac{\partial m_z}{\partial h} \Big|_{h=0}$  به دست آورد که  $h$  میدان مغناطیسی خارجی اعمال شده در جهت عمود بر سطح عایق توپولوژیکی است. در این روابط میدان مغناطیسی و پذیرفتاری مغناطیسی را بی بعد فرض کرده‌ایم. همان طور که از شکل ۳ مشخص است این کمیت در دمای بحرانی واگرا می‌شود. مثبت بودن پذیرفتاری‌های مغناطیسی حاکی از آن است که روش میدان متوسط در این سیستم پایدار و قابل اعتماد است. مقایسه مقادیر پذیرفتاری‌های الکترونی و ذرات مغناطیسی این حقیقت را روشن می‌سازد که آفت و خیز مغناطش ذرات مغناطیس دو مرتبه بزرگی بیشتر از الکترون‌هاست.

### ۳.۲. اسپین‌های موازی با سطح عایق توپولوژیکی

حال فرض می‌کنیم جهت اسپین ذرات مغناطیسی موازی با سطح عایق توپولوژیکی و در راستای  $x$  باشد. در غیاب انحنای شش گوشه، گاف انرژی در حالت‌های سطحی باز

مغناطیسی به صورت  $S(S+1)$  است ولی نسبت  $\frac{T_c}{T_0}$  به اندازه اسپین بستگی ندارد. وابستگی دمای بحرانی بی بعد شده به پارامترهای  $\bar{\mu}$  و  $\bar{\lambda}$  را می‌توان با برازش منحنی روی داده‌های موجود در شکل ۲ به دست آورد. به عنوان مثال به ازای  $\bar{\lambda} = 8$ ، چند جمله‌ای زیر را می‌توان به داده‌های موجود در شکل برازش کرد.

$$\frac{T_c}{T_0} \approx -22/45 \bar{\mu}^2 + 20/44 \bar{\mu}^3 - 4/60 \bar{\mu}^4 - 0/825 \bar{\mu} + 0/58. \quad (11)$$

همچنین به ازای  $\mu = 0.1 eV$  منحنی زیر به خوبی بر داده‌های دمای بحرانی برازش می‌شود:

$$\frac{T_c}{T_0} \approx -4/047 \times 10^{-4} \bar{\lambda}^3 + 0/014 \bar{\lambda}^2 - 0/17 \bar{\lambda} + 1/049. \quad (12)$$

### پذیرفتاری‌های مغناطیسی

پذیرفتاری‌های مغناطیسی الکترونی و ذرات مغناطیسی معیاری از اندازه آفت و خیزهای پارامتر نظم مغناطش در عایق توپولوژیکی سه بعدی مورد مطالعه هستند. این توابع پاسخ را

نشده و تنها موقعیت نقطه دیراک در فضای تکانه جابه‌جا می‌شود. در نتیجه این مغناطش را می‌توان به مثابه یک پیمانه خالص در نظر گرفت که انتظار نمی‌رود تأثیری بر طیف انرژی الکترون‌های سطح داشته باشد. اما زمانی که جمله انحنا شش گوشه به هامیلتونی اضافه شود، مغناطش درون صفحه، گاف انرژی کوچکی در حالت‌های سطحی باز می‌کند. هامیلتونی سیستم در تقریب میدان متوسط به صورت زیر داده می‌شود:

با استفاده از هامیلتونی (۱۳) تنها مؤلفه غیر صفر مغناطش ذرات مغناطیسی را می‌توان بر حسب تابع بریلوئن به صورت زیر به دست آورد:

$$H^{mf} = E_A \left\{ \sum_k \psi_k^+ \left[ \tilde{k}_x \sigma_y - \left( \tilde{k}_y - \frac{\tilde{J}}{\gamma} M_x \right) \sigma_x + 2\tilde{\lambda} \tilde{k}^z \cos(\vartheta) \sigma_z - \tilde{\mu} \right] \psi_k + \tilde{J} m_x \sum_I S_I^x - N \tilde{J} m_x M_x \right\}. \quad (13)$$

در شکل ۵ دمای بحرانی بی‌بعد شده را بر حسب پتانسیل شیمیایی و ضریب انحنا شش گوشه رسم کرده‌ایم.

