

## رقابت بین حالت‌های ابرسانایی اسپین - تک‌تایی و - سه‌تایی در مدل آلاییده 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 نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۰۲/۰۷)

### چکیده

اخیراً مدل هایزنبرگ- کیتائو گسترده برای توصیف عایق‌های مات اسپین- مدار لایه نظیر اکسید ایریدیت‌ها و  $\alpha-RuCl_3$  با شبکه لانه زنبوری مطرح شده است. در این مقاله با شروع از مدل آلاییده  $t-JK\Gamma$  با حفره، پایداری فازهای ابرسانایی اسپین- تک‌تایی و - سه‌تایی را به خاطر رقابت بین برهم‌کنش‌های تبدیلی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس بررسی می‌کنیم. حل عددی خودسازگار معادلات گاف خطی نشان می‌دهد که برهم‌کنش‌های تبدیلی هایزنبرگ و کیتائو فرومغناطیس به تنهایی می‌توانند باعث پایداری فاز ابرسانایی اسپین- سه‌تایی در این دسته از مواد شوند. در ضمن، برهم‌کنش غیرقطری  $\Gamma$  منجر به گسترش ناحیه حالت اسپین- سه‌تایی در سیمای فاز مدل آلاییده هایزنبرگ- کیتائو با  $K < 0$  و  $J_H > 0$  می‌شود. همچنین نتایج نشان می‌دهد که برهم‌کنش غیرقطری فرومغناطیس به تنهایی در مقابل برهم‌کنش‌های هایزنبرگ و کیتائو پادفرومغناطیس نمی‌تواند باعث پایداری فاز موج  $p$ - شود.

واژه‌های کلیدی: عایق مات اسپین مدار، ابرسانای غیرمتعارف، مدل هایزنبرگ- کیتائو گسترده

### ۱. مقدمه

قابل حل است، فاز مایع اسپینی کوانتومی توپولوژی است [۹]. شبه ذرات برانگیخته حالت مایع اسپینی کوانتومی، مایوران‌های فرمیونی هستند که از آمار غیرآبلی تبعیت می‌کنند. به خاطر اهمیت مایوران‌های فرمیونی در محاسبات کوانتومی توپولوژی، مطالعه مواد کیتائو مورد توجه فیزیکدانان قرار گرفته است [۹]. اثر متقابل برهم‌کنش‌های اسپین- مدار و کولنی همراه با اثر میدان بلوری در اکسید عناصر واسطه لایه‌ای که اربیتال  $4d$  و  $5d$  آنها به صورت جزئی پر شده است، این دسته از مواد را در

مطالعه فاز مایع اسپین کوانتومی [۱-۲] با مشخصاتی نظیر برانگیختگی‌های کسری و نظم توپولوژیکی [۳-۴] در فیزیک ماده 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 ابرساناهای غیرمتعارف توپولوژی گسترش یافته است [۷-۸]. حالت پایه مدل کیتائو شبکه لانه زنبوری دو بُعدی، که به صورت دقیق

هایزنبرگ ( $J_H$ ) و همچنین برهم‌کنش‌های وابسته به پیوند کیتائو ( $K$ ) و غیرقطری ( $\Gamma$ ) است که این مدل اسپینی به عنوان مدل هایزنبرگ-کیتائوی گسترده شناخته می‌شود. در حالت کلی می‌توان مدل اسپینی مؤثر را با استفاده از نظریه اختلال مرتبه دوم از مدل هابارد در حد هم بستن قوی به دست آورد. برای کاهش انرژی سامانه در حد هم بستن قوی، در هر جایگاه یک الکترون قرار می‌گیرد؛ یعنی حد نیمه پر ( $n=1$ ).

