

وابستگی نظم پیچشی به درجه همسانگردی در هامیلتونی هابارد شبکه‌های مثلثی

پیمان صاحب سرا

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

پست الکترونیکی: sahebsara@cc.iut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۸/۱۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۱۰/۲۶)

چکیده

بررسی فازهای شکست تقارن با نظم بلندبرد در دستگاه‌های همبسته قوی همواره مورد علاقه دانشمندان است. در این مقاله تلاش کرده‌ایم تا با استفاده از تقریب وردشی خوشه‌ای و در حضور ناکامی هندسی در شبکه‌های مثلثی، وجود نظم مغناطیسی پیچشی 120° درجه را بر حسب ناهمسانگردی موجود در آنها مورد مطالعه قرار دهیم. مشاهده کردیم که با افزایش ناهمسانگردی در دستگاه، به ازای برهم‌کنش‌های $U \geq 7/5t$ ، نظم مزبور در بازه $t' < 1/35t$ وجود داشته و تا مجاورت نظم پادفرومغناطیسی در نزدیکی $t' = 0/85t$ ادامه خواهد داشت. بررسی گذار مات در این دستگاه‌ها نشان‌دهنده وجود یک فاز پارامغناطیسی بدون نظم مغناطیسی بلندبرد است که عایق بوده، و مایع کوانتومی اسپینی نامیده می‌شود.

واژه‌های کلیدی: دستگاه همبسته قوی، مدل هابارد، شبکه مثلثی، ناهمسانگردی، نظم مغناطیسی پیچشی، مایع کوانتومی اسپینی

۱. مقدمه

متعددی از خود نشان می‌دهند. در این مواد آلی، جفت حلقه‌های پلیمری در رأس‌های مثلث عمده‌تاً ناهمسان‌گرد قرار می‌گیرند، و علی‌رغم شباهت این مواد به مواد ابررسانای دمای بالا در زمینه خواص نامتعارف فلزی، تفاوت آنها در این است که این خانواده از مواد دارای شبکه پلیمری با نوارهای نیمه‌پر هستند. در این رابطه x می‌تواند نماینده آنیون‌هایی همچون $\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$ ، $\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$

دستگاه‌های همبسته قوی در ابعاد پایین همواره مورد توجه دانشمندان بوده‌اند، به خصوص ابررساناهای اکسید مس و خانواده κ -از ترکیبات آلی در مجموعه دستگاه‌های دوبعدی دسته‌بندی می‌شوند. پلیمرهای مواد آلی با فرمول κ -BEDT-TTF- x موادی هستند که دارای ساختار شبه دوبعدی به شکل مثلثی بوده و به خاطر وجود ناکامی هندسی، فازهای

است که می‌توان ابررسانایی در این مواد شبه‌دو بعدی را از برهم‌کنش‌های دافعه خالص به دست آورد [۷ و ۸]. صورت مدل هابارد در دو بعد عبارت است از

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} + \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (1)$$

که در آن $c_{i\sigma}^\dagger$ و $c_{j\sigma}$ به ترتیب خلق‌کننده و نابودکننده یک الکترون با اسپین σ (برابر \uparrow یا \downarrow) در جایگاه i است، که با حالت‌های ونیر $\Psi(r-r_i)$ بیان می‌شود و t_{ij} عضو ماتریس پرش از جایگاه i به j است. U میزان برهم‌کنش دافعه جایگاهی بوده و $\hat{n}_{i\sigma}$ تعداد الکترون‌ها با اسپین معین را در جایگاه i در اختیار قرار می‌دهد. رقابت بین دو جمله جنبشی و برهم‌کنشی در مدل هابارد بالا منجر به مشاهده تعداد زیادی از نظم‌های بلندبرد در دستگاه می‌شود.

هدف اصلی در این مقاله بررسی مدل هابارد نیمه‌پر روی یک شبکه مثلثی همسانگرد با استفاده از روش وردشی خوشه‌ای، برای یافتن نظم مغناطیسی چرخشی سه زیرشبکه‌ای بلندبرد و یافتن گذار فازی به فاز عایق مات غیرمغناطیسی است، که مایع اسپینی نامیده می‌شود. پیش از این هم‌خوانی حالت مایع اسپینی با مدل هابارد در مقادیر محدود U بیان شده است و در حالی که نظم نیل غایب است، نظم چرخشی در مقادیر بزرگتر برهم‌کنش مشاهده می‌شود [۹]. می‌توان رسانای آل سی $(\text{BEDT-TTF})_x \text{Cu}_y (\text{CN})_z$ را با مدل هابارد ذکر شده، روی یک شبکه مثلثی همسانگرد تقریباً نیمه‌پر تصور کرد، و از آن به عنوان فاز مایع اسپینی یاد کرد. در این فاز ماده نارسا بوده و از لحاظ مغناطیسی فاقد نظم بلندبرد است [۱۰]. یک خوشه شش‌جایگاهی در شکل ۱ نمایش داده شده است. همسایگان اول و دوم در آن به ترتیب با t و t' نشان داده می‌شوند. به ازای $t' \neq t$ خوشه نماینده یک شبکه مثلثی ناهمسانگرد هستیم و $t' = t$ شبکه مثلثی همسانگرد را نشان می‌دهد. علاوه بر این، اثر بزرگی خوشه در مسئله به تفصیل در مراجع [۷ و ۹] مورد بررسی قرار گرفته است، و به علت آن که تفاوت فاحشی در محاسبات به وجود نمی‌آورد، و از

$\text{Cu}(\text{NCS})_2$ و یا $\text{Cu}_2(\text{NC})_3$ باشد که به ترتیب دارای ناهمسانگردی $t'/t = 0.68$ ، 0.75 ، 0.84 و 1.06 می‌باشند [۴-۱].