در این حالت نیز همانند حالت قبل نسبت  $\frac{T_c}{T_0}$  به اندازه

اسپین بستگی ندارد. وابستگی دمای بحرانی بی‌بعد شده به پارامترهای  $\tilde{\mu}$  و  $\tilde{\lambda}$  را می‌توان با برازش منحنی روی داده‌های شکل ۵ به دست آورد. به عنوان مثال به ازای  $\tilde{\lambda} = 8$  چند جمله‌ای زیر را می‌توان به داده‌های موجود در شکل برازش کرد.

$$\frac{T_c}{T_0} \cong 14.292 \tilde{\mu}^4 - 10.542 \tilde{\mu}^3 + 1.35 \tilde{\mu}^2 - 0.05 \tilde{\mu} + 0.5454. \quad (18)$$

همچنین به ازای  $\mu = 0.08 \text{ eV}$  منحنی زیر بر داده‌های دمای بحرانی برازش می‌شود:

$$\frac{T_c}{T_0} \cong 1.047 \times 10^{-2} \tilde{\lambda}^3 - 2.35 \times 10^{-3} \tilde{\lambda}^2 - 1.41 \times 10^{-3} \tilde{\lambda} + 0.6529. \quad (19)$$

جهت مطالعه مقدار افت و خیز مغناطش در این حالت دوباره به محاسبه تابع پاسخ پذیرفتاری مغناطیسی سهم الکترونی و سهم ذرات مغناطیسی می‌پردازیم. جهت محاسبه پذیرفتاری مغناطیسی در این حالت، میدان مغناطیسی را موازی با سطح عایق توپولوژیکی و در راستای  $x$  به سیستم اعمال می‌کنیم. سپس با محاسبه مغناطش‌ها در این حالت و مشتق گیری از آنها نسبت به میدان، پذیرفتاری الکترونی و ذرات مغناطیسی را به

دست آورد:

$$M_x = -2 S x B_S(y), \quad (14)$$

که در آن  $y = \beta E_A \tilde{J} S m_x$ . دوباره مشابه حالت قبل، دیده می‌شود که مغناطش ذرات مغناطیسی به مغناطش الکترون‌های سطحی وابسته است. مؤلفه غیر صفر مغناطش الکترون‌های سطحی با رابطه زیر داده می‌شود:

$$m_x = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=\pm, \tilde{k}} \left( U^+ \sigma_x U \right)_{aa} f(\xi_{\alpha, \tilde{k}}), \quad (15)$$

که  $\xi_{\alpha, \tilde{k}} = E_A \xi_{\alpha, \tilde{k}}^{\tilde{J}}$  است و انرژی  $\xi_{\alpha, \tilde{k}}^{\tilde{J}}$  از قطری کردن هامیلتونی بی بعد

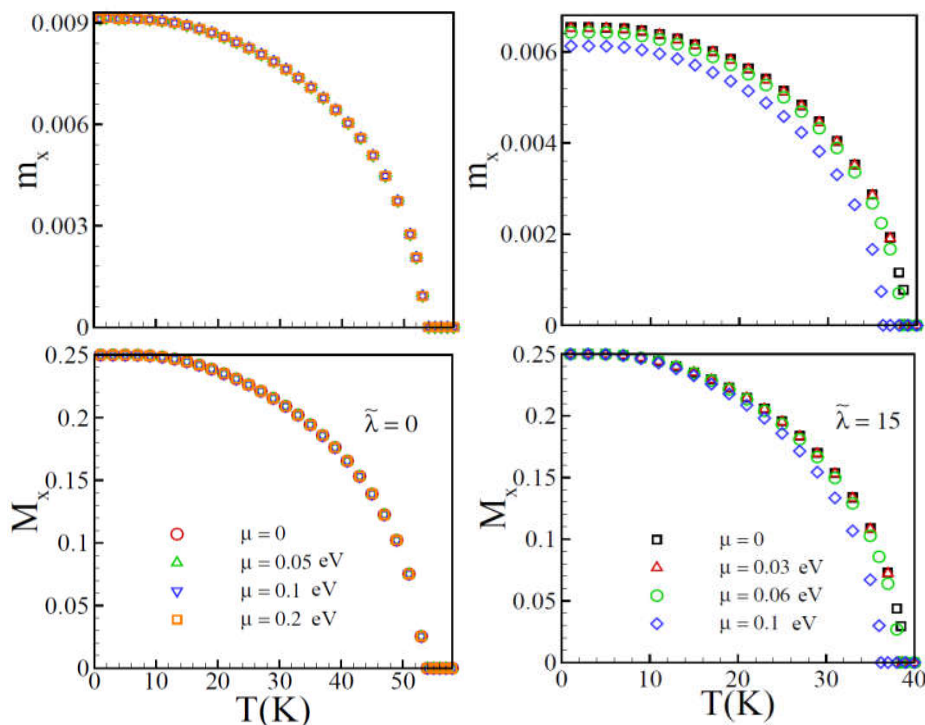
$$\tilde{H}_{\tilde{k}} = \tilde{k}_x \sigma_y - \left( \tilde{k}_y - \frac{\tilde{J}}{\gamma} M_x \right) \sigma_x + 2\tilde{\lambda} \tilde{k}^z \cos(\vartheta) \sigma_z - \tilde{\mu},$$