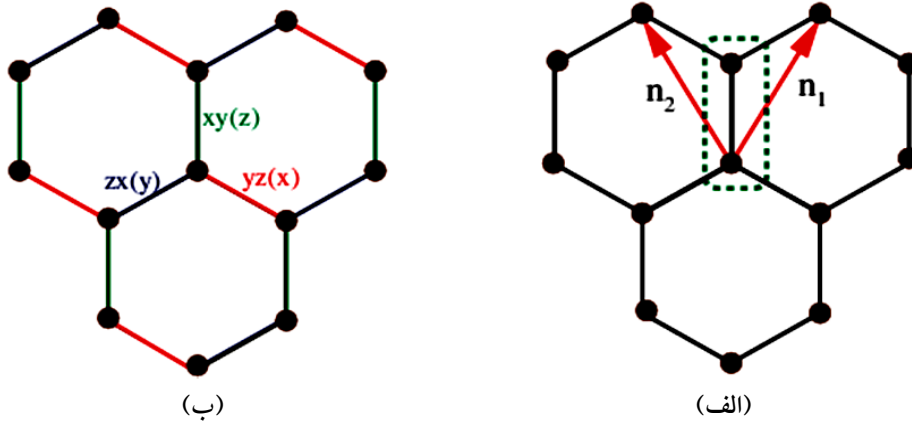
به خاطر شباهت عایق‌های مات اسپین-مدار با کوپرات‌ها [۱۹-۲۰]، در این مقاله قصد داریم پایداری انواع مختلف گاف‌های ابرسانایی را در حد دور از حالت با پرشدگی نیمه‌پر از طریق تحلیل میدان میانگین بوزون کمکی مطالعه کنیم. مطالعات نظری روش میدان میانگین نشان می‌دهد که فاز ابرسانایی غیرمتعارف موج  $d$ - برای مدل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

## ۲. مدل آلاییده 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 مطالعه فیزیک این سامانه‌ها را بسیار جالب کرده است. اخیراً مدل هایزنبرگ-کیتائوی گسترده برای مطالعه فاز مایع اسپین کوانتومی احتمالی

رده 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. درهم‌تیدگی درجات آزادی اربیتالی و اسپینی به خاطر برهم‌کنش اسپین-مدار، منجر به شکافتگی اربیتال  $t_{pg}$  به حالت‌های کاملاً پر  $J_{eff} = 3/2$  و نیمه پر  $J_{eff} = 1/2$  می‌شود. شکافتگی اربیتال  $t_{pg}$  پهنای نوار انرژی را کاهش می‌دهد، بنابراین در حضور برهم‌کنش کولنی ضعیف هم تهگنی 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 مؤثر عایق‌های مات اسپین-مدار، شامل برهم‌کنش‌های تبادلی هایزنبرگ همسانگرد و کیتائوی وابسته به نزدیک‌ترین پیوند هر جایگاه روی شبکه 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 پایه سامانه برای هر دو برهم‌کنش کیتائوی فرومغناطیس و پادفرومغناطیس مایع اسپین کوانتومی  $Z_p$  خواهد بود.

اکسید ایریدیت‌ها [۱۳ و ۱۴] 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



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (الف) هندسه شبکه لانه زنبوری در فضای حقیقی با یاخته 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 شبکه 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  $\beta, \alpha$  و  $\gamma$  مؤلفه‌های اسپین برهم‌کنشی مربوطه به هر پیوند را نشان می‌دهند.

غیرقطری  $\alpha, \beta \in \{y, z\}$  خواهند بود. محاسبات نظری روش ابتدا به ساکن نشان می‌دهد که بزرگی برهم‌کنش‌های تبدیلی کیتائو و غیرقطری در  $\alpha - RuCl_3$  تقریباً از مرتبه یکسانی هستند و به ترتیب فرومغناطیس و پادفرومغناطیس هستند [۱۶].

برای مطالعه 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:

$$H_{JK\Gamma} = H_{kin} + H_{JK\Gamma}, \quad (2)$$

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

$$H_{kin} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i, \sigma}^\dagger c_{j, \sigma} + H.c.) - \mu \sum_{i, \sigma} c_{i, \sigma}^\dagger c_{i, \sigma}, \quad (3)$$

جمله اول، پرش مستقل از اسپین الکترون‌ها را به نزدیک‌ترین همسایه با بزرگی  $t_0$  نشان می‌دهد. با تنظیم پتانسیل شیمیایی  $\mu_0$  در جمله دوم، می‌توان غلظت بار متناظر با مقدار آلایدگی 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  $c_{i\sigma}$  و  $c_{i\sigma}^\dagger$  به ترتیب عملگرهای خلق و فنا ی یک الکترون با اسپین  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  را در جایگاه  $i$  نشان می‌دهند.