تاکنون مطالعات زیادی بر روی خواص مغناطیسی و ابررسانایی متعارف بر روی این پلیمرها انجام پذیرفته است، از جمله شمار قابل توجهی از پدیده‌های فیزیکی ناشی از برهم‌کنش‌های الکترونی در این ساختارها، همانند مجاورت فاز و گذار فازهای پادرومغناطیسی و ابررسانایی، مشاهده شده است. مدل هایزنبرگ کوانتومی بر روی شبکه‌های مربعی منجر به نظم بلندبرد نیل می‌شود، اما وجود این در مورد یک شبکه مثلثی همسان‌گرد به علت وجود ناکامی در جفت‌شدگی بین اسپین‌های نزدیک‌ترین همسایه بحث‌برانگیز است. مقایسه با حالت پایه کلاسیکی با پیکربندی سه زیرشبکه‌ای اسپین $S = \frac{1}{2}$ با جهت‌گیری 120° درجه نشان می‌دهد که این نظم می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای مدل کوانتومی مورد بحث باشد. با این حال مطالعه بر روی خواص رسانایی آنها نشان داده است که در مواردی که به علت وجود ناکامی هندسی موجب عدم وجود نظم‌های یاد شده می‌شود، حالت پایه تبدیل به حالت مایع کوانتومی اسپینی خواهد شد، به عبارتی در دماهای بسیار پایین اسپین الکترون‌ها توزیع کاتوره‌ای داشته و تمایل به نظم بلندبرد خاصی هم در دستگاه وجود ندارد.

۲. مدل هابارد و نظم بلندبرد

یکی از مهمترین مدل‌هایی که برای مطالعه مغناطیس میکروسکوپی در دستگاه‌های دارای همبستگی الکترونی به کار می‌رود مدل هابارد تک‌نواری است [۵]. در حالت نیمه‌پر ($n=1$) پادرومغناطیس می‌تواند جواب مشخصی برای این مدل باشد، در حالی که دور از حالت نیمه‌پر و با اعمال آرایش احتمال وجود نظم‌های پیچیده دیگری در مدل نیز امکان‌پذیر است. علاوه بر این می‌توان فاز ابررسانایی را نیز در این مدل مطالعه نمود. در فاز ابررسانایی یک ناپایداری در حالت پایه موجب برهم‌کنش‌های مؤثر جاذبه می‌شود [۶]. نشان داده شده

واقعی به دست آورد. استفاده از روش‌های محاسباتی در دستگاه‌های بس‌ذره‌ای، بستگی به درجات آزادی آنها دارد و تعداد درجات آزادی به سرعت با میزان بزرگی دستگاه افزایش می‌یابد. از این رو محاسبات محدود به دستگاه‌های نسبتاً کوچک خواهد بود. در این میان تقریب اختلال خوشه‌ای، که تابع گرین در آن بر مبنای اختلالی محاسبه می‌شود، در به دست آوردن خواص فیزیکی مواد جدید موفق بوده است [۱۷]. هدف این روش به دست آوردن تابع گرین تک‌ذره‌ای برای هامیلتونی مشخص H دستگاه است. بدین منظور شبکه به خوشه‌های هم‌اندازه تقسیم‌بندی می‌شود. اغلب اوقات می‌توان جواب مدل مورد نظر را به طور دقیق، مثلاً با قطری‌سازی دقیق، محاسبه نمود [۱۸].

در روش تقریب اختلال خوشه‌ای، ابتدا شبکه نامحدود جایگاه‌ها را به خوشه‌های یکسان مستقل، با اندازه محدود تقسیم‌بندی می‌شود. سپس با در دست داشتن حالت پایه $|\Omega\rangle$ با انرژی E_Ω ، می‌توان تابع گرین الکترون‌های برهم‌کنشی برای یک خوشه مستقل را در دمای صفر محاسبه نمود. این تابع گرین یک بخش الکترونی و یک بخش ناشی از حفره‌ها خواهد داشت:

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon) = G_{\alpha\beta}^{(e)}(\varepsilon) + G_{\alpha\beta}^{(h)}(\varepsilon), \quad (2)$$

که در آن $G_{\alpha\beta}^{(e)}(\varepsilon)$ ، قسمت مربوط به الکترونی تابع گرین عبارت است از

$$G_{\alpha\beta}^{(e)}(\varepsilon) = \Omega |c_\alpha \frac{1}{\varepsilon - H + E_\Omega} c_\beta^\dagger| \Omega, \quad (3)$$

و $G_{\alpha\beta}^{(h)}(\varepsilon)$ ، قسمت مربوط به حفره تابع گرین عبارت است از

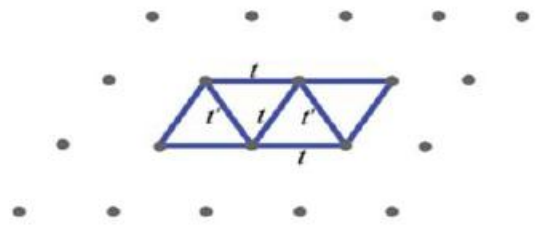
$$G_{\alpha\beta}^{(h)}(\varepsilon) = \Omega |c_\beta^\dagger \frac{1}{\varepsilon + H - E_\Omega} c_\alpha| \Omega. \quad (4)$$

در روابط بالا، c_α و c_β^\dagger به ترتیب عملگرهای فنا و خلق اوربیتال‌های ونیر α و β بوده و z بسامد مختلط است. شناسه α شامل شناسه‌های جایگاهی و همچنین اسپینی می‌باشد.

در روابط بالا هامیلتونی دستگاه شبکه کامل را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = H' + H\gamma, \quad (5)$$

که در آن H' قسمتی از هامیلتونی مربوط به یک خوشه بوده و



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) شبکه مثلثی شش‌جایگاهی و نظم پیچشی بردارهای انتقال خوشه نیز در شکل مشخص شده‌اند.

