

ادغام الگوی شبکه‌ای هولشتاین - کاندو برای توصیف نظریه ابررساناهای دمای بالا

رضا نورافکن^۱ و ناصر نفری^۲

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، خیابان پژوهش، یزد
۲. مرکز تحقیقات فیزیک نظری و ریاضیات (IPM)، صندوق پستی ۵۵۳۱-۱۹۳۹۵، تهران

چکیده

از آنجا که تشکیل جفت الکترونها برای ابررسانایی ضرورت دارد، تشخیص سازوکارهایی که می‌توانند به تشکیل این جفتها بیانجامد از اهمیت بسزایی برخوردار است. اما، از یکسو برخی از آزمایشها بر روی ابررساناهای دمای بالا، مانند ARPES، نشان داده‌اند که مجموعه‌ای از نتایج تجربی بوسیله مدهای بوزونی مغناطیسی قابل توصیفند و از سوی دیگر برخی دیگر از آزمایشها مانند تونلزنی ابررسانایی (tunneling spectroscopy)، با مشاهده قله‌هایی در مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ اعمالی نشان داده‌اند که مدهای بوزونی ارتعاشی (فونونها) نقش واسط بین جفت الکترونها را بازی می‌کنند. در این مقاله به منظور احتساب همزمان آثار برهمکنش الکترون - فونون و افت و خیزهای اسپینی الگویی ارائه می‌شود که از ادغام الگوی هولشتاین و الگوی شبکه‌ای کاندو به دست آمده است. ما با استفاده از نظریه میدان میانگین دینامیکی (DMFT) و بکارگیری روش قطری‌سازی دقیق، نمودار فاز چنین دستگاههایی را برحسب شدت جفت‌شدگی الکترون - فونون، g ، و شدت جفت‌شدگی تبادل کاندو، J ، به دست آورده‌ایم. اساسا چنین دستگاههایی، با توجه به مقادیر شدت این جفت‌شدگیها، می‌توانند به فازهای فلزی، عایق کاندو و یا عایق بای پلارونی گذار کنند. این دستگاهها گاف اسپینی و گاف باری متمایزی دارند و انرژی این گافها حدود $1-100$ meV است. محاسبات ما وجود این گافها را نشان می‌دهند و چون انرژی‌شان در محدوده انرژی برانگیختگیهای اسپینی و برانگیختگیهای باری است، انتظار می‌رود این الگو راهی را برای توصیف ابررساناهای گرم باز کند.

واژه‌های کلیدی: الگوی کاندو، برهم‌کنش الکترون - فونون، نظریه میدان میانگین دینامیکی - پلارون

۱. مقدمه

فیزیکدانان ماده چگال به اتفاق براین باورند که تشکیل جفت ذرات (شبه الکترونها یا شبه حفره‌ها) برای ظهور ابررسانایی ضروری است و می‌باید چاشنی بی چون و چرای نظریه ابررسانایی باشد. لذا پژوهشگران به دنبال سازوکارهایی گشته‌اند که به تشکیل جفتهای این شبه ذرات (جفتهای کوپر) منجر می‌شوند.

در مورد ابررساناهای متعارف، برهمکنش الکترون-فونون (EPI) توانسته است به خوبی از عهده توصیف خواص این دسته از ابررساناها برآید (نظریه BCS [۱]). اما در مورد ابررساناها با دمای گذار بالا (HT_cS) در ابتدا به نظر می‌رسید

که سازوکار EPI با مشکلاتی روبرو است. اولاً ضریب ایزوتوپی

HT_cSها

$$a = \sum_i a_i = - \sum_i \frac{\partial \ln T_c}{\partial M_i} \quad (1)$$

مقادیری اختیار می‌کنند که به نحو محسوس با مقدار آن برای ابررساناهای متعارف، یعنی ۰/۵، تفاوت دارد. در اینجا i معرف یونهای داخل سلول واحد بلور دستگاه مورد نظر است و T_c دمای گذار آن را نشان می‌دهد. ثانياً استدال می‌شد که اگر EPI سازوکار اصلی جفت‌شدگی باشد دمای گذار به فاز ابررسانایی یک حد بالایی خواهد داشت. در نتیجه در سالهای اولیه پس از کشف HT_cSها پژوهشگران به بررسی سازوکارهایی بجز EPI

اکسید مس می‌تواند حضور داشته باشند. لذا ما در این مقاله به الگویی نگاه می‌کنیم که هم آثار EPI و هم آثار افت‌وخیزهای اسپینی را در خود دارد.