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

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

در این هامیلتونی،  $\vec{S}_i$  عملگر شبه اسپین  $J_{eff} = 1/2$  را روی جایگاه  $i$ ام شبکه لانه زنبوری نشان می‌دهد. همان طور که از شکل ۱. الف مشخص است، شبکه لانه زنبوری دارای یاخته 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  $\Gamma$  به ترتیب شدت بزرگی برهم‌کنش‌های تبدیلی هایزنبرگ، کیتائو و غیرقطری هستند. برهم‌کنش کیتائو، یک جفت‌شدگی شبه آیزینگ بین مؤلفه  $\gamma \in \{x, y, z\}$  اسپین  $(S_i^\gamma)$  در هر پیوند در جهت  $\gamma$  است. در برهم‌کنش تبدیلی غیرقطری، مؤلفه‌های اسپین مخالف  $\gamma$  با هم برهم‌کنش می‌کنند. به عنوان مثال، در جهت پیوند  $x$  در شکل ۱. ب اندیس‌های برهم‌کنش

$$\begin{aligned} s_{ij} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{i\uparrow}f_{j\downarrow} - f_{i\downarrow}f_{j\uparrow}), \\ t_{ij,x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-f_{i\uparrow}f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow}f_{j\downarrow}), \\ t_{ij,y} &= \frac{i}{\sqrt{2}}(f_{i\uparrow}f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow}f_{j\downarrow}), \\ t_{ij,z} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{i\uparrow}f_{j\downarrow} + f_{i\downarrow}f_{j\uparrow}), \end{aligned} \quad (7)$$

قسمت برهم کنش هامیلتونی  $t-JK\Gamma$  در راستای نزدیک‌ترین همسایه شکل ۱. ب را می‌توان به دو قسمت برهم کنش تک‌تایی و سه‌تایی همانند زیر در تقریب میدان میانگین نوشت:

$$\begin{aligned} &-(J_H + \frac{K}{4})\langle s_{ij} \rangle s_{ij}^\dagger - \frac{K}{4}\langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,x}^\dagger \\ &+ \frac{K}{4}\langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,y}^\dagger + \frac{K}{4}\langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,z}^\dagger \\ &+ \frac{\Gamma}{4}\langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,y}^\dagger + \frac{\Gamma}{4}\langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,z}^\dagger \\ &\quad + H.c.(x - link), \\ &-(J_H + \frac{K}{4})\langle s_{ij} \rangle s_{ij}^\dagger + \frac{K}{4}\langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,x}^\dagger \\ &- \frac{K}{4}\langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,y}^\dagger + \frac{K}{4}\langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,z}^\dagger \\ &- \frac{\Gamma}{4}\langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,z}^\dagger - \frac{\Gamma}{4}\langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,x}^\dagger \\ &+ H.c.(y - link), \\ &-(J_H + \frac{K}{4})\langle s_{ij} \rangle s_{ij}^\dagger + \frac{K}{4}\langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,x}^\dagger \\ &+ \frac{K}{4}\langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,y}^\dagger - \frac{K}{4}\langle t_{ij,z} \rangle t_{ij,z}^\dagger \\ &+ \frac{\Gamma}{4}\langle t_{ij,y} \rangle t_{ij,x}^\dagger + \frac{\Gamma}{4}\langle t_{ij,x} \rangle t_{ij,y}^\dagger + H.c.(z - link), \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \Delta_\gamma &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle s_{ij} \rangle, \\ d_\gamma^v &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle t_{ij,\gamma} \rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

به دست آورد. در این روابط، اندیس‌های  $v$  و  $\gamma$  به ترتیب جهت پیوند در راستای نزدیک‌ترین همسایه روی شبکه لانه زنبوری و مؤلفه میدان میانگین پارامتر نظم ابررسانایی-سه‌تایی را نمایش می‌دهند.