طرفی محاسبات با خوشه‌های بزرگتر مشکلات محاسباتی و نیازهای رایانه‌ای خاص خود را به همراه دارد، ما محاسبات خود را محدود به خوشه‌های شش‌جایگاهی می‌نماییم. در عمل، این نتیجه ناشی از اعمال هندسه بر مغناطیس کوانتومی است، که در آن حالت پایه کلاسیکی به صورت منظم چرخشی بوده، و مغناطش در هر یک از سه زیرشبکه به اندازه 120° درجه با دیگر جهت‌ها قرار می‌گیرد. مطالعات مونت کارلو روی مدل هایزنبرگ کوانتومی بر یک شبکه مثلثی نیز وجود نظم چرخشی را با مغناطش $m \approx 0.41$ نشان می‌دهد [۱۱]. این نتایج از آنجا اهمیت دارد که به ازای همبستگی قوی $t \gg U$ ، ثابت ابرتبادلی $\sim \frac{2t^2}{U}$ شده و مدل هایزنبرگ از مدل هابارد نتیجه خواهد شد. مطالعات میدان میانگین روی نظم چرخشی با بررسی سختی اسپینی^۱ نشان می‌دهد که این نظم به ازای $U \geq 6$ امکان وجود خواهد داشت [۱۲ و ۱۳]. در وضعیت مثلثی همسانگرد با استفاده از روش‌های بوزون برده^۲ به طور کیفی سیمای فاز مشابه با نتایج هارتری فوک به دست می‌آید. که گذار از فاز فلزی به فاز مغناطیسی در آن دیده می‌شود [۱۴]. علاوه بر این فاز عایق مات نیز در غیاب نظم چرخشی بررسی شده است [۷، ۱۵ و ۱۶].

۳. نظریه اختلال خوشه‌ای و تقریب خوشه‌ای وردشی

۳.۱. تقریب اختلال خوشه‌ای

استفاده از تقریب‌های عددی این امکان را فراهم آورده است که بتوان به طور کمی و کیفی تصویر درستی از فیزیک دستگاه‌های

۱. Spin stiffness

۲. Slave bosons

یکسان محدود تقسیم‌بندی می‌شوند و سپس هامیلتونی دستگاه به دو بخش تفکیک می‌شود: بخش مربوط به خوشه‌ها و بخش بین‌خوشه‌ای، به عبارتی خواهیم داشت $H = H_0(t) + H_1(U)$ ، که در آن $H_0(t)$ تابع تک‌ذره‌ای است که به مجموعه جملات پرشی محدود می‌شود، و $H_1(U)$ جمله دوزره‌ای و بنابراین موضعی است. این موضوع اخیر باعث می‌شود تا بتوانیم شبکه را به خوشه‌های ناهمپوشان محدود تفکیک کنیم که از طریق H_1 به هم مربوط نمی‌شوند. در ساده‌ترین حالت، $H_1(U)$ فقط می‌تواند از جنس دافعه هابارد باشد. ولی در حالت کلی‌تر این بخش شامل جملات دوزره‌ای دیگری نیز خواهد بود.

هدف ما یافتن برانگیختگی‌های تک‌ذره‌ای دستگاه در دمای T و پتانسیل شیمیایی μ ، در ترمودینامیک تعادلی است، که این هدف از طریق محاسبه تابع گرین تک‌ذره‌ای G تحقق می‌یابد. می‌توان تابع گرین را با استفاده از معادله دایسون به دست آورد $G = G_0 + G_0 \Sigma G$ ،

که در آن Σ خود-انرژی و $G_0 = (\omega + \mu - t)^{-1}$ تابع گرین بدون برهم‌کنش است.

اگر فرض کنیم که تابع گرین خود تابعی از کمیت‌های فیزیکی دستگاه، یعنی t و U و سایر کمیت‌های فیزیکی از جمله دما، حجم و فشار باشد، آنگاه می‌توان پتانسیل ترمودینامیکی دستگاه را به صورت یک تابعی از این تابع گرین نوشت

$$\Omega = \Omega[G] \quad (8)$$

و از آنجایی که برای تابع گرین فیزیکی دستگاه داریم $G = G(t, U)$ ، آنگاه می‌توان برای در حالت تعادل این پتانسیل ترمودینامیکی را مستقیماً بر حسب کمیت‌های فیزیکی ذکر شده دستگاه نوشت

$$\Omega[G(t, U)] = \Omega_{t, U} \quad (9)$$

که در آن داریم

$$\Omega_{t, U} = -T \ln \text{Tr} \exp\left(-\frac{VH}{k_B T}\right) \quad (10)$$

تابعی $\Omega[G]$ به ازای مقادیر فیزیکی تابع گرین پایسته است

$$\delta \Omega_{t, U} [G - G^*] = 0 \quad (11)$$

به عبارتی با در دست داشتن تابعی پتانسیل، می‌توان از قاعده

H_T قسمت بین‌خوشه‌ای است، بدین صورت که H' شامل جملات تک‌ذره‌ای پرش در داخل خوشه به علاوه جملات برهم‌کنش جایگاهی هابارد است، در حالی که H_T تنها پرش بین خوشه‌ها را شامل می‌شود. اکنون در تقریب اختلال خوشه‌ای، برای به دست آوردن تابع گرین کل دستگاه شبکه $G(\omega)$ داریم [۱۸]

$$G(\omega) = (G_0^{-1} - H_T)^{-1} \quad (6)$$

که در آن G' تابع گرین یک خوشه است، که برای خوشه محدود به دقت قابل محاسبه می‌باشد. مهمترین توفیق نظریه اختلال خوشه‌ای امکان محاسبه تابع طیفی است،

$$A(k, \omega) = -2 \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} G(k, \omega + i\eta) \quad (7)$$

که اطلاعاتی درباره سطح فرمی ماده در اختیار می‌گذارد، و با آزمایش‌های طیف‌نگاری تفکیک زاویه‌ای تابش فوتون^۲ (ARPES) به طور تجربی قابل مقایسه مستقیم است [۱۹]. باید توجه داشت که در تقریب ذکر شده می‌توان از خودانرژی^۳ مربوط به یک خوشه Σ' به جای خودانرژی کل شبکه Σ استفاده نمود. برای مطالعه بیشتر در مورد این تقریب می‌توانید به مراجع [۱۸ و ۲۰] مراجعه کنید.