در الگوی شبکه‌ای کاندو [۴] آثار افت‌وخیزهای اسپینی قابل بررسی‌اند. همچنین الگوی هولشتاین برای مطالعه آثار EPI ارائه شده است [۵]، بنابراین یک راه طبیعی برای بررسی هر دو اثر، معرفی الگویی است که از ادغام الگوی شبکه‌ای کاندو و الگوی هولشتاین حاصل می‌شود. در ادامه به معرفی الگوی شبکه‌ای هولشتاین - کاندو (H-KLM) می‌پردازیم.

۲. الگوی شبکه‌ای هولشتاین - کاندو

هامیلتونی الگوی شبکه‌ای هولشتاین - کاندو به وسیله رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle s} c_{is}^\dagger c_{js} + \frac{J}{2} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot (c_{is}^\dagger \mathbf{S}_{ab} c_{is}) + g \sum_{is} (n_{is} - 1)(b_i + b_i^\dagger) + \Omega_0 \sum_i b_i^\dagger b_i \quad (2)$$

که c_{is} و $(c_{is}^\dagger)^\dagger$ ، به ترتیب، عملگرهای فنا (خلق) برای الکترونهاي سیار با اسپین s و ارتعاشات محلی با فرکانس Ω_0 در سایت i هستند. \mathbf{S}_i شبه برداری است که با ماتریسهای پائولی نشان داده می‌شود، t دامنه پرش الکترونهاي سیار از یک سایت به سایت‌های همسایه‌اش است، J شدت جفت‌شدگی بین اسپین الکترونهاي سیار و اسپینهای جایگزیده می‌باشد و در آخر g عنصر ماتریسی برهم‌کنش الکترون-فونون است.

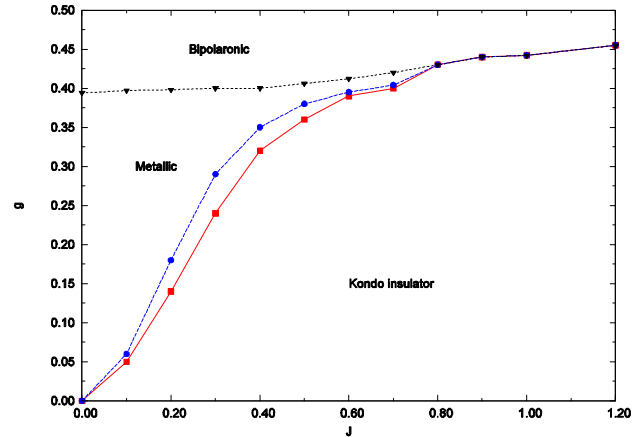
محاسبات ما بر اساس نظریه میدان میانگین دینامیکی (DMFT) است [۶]، که روشی غیراختلالی برای مطالعه دستگاه‌های الکترونی قویاً همبسته است. در DMFT، الگوی تعریف شده روی شبکه به یک الگوی ناخالصی اندرسون مؤثر و یک شرط خودسازگاری نگاشته می‌شود، که آن شرط اطلاعات لازم از شبکه اولیه را در خود دارد. این روش در حد تعداد همسایه‌های نامحدود یا به طور معادل در حد ابعاد نامحدود دقیق می‌شود. در این کار شبکه Bethe با چگالی حالات نیمه-دایره‌ای با نیم-پهنای D به شکل

پرداختند. با توجه به ویژگیهای ابررساناهای اکسید مس و خصوصیات مغناطیسی آنها برانگیختگیهای جمعی اسپینی به عنوان کاندید دیگری برای سازوکار جفت‌شدگی معرفی شد. از طرف دیگر، در سالهای اخیر به برخی از مشکلات EPI برای H₂O₈SHT جواب گفته شده است و به این ترتیب نقش EPI در توصیف این ابررساناها مجدداً جان تازه‌ای پیدا کرده است. به عنوان مثال با این دید که برهم‌کنش الکترون-الکترون (EEI) در این دستگاهها قوی است از فرمولبندی الیاشبرگ استفاده شده است. در این فرمولبندی، با به میان آوردن m ، یعنی پارامتر برهم‌کنش مؤثر کولنی، نشان داده می‌شود که a در اثر ایزوتوپی می‌تواند مقادیر کوچک و حتی منفی را اختیار کند.