تبدیلات فوریه عملگرهای فرمیونی مربوط به دو زیر شبکه

### ۳. فرمول‌بندی بوزون کمکی برای یک عایق مات

#### اسپین-مدار آلییده

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  $U(1)$  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 دُبِلون  $(d_i)$  جایگزین می‌کنیم. با اعمال قید موضعی همانند:

$$\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + b_i^\dagger b_i + d_i^\dagger d_i = 1. \quad (4)$$

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

$$c_{i\sigma} \rightarrow b_i^\dagger f_{i\sigma}, \quad c_{i\sigma}^\dagger \rightarrow f_{i\sigma}^\dagger b_i. \quad (5)$$

در ادامه فرض می‌کنیم که برانگیختگی‌های بار بوزونی (هولون‌ها) چگالیده شده‌اند ( $\langle b^\dagger b \rangle = \delta$ ). بنابراین قید موضعی فرمیون‌ها در رابطه (۴)، به  $\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 1 - \delta$  تبدیل می‌شود، که در این رابطه  $\delta$  مقدار آلیش حفره را نشان می‌دهد. بنابراین در رهیافت بوزون کمکی  $U(1)$ ، انتگرال پرش  $t = t_0 \delta$  و پتانسیل شیمیایی  $\mu = \delta \mu_0$  بازهنجاریده می‌شود و انرژی جنبشی در معادله (۳) را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H_{kin} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (f_{i,\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + H.c.) - \mu \sum_{i,\sigma} f_{i,\sigma}^\dagger f_{j\sigma}, \quad (6)$$

همچنین در این روش، عملگر شبه اسپین  $S = 1/2$  در معادله  $H_{JK\Gamma}$  با یک عملگر دو تایی شامل دو فرمیون کمکی همانند  $S_i^\gamma = (1/2) f_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^\gamma f_{i\beta}$  جایگزین می‌کنیم و با تعریف عملگرهای اسپین-تک‌تایی و سه‌تایی روی پیوندهای نزدیک‌ترین همسایه شبکه لانه زنبوری:

و- سه‌تایی به دست آورد [۲۹]. در ادامه برای تعیین دمای گذار فاز ابرسانایی، ماتریس پایداری پارامترهای ابرسانایی مختلف را که از معادلات گاف خطی محاسبه شده‌اند را قطری می‌کنیم. دمای گذار بحرانی کانال‌های مختلف ابرسانایی را می‌توان با محاسبه بزرگ‌ترین دمایی که یکی از ویژه مقادیر ماتریس پایداری معادل با یک شود به دست آورد. محاسبات مان پایداری گاف ابرسانایی 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 تبدلی کیتائو منجر به پایداری فاز ابرسانایی 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 ابرسانایی

برای محاسبه پارامترهای نظم ابرسانایی به ازای مقادیر مختلف شدت‌های برهم‌کنش تبدلی در مدل آلاییده هایزنبرگ- کیتائو گسترده نیاز است ابتدا با انتخاب مقادیر اولیه تصادفی برای پارامترهای نظم، هامیلتونی میدان میانگین را قطری کنیم و مقادیر چشمداشتی در روابط خودسازگار (۸) را محاسبه کنیم. با جایگذاری دوباره 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.