۳.۲. تقریب وردشی خوشه‌ای

در روش اختلال خوشه‌ای، پرش بین خوشه‌ها به عنوان اختلال در نظر گرفته شده، و تابع گرین هامیلتونی هابارد به روش اختلالی بس‌ذره‌ای محاسبه می‌شود. علیرغم این که این تقریب اطلاعات خوبی از سطح فرمی ماده مورد نظر به ما می‌دهد با این حال نمی‌تواند فازهای شکست تقارن را به دست دهد. می‌توان این روش را به تقریب قدرتمند وردشی خوشه‌ای تعمیم داد، به این صورت که با اضافه نمودن میدان وایس به هامیلتونی، و به کارگیری اصول وردشی تابعی^۴ می‌توان به پیکربندی فیزیکی بهینه برای دستگاه دست یافت. بدین منظور در ابتدا، همانند روش اختلال خوشه‌ای، شبکه به خوشه‌های

^۲ Angle Resolved Photoemission Spectroscopy

^۴ Functional variation

محاسبه شد، بر حسب تابع گرین $\Sigma = \Sigma[G]$ معکوس‌پذیر باشد، یعنی داشته باشیم $G = G[\Sigma]$ در این صورت قاعده وردشی مشابه بالا $\delta \Omega_{F,U}[\Sigma] / \delta \Sigma = 0$ منتهی به معادله دایسون خواهد شد، یعنی $G[\Sigma] = (G_0^{-1} - \Sigma)^{-1}$ جهانی بودن تابع لاینجر- وارد و مشتق آن باعث می‌شود که بتوان آن را برای یک دستگاه فیزیکی، برای مثال برای یک دستگاه مرجع محدود اما واقعی، به دست آورد و با استفاده از یکسان بودن نتیجه آن با تابع مربوط به دستگاه نامحدود، برای پتانسیل بزرگ دستگاه اصلی عبارتی برحسب پتانسیل بزرگ دستگاه مرجع یافت

$$\Omega_{F,U} = \Omega'_{F,U} - \text{Tr} \ln(-(G')^{-1}) - \text{Tr} \ln(G_0^{-1} - \Sigma)^{-1}. \quad (15)$$

در رابطه بالا کلیه توابع پریم‌دار مربوط به دستگاه مرجع محدودی است که مسئله برای آن به طور دقیق قابل حل است. با قرار دادن متغیرهای فیزیکی در تابعی‌های مربوطه، تابعی کل به صورت یک تابع معمولی از متغیرهای فیزیکی در خواهد آمد، که به روش وردشی می‌توان مقدار پایای آن را جستجو نمود، و این مقدار پایا به ازای متغیرهای فیزیکی مورد نظر خواهد بود

$$\left. \frac{\partial \Omega(t')}{\partial t'} \right|_{\{t'=t'_s\}} = 0 \quad (16)$$

که در آن $\{t'_s\}$ مجموعه متغیرهای فیزیکی در حالت پایاست. تفاوت دستگاه مرجع (خوشه) با هامیلتونی H' نسبت به دستگاه اصلی (شبکه) با هامیلتونی H در قسمت جنبشی آن است، و عموماً داریم $t' \neq t$ ، اما قسمت برهم‌کنشی دو هامیلتونی آنها یکسان است. هدف از انتخاب دستگاه مرجع تعیین حوزه تابعی پتانسیل بزرگ است، بدین صورت که فضای خودانرژی‌ها به گونه‌ای تعیین می‌شود که مقدار بهینه تابع پتانسیل بزرگ $\Omega[\Sigma]$ در آن اتفاق بیفتد. برای این منظور باید دستگاه مرجعی اختیار کنیم که دو شرط اساسی متضاد را برآورده کند: اولاً باید فضای بزرگ ضرایب t' را در بر بگیرد، و ثانیاً همزمان این فضا آنقدر محدود باشد تا محاسبات امکان‌پذیر باشد. با این تفصیلات تنها تقریب انجام شده، محدود کردن فضای خودانرژی‌ها به مجموعه خودانرژی‌های دقیقی یک دسته از هامیلتونی‌های خوشه‌ای است، که دارای برهم‌کنش یکسان با هامیلتونی شبکه است. به ویژه آثار

وردشی (تابعی) استفاده نمود و تابع گرین فیزیکی G^* را محاسبه کرد.