به صورت زیر است:

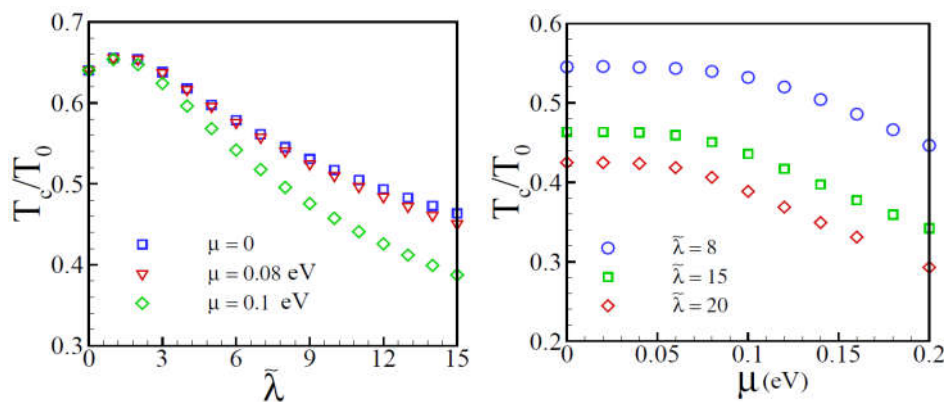
$$\xi_{\pm, \tilde{k}}^{\tilde{J}} = \pm \frac{1}{\gamma} \sqrt{4\tilde{k}^y + 4\tilde{k}_x^y \tilde{\lambda}^2 (\tilde{k}_x^y - 3\tilde{k}_y^y)^2 - 4\tilde{J} \tilde{k}_y M_x + \tilde{J}^2 M_x^y - \tilde{\mu}}. \quad (16)$$

اثر ماتریس یکانی بر مؤلفه  $x$  ماتریس پاولی در رابطه (۱۵) به صورت زیر است:

$$\left( U^+ \sigma_x U \right)_{\pm\pm} = \frac{2\tilde{k}_y - \tilde{J} M_x}{\sqrt{4\tilde{k}^y + 4\tilde{k}_x^y \tilde{\lambda}^2 (\tilde{k}_x^y - 3\tilde{k}_y^y)^2 - 4\tilde{J} \tilde{k}_y M_x + \tilde{J}^2 M_x^y}}. \quad (17)$$



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مغناطش الکترون‌های سطحی (ردیف بالا) و ذرات مغناطیسی (ردیف پایین) بر حسب دما به ازای پتانسیل شیمیایی‌های مختلف در غیاب (ستون چپ) و حضور (ستون راست) اثر ضریب انحنای شش گوشه. در دمای صفر با افزایش ضریب انحنای مغناطش الکترون‌ها کم می‌شود در حالی که مغناطش ذرات مغناطیسی ثابت باقی می‌ماند.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دمای بحرانی بی‌بعد شده سیستم بر حسب ضریب انحنای شش گوشه بی بعد شده (سمت راست) و پتانسیل شیمیایی (سمت چپ) در حالی که مغناطش ذرات مغناطیسی در راستای  $x$  باشد.  $T_c$  مشابه حالت قبل تعریف شده و به  $S(S+1)$  بستگی دارد.

مشابه حالت قبل، افت و خیز مغناطش سهم ذرات مغناطیسی در حوالی نقطه بحرانی حدود دو مرتبه بزرگی بیشتر از افت و خیز مغناطش الکترونی در دمای مشابه است.

دست می‌آوریم. در این حالت نیز پذیرفتاری‌ها مثبت و در دمای بحرانی واگرا می‌شوند. از آنجا که رفتار پذیرفتاری‌ها مشابه حالت قبل است لذا نمودار آنها را در این حالت نیآورده‌ایم.