نظریه پیوند ظرفیتی تشدیددی پیش‌بینی می‌کند که در سامانه‌های عایق مات قبل از گذار به فاز ابرسانایی غیرمتعارف یک فاز میانی مایع اسپینی به ازای مقادیر آلایش کم تشکیل می‌شود. برای مطالعه فاز مایع اسپینی در حد پرشدگی نیمه پر نیاز است که از یک روش بوزونی متفاوت استفاده کرد [۲۴]. بنابراین در این مقاله برای مطالعه فاز ابرسانایی، مواردی با آلایش‌های کم را صرف نظر خواهیم کرد. در ضمن مطالعات اخیر نشان می‌دهد که بزرگی شدت برهم‌کنش‌های تبدلی 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

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

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

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

$$H_{MF} = \sum_{q,\sigma} [-t(q) f_{q,1,\sigma}^\dagger f_{q,2,\sigma} + \Delta(q) (-f_{q,1,\uparrow}^\dagger f_{-q,2,\downarrow}^\dagger + f_{q,1,\downarrow}^\dagger f_{-q,2,\uparrow}^\dagger) + d^x(q) (-f_{q,1,\uparrow}^\dagger f_{-q,2,\uparrow}^\dagger + f_{q,1,\downarrow}^\dagger f_{-q,2,\downarrow}^\dagger) + id^y(q) (-f_{q,1,\uparrow}^\dagger f_{-q,2,\uparrow}^\dagger + f_{q,1,\downarrow}^\dagger f_{-q,2,\downarrow}^\dagger) + d^z(q) (f_{q,1,\uparrow}^\dagger f_{-q,2,\downarrow}^\dagger + f_{q,1,\downarrow}^\dagger f_{-q,2,\uparrow}^\dagger) + H.c.] - \mu \sum_{q,\rho,\sigma} f_{q,\rho,\sigma}^\dagger f_{q,\rho,\sigma}.$$

در این رابطه:

$$t(q) = t(1 + e^{iq \cdot n_1} + e^{iq \cdot n_2}),$$

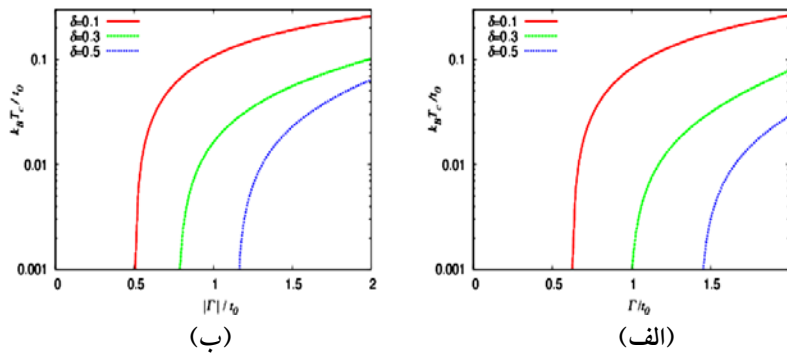
$$\Delta(q) = -(J_H + \frac{K}{4})\Delta_z - (J_H + \frac{K}{4})\Delta_x e^{iq \cdot n_1} - (J_H + \frac{K}{4})\Delta_y e^{iq \cdot n_2},$$

$$d^x(q) = (-\frac{K}{4}d_z^x - \frac{\Gamma}{4}d_z^y) + \frac{K}{4}d_x^x e^{iq \cdot n_1} + (-\frac{K}{4}d_y^x + \frac{\Gamma}{4}d_y^z) e^{iq \cdot n_2},$$

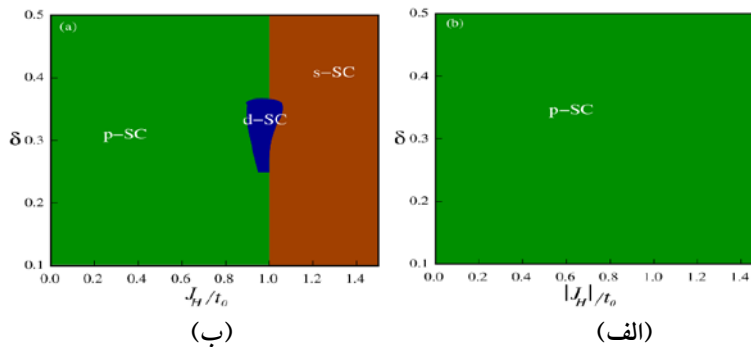
$$d^y(q) = (\frac{K}{4}d_z^y + \frac{\Gamma}{4}d_z^x) + (\frac{K}{4}d_x^y + \frac{\Gamma}{4}d_x^z) e^{iq \cdot n_1} - \frac{K}{4}d_y^y e^{iq \cdot n_2},$$

$$d^z(q) = \frac{K}{4}d_z^z - (\frac{K}{4}d_x^z + \frac{\Gamma}{4}d_x^y) e^{iq \cdot n_1} - (\frac{K}{4}d_y^z - \frac{\Gamma}{4}d_y^x) e^{iq \cdot n_2}, \quad (10)$$