بسط دیاگرامی از پتانسیل ترمودینامیکی بر حسب توابع گرین کامل برهم‌کنشی توسط لاینجر و وارد ارایه شده است [۲۱]. ایشان تابعی خود را $\Phi_U[G]$ ، برای یک هامیلتونی بس‌ذره‌ای برای برهم‌کنش دوزره‌ای به شکل $H_U = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}$ بنا نمودند. این تابعی بر مبنای جمع روی همه دیاگرام‌های تقلیل‌ناپذیر بسته شامل توابع گرین بازبهنجار شده کامل نوشته می‌شود. در حد غیربرهم‌کنشی ($U=0$) داریم $\Phi_U[G]=0$ مهم‌ترین خصلت تابعی لاینجر- وارد $\Phi_U[G]$ این است که به بخش جنبشی هامیلتونی $H_s(t)$ وابسته نبوده و شکل تابعی آن برای کلیه هامیلتونی‌هایی که دارای برهم‌کنش دوزره‌ای مشابه هستند، یکسان است. این بدان معنی است که تابعی لاینجر- وارد یک تابعی جهانی است. از تعریف دیاگرامی تابعی $\Phi_U[G]$ می‌توان نشان داد که مشتق تابعی $\delta \Phi_U[G] / \delta G$ دیاگرام خود انرژی را نتیجه می‌دهد [۲۰]:

$$\Sigma_U[G] = \frac{1}{T} \frac{\delta \Phi_U[G]}{\delta G}, \quad (17)$$

که خود یک تابعی از تابع گرین G است. در این صورت بدیهی است که به ازای یک تابع گرین فیزیکی G^* ، تابعی خود انرژی $\Sigma_U[G]$ برابر است با یک خود-انرژی فیزیکی Σ^* . به طریقی مشابه استدلال می‌شود که $\Sigma[G]$ یک تابعی جهانی است.

علی‌رغم آن که $\Phi_U[G]$ حتی برای ساده‌ترین هامیلتونی‌ها نامعلوم است، می‌توان با استفاده از معادله دایسون تابعی پتانسیل بزرگ را بر حسب تابع گرین $\Omega_{F,U}[G]$ یا بر حسب تابع خودانرژی $\Omega_{F,U}[\Sigma]$ نوشت

$$\Omega_{F,U}[G] = \Phi_U[G] + \text{Tr} \ln G - \text{Tr} \left[(G_0^{-1} - G^{-1}) G \right]. \quad (18)$$

به ازای توابع فیزیکی G^* یا Σ^* ، یک چنین تابع پتانسیل بزرگی مانا خواهد بود، یعنی با استفاده از قواعد وردشی خواهیم داشت

$$\left. \frac{\delta \Omega_{F,U}[G]}{\delta G} \right|_{G=G_s} = 0, \quad (19)$$

می‌توان فرض کرد که رابطه تابع خود-انرژی که در بالا

درجه تا چه حد پابرجا خواهد بود و اصولاً سیمای فاز آن چگونه اصلاح می‌شود. با توجه به این که اعتبار محاسبات برای انواع خوشه‌ها با بزرگی متفاوت در کارهای پیشین تحقیق شده است [۹]، در اینجا تنها از خوشه‌های ۶- جایگاهی استفاده شده است. عبارت میدان وایس برای نظم مغناطیسی چرخشی به صورت زیر تعریف می‌شود

$$H'_h = h \left\{ \sum_{i \in A} \hat{e}_A \cdot S_i + \sum_{i \in B} \hat{e}_B \cdot S_i + \sum_{i \in C} \hat{e}_C \cdot S_i \right\}, \quad (17)$$

که در آن A ، B و C نمایشگر سه زیرشبکه متعلق به شبکه مثلثی، \hat{e}_A ، \hat{e}_B و \hat{e}_C بردارهای یکه در امتداد سه جهت که با هم زاویه 120° درجه می‌سازند، و $S_i = c_{i,\alpha}^\dagger \sigma_{C_i,\beta}$ عملگر اسپینی است. برای محاسبه پارامتر نظم چرخشی

$$m = \gamma_i \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(i\omega, K) H'_h, \quad (18)$$

که در آن انتگرال روی بسامد در امتداد مثبت محور موهومی بوده و جمع روی جایگاه‌ها و اسپین‌ها در مورد تابع گرین و میدان وایس باید انجام شود. در محاسبات وردشی خوشه‌ای کمیت‌های وردشی h در H' و پتانسیل شیمیایی μ' هستند، و $\mu' = \mu$ حد ترمودینامیکی را تضمین می‌کند، یعنی حدی که در آن $n = \text{Tr } G$ و $n = -\partial \Omega / \partial \mu$ با هم یکسان می‌شوند (شکل ۲).

۵. نتایج و بحث

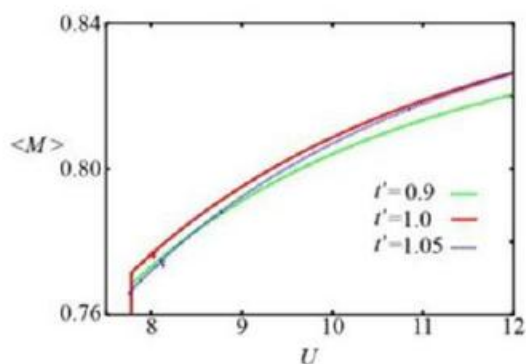
در این تحقیق مدل هابارد برای یک شبکه مثلثی ناهمسانگرد در نظر گرفته شده، و امکان وجود نظم پیچشی در آن به ازای $t' \neq t$ بررسی می‌شود. پیش از این نظم پیچشی به ازای $t' = t$ در دستگاه‌های همسانگرد مثلثی برای برهم‌کنش‌های $U > 8$ گزارش شده بود. در اینجا با در نظر گرفتن پارامتر نظم پیچشی به صورت آنچه که در رابطه (۱۸) معرفی شده بود، با انجام سازوکار وردشی کمینه تابع پتانسیل بزرگ جستجو می‌شود. در شکل ۲ نمودار پتانسیل بزرگ Ω بر حسب میدان وایس M نشان داده شده است، که به ازای دو مقدار $\frac{U}{t} = 7$ و $\frac{U}{t} = 12$

برهم‌کنش‌های کوتاه‌برد در تابع گرین دقیقاً خوشه منعکس خواهد بود. بنابراین می‌توان از چندین کمیت وردشی از جمله میدان‌های وایس ابرسانایی و مغناطیسی و پتانسیل شیمیایی سود برد. کمیت اخیر برای تضمین حد ترمودینامیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