بحث بر سر اینکه در توصیف نظری H₂O₈SHTها نقش کدامیک از این سازوکارهای جفت‌شدگی حیاتی است همچنان ادامه دارد و دو مقاله اخیر چاپ شده در نیچر گواهی بر این مدعاست [۲ و ۳]. در مرجع [۲]، لی و همکارانش به بررسی طیف‌نگاری تونلی ابررسانای $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+d}$ پرداخته‌اند و کمیت مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ اعمالی را اندازه‌گیری کرده‌اند. این اندازه‌گیریها نشان می‌دهند که قله‌های d^2I/dV^2 در اتصالهای ابررسانا-عایق-ابررسانا به مدهای فونونی مربوطند. از طرف دیگر، در [۳]، ویگناله و همکارانش به بررسی ابررسانای دمای بالا $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ پرداخته‌اند. آنها با استفاده از پراکندگی نوترونی ناکشسان، برانگیختگیهای اسپینی را در این ماده با آلیش بهینه مطالعه کرده و دریافتند که این برانگیختگیها ساختاری دو مولفه‌ای دارند که مولفه بسامد پایین آن حول و حوش 18 meV است و مولفه پهنتری نیز وجود دارد که بیشینه آن در $70-40 \text{ meV}$ است. انرژی این مولفه دوم با ساختارهایی که در گسیل فوتونی مشاهده شده است، همخوانی دارد.

بررسی نتایج تجربی مورد قبول پژوهشگران ابررسانایی نشان می‌دهد که برخی از داده‌های تجربی به وسیله EPI قابل تبیین است و برخی دیگر به وسیله برانگیختگیهای اسپینی قابل توضیح‌اند. تعدادی از محققین بر این باورند که هر دو دسته برانگیختگیهای بوزونی مورد اشاره در بالا در اکثر ابررساناهای

عایق کاندو، فاز فلزی و فاز عایق بای‌پلارونی. در غیاب جفت‌شدگی الکترون-فونون، $g=0$ ، الگو به الگوی شبکه‌ای کاندو تبدیل می‌شود، که در کلیه مقادیر J ، یک گاف اسپینی و یک گاف باری را نشان می‌دهد. الگو در غیاب برهم‌کنش تبادل، $J=0$ ، الگوی هولشتاین نامیده می‌شود. برای $J=0$ و g های کوچک، دستگاه ابتدا در فاز فلزی با مشخصه مایع فرمی است، به این معنا که قاعده جمع لاتینجر $r(0) = r_0(0)$ عایق برای تابع طیفی $r(w) = -\text{Im}G(w+0^+)/p$ برآورده می‌شود. با افزایش g ، درجات آزادی الکترونی و فونونی شدیداً درهم تنیده می‌شوند و حضور یک الکترون با انحراف شبکه‌ای محدودی همراه می‌شود. الکترون‌ها در حرکتشان در بلور این انحرافهای شبکه‌ای را با خود می‌برند، که باعث کاهش تحرک الکترون‌ها می‌شود (شبه ذره حاصل را پلارون می‌نامند). انحراف شبکه‌ای همراه یک الکترون به نوبه خود می‌تواند الکترونی دیگر با اسپین مخالف را مقید سازد. از طریق همین جفت‌شدگی دو پلارون همدیگر را جذب می‌کنند و در فضای واقعی جفت مقیدی تشکیل می‌شود که بای‌پلارون نامیده می‌شود. در غیاب پرش جفت، تشکیل بای‌پلارون‌ها به معنای جایگزیده شدن الکترون‌ها و گذار فاز به حالت عایق است. به ازای مقادیر کوچک J ، سیستم ابتدا در فاز عایق کاندو است و با افزایش جفت‌شدگی الکترون-فونون گذار پیوسته‌ای به حالت فلزی در جفت‌شدگی بحرانی $g_{1c}(J)$ رخ می‌دهد. مقدار جفت‌شدگی بحرانی $g_{1c}(J)$ با افزایش J افزایش می‌یابد. از آنجا که افزایش J به گاف بزرگتری برای حالت عایق منجر می‌شود، این رفتار معقول به نظر می‌رسد. به این معنی که گاف بزرگتر جفت‌شدگی بین افت‌وخیزهای باری و فونون‌ها را بیشتر تعدیل می‌نماید و در نتیجه گذار به حالت فلزی برای جفت‌شدگیهای بزرگتر رخ می‌دهد. محاسبات ما همچنین نشان می‌دهد که در مجاورت $g_{1c}(J)$ ناحیه باریکی با رفتار مایع نافرمی وجود دارد. افزایش بیشتر g موجب می‌شود تا دستگاه از فاز فلزی به فاز عایق بای‌پلارونی گذار کند. محاسبه بخش موهومی خودانرژی الکترونی برای J ثابت و مقادیر مختلف J گذار عایق کاندو به