#### ۴. جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

حضور ذرات مغناطیسی بر سطح عایق‌های توپولوژیکی سه بعدی منجر به ایجاد نظم مغناطیسی در این مواد می‌شود. با بررسی این نظم‌ها مشخص شده است که در عایق‌های توپولوژیکی سه بعدی برخلاف مواد مغناطیسی شناخته شده متعارف، دمای بحرانی در حالت دو بعدی مقدار بیشتری نسبت به حالت سه بعدی دارد. در این راستا مقدار دمای بحرانی سطحی، و وابستگی آن به پارامترهای موجود در هامیلتونی یک عایق توپولوژیکی سه بعدی آلاینده با ذرات مغناطیسی را در حضور اثرات انحنای شش گوشه بررسی کردیم. برهم‌کنش الکترون‌های دیراک و ذرات مغناطیسی موجود روی سطح را آیزینگ در نظر گرفتیم. در حالت اول فرض کردیم اسپین ذرات مغناطیسی در جهت عمود بر سطح عایق توپولوژیکی باشد که سبب باز شدن گاف انرژی در حالت‌های سطحی می‌شود. در حالت دوم فرض کردیم اسپین ذرات در جهت موازی با سطح عایق توپولوژیکی است که در این حالت گاف بسیار کوچکی در حالت‌های سطحی، به واسطه انحنای شش گوشه و مغناطش ذرات مغناطیسی باز می‌شود. حضور برهم‌کنش آیزینگ بین الکترون‌ها و ذرات مغناطیسی سبب می‌شود که سیستم در دماهای کمتر از دمای بحرانی در فاز فرومغناطیس قرار داشته باشد. با زیاد شدن دما افت و خیزهای گرمایی به تدریج نظم سیستم را از بین می‌برد به طوری که در دمای بحرانی، سیستم گذار فاز مرتبه دوم به فاز بی‌نظم پارامغناطیس دارد. در این فاز هم‌زمان هم مغناطش الکترونی و هم مغناطش ذرات مغناطیسی صفر است. دمای بحرانی به پارامترهای

متعددی از سیستم بستگی دارد. وابستگی دمای بحرانی به ضریب انحنای شش گوشه و پتانسیل شیمیایی را در این دو حالت مختلف مطالعه کردیم. دمای بحرانی در هر دو حالت با افزایش ضریب انحنای شش گوشه و پتانسیل شیمیایی کاهش می‌یابد. اما میزان کاهش دمای بحرانی در حالتی که اسپین ذرات مغناطیسی موازی سطح عایق توپولوژیکی در نظر گرفته شده، بسیار کمتر از حالتی است که اسپین ذرات بر سطح عمود هستند. همچنین وابستگی دمای بحرانی به اندازه اسپین ذرات مغناطیسی به صورت  $S(S+1)$  است. در غیاب انحنای شش گوشه، در حالتی که اسپین‌ها عمود بر سطح باشند دمای بحرانی با افزایش پتانسیل شیمیایی کم می‌شود، در حالی که در حالت موازی پتانسیل شیمیایی هیچ تأثیری در دمای بحرانی ندارد. علت این رفتار ناشی از این حقیقت است که در غیاب انحنای شش گوشه اسپین‌های عمود سبب ایجاد گاف انرژی در حالت‌های سطحی می‌شود که این گاف به مقدار درصد آلاینده بستگی دارد. حال آنکه در حالت موازی هیچ گافی در حالت‌های سطحی دیده نمی‌شود. همچنین جهت پی بردن به مقدار افت و خیزهای مغناطش‌ها و پایداری جواب‌های مربوط به تقریب میدان متوسط، پذیرفتاری مغناطیسی سهم الکترونی و سهم ذرات مغناطیسی را مطالعه کردیم. در هر دو حالت اسپین‌های موازی و عمود، رفتار این توابع پاسخ مشابه است. همچنین پذیرفتاری‌های مغناطیسی به دست آمده همواره کمیت‌های مثبتی هستند که نشان از پایداری فازها است. به علاوه پذیرفتاری‌ها در دمای بحرانی واگرا می‌شوند که نشان دهنده گذار فاز مرتبه دوم است.

#### مراجع

1. Y-L Chen, *et al.*, *Science* **329** (2010) 659.
2. M A Ruderman and C Kittel, *Phys. Rev.* **96** (1954) 99.
3. T Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16** (1956) 45. K Yosida, *Phys. Rev.* **106** (1957) 893.
4. J-J Zhu, D-X Yao, S-C Zhang, and K Chang, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 097201.
5. S-Q Shen, "Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters", Berlin: Springer (2012).
6. M Z Hasan and C L Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 3045.
7. X-L Qi and S-C Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83** (2011) 1057.
8. Y Xia, *et al.*, *Nat. Phys.* **5** (2009) 398.

12. D Hsieh *et al.*, *Nature* **460** (2009) 1101.
13. R M White, “*Quantum Theory of Magnetism: Magnetic Properties of Materials*”, 3<sup>rd</sup> edition Springer (2007).
9. D A Abanin and D A Pesin, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 136802.
10. G Rosenberg and M Franz, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 195119.
11. L Fu, *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 266801.