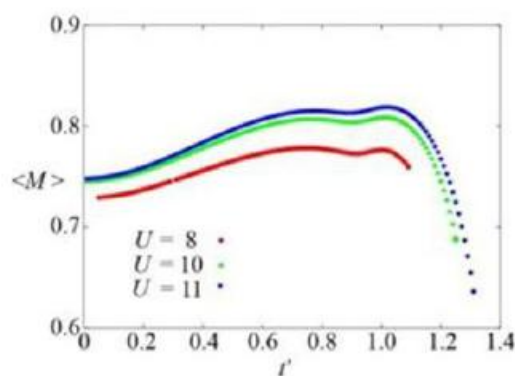
۴. نظم پیچشی در شبکه مثلثی

به علت وجود ناکامی هندسی در شبکه‌های مثلثی، مطالعات مختلف منجر به مشاهده فازهای متعددی در هامیلتونی هابارد نیمه‌پر برای مواد آلی $(\text{BEDT-TTF})_x \text{Cu}_y(\text{CN})_z$ با ساختاری دوبعدی نزدیک به مثلث متقارن شده است. از جمله انواع فازهای ابرسانایی با شکل گاف متفاوت، و فاز مایع اسپینی کوانتومی است که در عمل به طور مغناطیسی نامنظم و از لحاظ رسانندگی عایق است. با برهم زدن تقارن مثلث به یک مثلث ناهمسان‌گرد، و بر اثر رقابت بین آثار برهم‌کنشی و ناکامی، فاز نظم مغناطیسی نیبل به ازای برهم‌کنش U متفاوت گزارش شده‌اند. علاوه بر این بررسی در وجود فاز مغناطیسی غیرنیبل در شبکه مثلثی همگون منجر به یافتن یک نظم کلاسیکی پیچشی در حالت پایه در مجاورت محدوده $t' = t$ می‌شود، که در آن مغناطش در هر یک از سه زیرشبکه‌ای که با هم زاویه 120° درجه می‌سازند، شده است [۹]. مطالعات تقریب میدان میانگین بر مبنای سختی اسپینی، علاوه بر اثبات وجود این نظم، نشان می‌دهد که به ازای $U \geq 6$ نظم پیچشی در دستگاه مثلثی وجود خواهد داشت [۱۲ و ۱۳]. روش بوزون برده نیز سیمای فازی مشابه محاسبات نتایج هارتری-فوک ارائه می‌کند که در آن به یک گذار فاز مستقیم بین فاز فلزی و فاز مغناطیسی، بدون حضور فاز مایع اسپینی گزارش شده است [۱۴].

سؤال اصلی در اینجا این است که محدوده وجودی نظم پیچشی در مدل هابارد که در تقابل با فاز مایع اسپینی کوانتومی است، تا کجاست. در این پژوهش با استفاده از روش وردشی خوشه‌ای تحقیق خواهیم کرد که بر حسب تغییر همگونی شبکه مثلثی متقارن، یعنی افزایش t' در مقابل t ، نظم پیچشی 120°



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) پارامتر نظم مغناطیسی پیچشی بر حسب قدرت برهم‌کنش U به ازای سه مقدار متفاوت ناهمسانگردی.

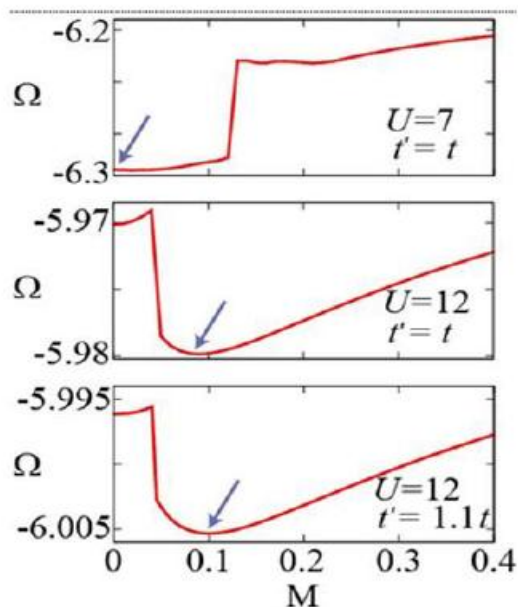


شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) پارامتر نظم مغناطیسی پیچشی بر حسب مقدار ناهمسانگردی t'/t .

سایر کمینه‌هاست برگزید.

در شکل ۳ منحنی پارامتر نظم پیچشی بر حسب قدرت برهم‌کنش، برای سه مقدار مختلف ضریب پرش به همسایه دوم t' آورده شده است. همان گونه که مشاهده می‌شود در مقادیر زیاد برهم‌کنش، بزرگ بودن پارامتر نظم بیان‌گر این است که نظم پیچشی مقداری قابل توجه دارد. با کاهش برهم‌کنش U ، پارامتر نظم به ازای هر سه مقدار t' تقریباً در یک مقدار واحد به صفر میل می‌کند، که این مقدار بحرانی برهم‌کنش تقریباً برابر است با $U_{cc} \approx 7/5t$ نکته دیگری که از نمودارها قابل درک است این است که چه با افزایش و چه با کاهش ضریب پرش به همسایه بعدی، میزان نظم کاهش می‌یابد. به عبارت دیگر، نظم پیچشی تمایل به حضور در شبکه مثلثی همسانگرد دارد، و با افزایش ناهمسانگردی نظم تضعیف خواهد شد.