شکل ۱. نمودار فاز الگوی هولشتاین - شبکه کاندو. سه فاز مختلف در این نمودار عبارتند از: فاز عایق کاندو، فاز فلزی و فاز بای‌پلارونی.

$$r_0(w) = \frac{2}{pD^2} \sqrt{D^2 - w^2} \quad (3)$$

در نظر گرفته شده است. برای حل الگوی ناخالصی مؤثر هولشتاین-اندرسون حاصل، از تکنیک قطری‌سازی دقیق بهره جسته‌ایم [۵]. به این معنا که ترازها در حمام الکترونی موجود در این الگو را به تعداد معینی تراز، N_s ، محدود ساخته‌ایم. با این کار فضای هیلبرت به اندازه کافی کوچک می‌شود تا امکان استفاده از الگوریتم لئشوز برای محاسبه تابع گرین دمای صفر این الگو فراهم شود. در مورد درجات آزادی فونونی نیز باید فضای فونونی نامحدود را برش داد و در اینجا ما حداکثر N_{ph} فونون برانگیخته را مجاز شمرده‌ایم. در تمام محاسبات ارائه شده در اینجا همگرایی برش حمام آزموده شده و مقدار N_{ph} نیز در رژیم آدیاباتیک و در جفت‌شدگی قوی، که در آن دستگاه شامل برانگیختگیهای فونونی نسبتاً بیشتری می‌باشد، با دقت انتخاب شده است. در آخر نتایج ارائه شده در اینجا برای نیم-پهنای $D=2$ محاسبه شده‌اند.

۳. نتایج

شکل ۱ نمودار فازی الگوی H-KLM در حالت نیمه-پر را در فضای پارامترهای J و g برای $\Omega_0/D=0/1$ نشان می‌دهد. در این محاسبه کلیه نظمهای بلند برد حذف شده‌اند. سه فاز مختلف در این نمودار دیده می‌شوند. این سه فاز عبارتند از: فاز

اشاره بر اهمیت این دو سازوکار دارد. محاسبات ما همچنین بر وجود گافهای اسپینی و باری متمایزی دلالت دارد که مقادیری بین 1meV تا 100meV را می‌گیرد و این درست ناحیه‌ای است که انرژی برانگیختگیهای ارتعاشی (فونونها) و برانگیختگیهای اسپینی به آن تعلق دارند.

فاز فلزی و همچنین گذار از فاز فلزی به عایق بای پلارونی را تایید می‌نماید.

۴. نتیجه‌گیری

در خاتمه نتیجه می‌گیریم که تقابل بین برهم‌کنشهای الکترون-فونون و برهم‌کنش تبادل بین اسپین الکترونهای سیار و اسپینهای جایگزیده می‌تواند به نمودار فاز پیچیده‌ای بیانجامد که

مراجع

1. J Bardeen, I N Cooper, R Schrieffer, *Phys. Rev.* **108** (1957) 1175.
2. J Lee, *et al.*, *Nature* **442**, 3 (2006) 546.
3. B Vignolle, *et al.*, *Nature Physics* **546**, 18 (2007) 1.
4. R Nourafkan, N Nafari, *J. Phys: Condens. Matter*, **20** (2008) 255231.
5. T Holstein, *Ann. Phys.* **8** (1959) 325.
6. A Georges, *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **63** (1996) 13.