شکل ۴ تغییرات پارامتر نظم بر حسب تغییرات



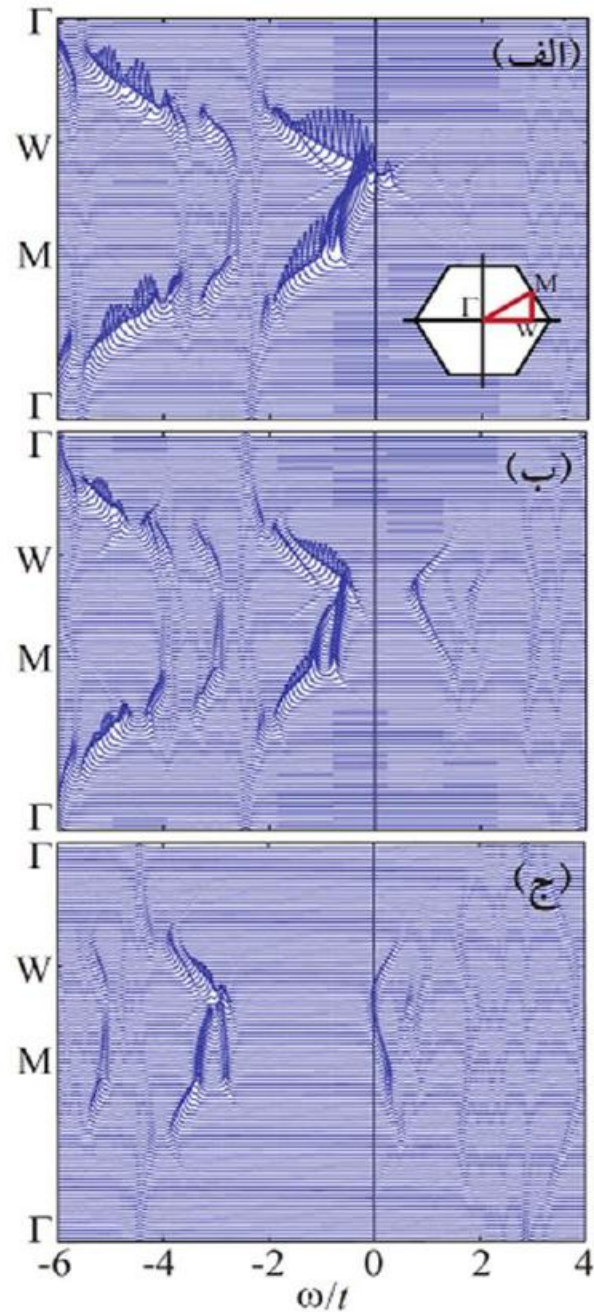
شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) منحنی پتانسیل ترمودینامیکی بزرگ محاسبه شده بر حسب میدان واپس مربوط به نظم پیچشی 120° درجه M کمینه در این منحنی‌ها، که با پیکان مشخص شده است، میدانی را می‌دهد که ناشی از وجود این نظم در شبکه مثلثی ناهمسانگرد شش‌جایگاهی است. مقادیر به دست آمده در دو منحنی اول با شرط $t' = t$ و به ازای $U = 7$ (منحنی بالا) و $U = 12$ (منحنی وسط) محاسبه شده است. منحنی پایین با شرط $t' = 1/4t$ و برای $U = 12$ به دست آمده است.

رسم شده است. همان طور که در شکل دیده می‌شود منحنی دارای کمینه‌هایی است. کمینه Ω به ازای $\frac{U}{t} = 12$ با پیکان نمائشی داده شده است، که مقداری غیرصفر دارد. کمینه مورد نظر مربوط به میدان واپسی است که به ازای آن تابعی یک تابعی فیزیکی خواهد بود. در این منحنی کمینه‌ای که در صفر اتفاق افتاده است به این دلیل که Ω آن بیشتر است، قابل قبول نیست. به ازای $\frac{U}{t} = 7$ مقدار کمینه Ω در $M = 0$ اتفاق می‌افتد و این نمایان‌گر آن است که نظم پیچشی به ازای $\frac{U}{t} = 7$ وجود ندارد. لازم به ذکر است که برای برقراری حد ترمودینامیکی، تابع Ω به طور هم‌زمان نسبت به کمیت وردشی پتانسیل شیمیایی نیز مورد بررسی قرار می‌گیرد. در صورت لزوم می‌توان سایر کمیت‌های فیزیکی مورد نظر را به عنوان کمیت‌های وردشی بررسی نموده، و کمینه تابع پتانسیل بزرگ را که دارای انرژی پایین‌تری نسبت با

برهم کنش انتظار خواهیم داشت که این نظم رو به افول گذارد. از سوی دیگر با افزایش میزان ناهمسانگردی برای مقادیر بزرگتر از پارامتر نظم به سمت صفر خواهد رفت، و این تضعیف به ازای U های کوچکتر در مقادیر کوچکتر ناهمسانگردی اتفاق می افتد. با افزایش بیشتر U ، ناپدید شدن نظم به ازای افزایش ضریب پرش t' سریع تر رخ می دهد، و انتظار می رود که در مقادیر $\frac{t'}{t} \gtrsim 1.35$ نظم پیچشی وجود نداشته باشد. از طرفی با کاهش مقدار U ، علی رغم آن که نظم پیچشی از بین می رود اما دستگاه همچنان دارای گاف انرژی است [۲۲]. این نشان دهنده آن است که دستگاه کماکان عایق باقی خواهد ماند، اما در آن نظم مغناطیسی چه از نوع پیچشی و چه از نوع پادفرومغناطیس وجود نخواهد داشت. این فاز را که در آن دستگاه عایق پارامغناطیسی است، می توان فاز مایع کوانتومی اسپینی در نظر گرفت. در شکل ۵ رفتار تابع طیفی را مشاهده می کنیم که برای سه مقدار مختلف U رسم شده است. در پنجره پایینی شکل ۵ (ج)، به ازای $U=8$ ، دستگاه در فاز مغناطیسی پیچشی است، و گاف انرژی مغناطیسی در آن مشهود است. در شکل ۵ (الف)، به ازای $U=4$ و مقادیر کمتر از آن، گاف در انرژی وجود ندارد و دستگاه نمایانگر یک فلز است. در تحقیق های قبلی فاز ابررسانایی موج-d در این ناحیه مشاهده شده است [۷]. شکل ۵ (ب) نمودار انرژی در فضای وارون به ازای $U=6$ در ناحیه مایع کوانتومی اسپینی نمایش داده شده است. در این مقدار برهم کنش با وجود این که گاف انرژی نشانگر عایق مات در دستگاه است، و نظم پیچشی در این ناحیه وجود ندارد. مسیر با تقارن بالایی که برای تعیین توابع طیفی انتخاب شده است در پنجره کوچکی در شکل ۵ (الف) نشان داده شده است.

۶. جمع بندی

در این پژوهش نظم مغناطیسی پیچشی 120° درجه در مدل هابارد دستگاه های شبکه مثلثی بررسی شد. پیش از این این نظم تنها برای شبکه مثلثی همسانگرد تحقیق شده بود [۹]. با توجه به این که به علت وجود ناکامی هندسی در دستگاه های مثلثی شکل، احتمال وجود فاز مایع اسپینی در مجاورت حالت $t'=t$ که در



شکل ۵. نمودارهای تابع طیفی برای شبکه مثلثی ناهمسانگرد به ازای $\frac{t'}{t} = 1.05$ ، برای مقادیر قدرت برهم کنش (الف) $U=4$ ، (ب) $U=6$ و (ج) $U=8$. مسیر انتخاب شده با تقارن بالا در شبکه بریلوئن در پنجره داخلی شکل (الف) آمده است.

همسانگردی، برای سه مقدار معین قدرت برهم کنش، را نشان می دهد. این منحنی ها تأیید می کنند که با افزایش میزان برهم کنش نظم پیچشی پایدارتر خواهد بود و در مقادیر کوچک

است $۰/۸۵ \leq \frac{t'}{t} \leq ۱/۳۵$ از طرفی این فاز مغناطیسی ۱۲۰° درجه به ازای $U \gtrsim ۷/۵$ نظم پیچشی وجود خواهد داشت.

قدردانی

غالب محاسبات انجام شده، روی گره‌های ابررایانه محاسباتی کبک به نام ماموت متعلق به رشته ابررایانه‌های محاسباتی کانادا انجام پذیرفته است. بدین وسیله از جناب آقای پروفیسور دیوید سنشال به علت فراهم آوردن امکان استفاده از این ابررایانه قدردانی می‌شود.

آن نظم مغناطیسی نیل غایب است، قویاً وجود دارد، در این مقاله سعی شده است که محدوده وجود نظم پیچشی مشخص شود. درجه همسانگردی در مدل هابارد به صورت مقدار t'/t تعریف شده است. دیده می‌شود که با ازای $۱/۳۵ \leq \frac{t'}{t} \leq ۰/۸۵$ به واسطه غیر صفر بودن میدان وایس پیچشی در فرایند وردشی، نظم پیچشی در شبکه مثلثی وجود دارد. این نظم با افزایش ناهمسانگردی به مقادیر کوچکتر t'/t دوام می‌یابد، اما با توجه به این که در پژوهش‌های قبل به ازای $۰/۸۵ \leq \frac{t'}{t} \leq ۱/۳۵$ فاز پادفرومغناطیسی نیل غالب است [۷ و ۸]، بنابراین محدوده وجود نظم پیچشی عبارت

مراجع

1. A M Kini *et al.*, *Inorg. Chem.* **29** (1990) 2555.
2. N D Kusuch, M A Tanatar, E B Yagubskii, and T Ishiguro, *JETP Lett.* **7** (2001) 429.
3. H Urayama *et al.*, *J. Chem. Lett.* **55** (1988).
4. U Geiser *et al.*, *Inorg. Chem.* **30** (1991) 2586.
5. J Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London A* **1365** (1963), 238.
6. P W Anderson, *Science* **235**, 4793 (1987) 1196.
7. P Sahebsara and D Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 25 (2006) 257004.
8. P Sahebsara and D Sénéchal, *Iranian Journal of Physics Research* **6**, 3 (2006) 179.
9. P Sahebsara and D Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 13 (2006) 136402.
10. Y Shimizu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 10 (2003) 107001; *ibid. Phys. Rev. B* **73**, 14 (2006) 140407.
11. L Capriotti *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 19 (1999) 3899.
12. R Côté and A-M Tremblay, *Europhys. Lett.* **29** (1995) 37.
13. A Singh, *Phys. Rev. B* **71**, 21 (2005) 214406.
14. M Capone, L Capriotti, F Becca, and S Caprara, *Phys. Rev. B* **63**, 8 (2001) 085104.
15. B Kyung, A Georges, and A-M Tremblay, *Phys. Rev. B* **74**, 2 (2006) 024501.
16. H Morita, S Watanabe, and M Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71** (2002) 2109.
17. D Sénéchal, "Cluster Perturbation Theory", Book Chapter in "Strongly Correlated Systems: Theoretical Methods", Eds. A Avella and F Mancini, Springer Series in Solid-State Sciences (2012).
18. D Sénéchal, D Perez, and M Pioro-Ladrière. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3 (2000) 522; D Sénéchal, D Perez, and D Plouffe, *Phys. Rev. B* **66**, 7 (2002) 075129.
19. A Damascelli, *Physica Scripta T* **109** (2004) 61.
20. M Potthoff, *The European Physical Journal B* **32** (2003) 429; M Potthoff, *Condens. Mat. Phys.* **9** (2006) 557.
21. J M Luttinger and J C Ward, *Phys. Rev.* **118**, 5 (1960) 1417.
22. P Sahebsara, *Iranian Journal of Physics Research* **8**, 2 (2008) 131.