با توجه به این که پارامتر نظم ابرسانایی در دمای گذار بحرانی صفر می‌شود، بنابراین معادلات گاف خطی را می‌توان با بسط معادلات خود سازگار برحسب پارامترهای نظم اسپین- تک‌تایی



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دمای گذار،  $k_B T_c / t_0$ ، کانال ابررسانایی - سه تایی به عنوان تابعی از شدت برهم کنش غیرقطری،  $\Gamma / t_0$ ، برای آرایش های مختلف  $\delta$ ، در  $J_H = K = 0$ . (الف) برای  $\Gamma > 0$  و (ب) برای  $\Gamma < 0$ .



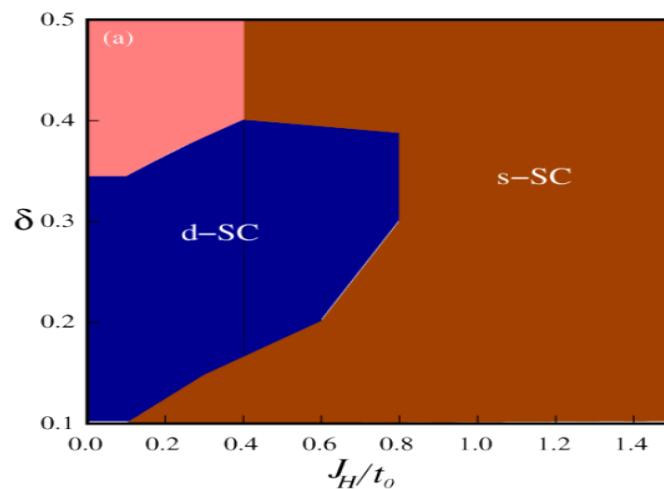
شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سیمای فاز ابررسانایی مدل کیتائو- هایزنبرگ گسترده با مقیاس  $K = -\Gamma = -t_0$  با استفاده از روش میدان میانگین به عنوان تابعی از (الف) برهم کنش فرومغناطیس هایزنبرگ  $J_H < 0$  در واحد انتگرال پرش  $t_0$  و آلییدگی  $\delta$  و (ب) برهم کنش پادفرومغناطیس هایزنبرگ  $J_H > 0$  در واحد انتگرال پرش  $t_0$  و آلییدگی  $\delta$ .

گزارش شده در مرجع [۲۱] خواهد بود. برای بررسی اهمیت برهم کنش تبدلی غیرقطری در پایداری فاز ابررسانایی اسپین-سه تایی، دمای بحرانی شروع این فاز را بر حسب شدت برهم کنش غیرقطری  $\Gamma$  برای آرایش های مختلف در شکل ۲ رسم کرده ایم. این نتیجه به صورت کلی بیان گر این است که با کنترل مقیاس  $\Gamma / t_0$  می توان در هر دو حالت با برهم کنش های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، دمای گذار بحرانی کانال -سه تایی را قویاً تحت تاثیر قرار داد.

در ادامه برای مطالعه سیمای فاز ابررسانایی، با ثابت در نظر گرفتن مقدار برهم کنش های کیتائو و غیرقطری همانند  $K = -t_0$  و  $\Gamma = t_0$ ، تعداد پارامترهای هامیلتونی را کاهش می دهیم. سیمای فاز در شکل ۳. الف با استفاده از تحلیل میدان میانگین به عنوان تابعی از شدت جفت شدگی هایزنبرگ

هستند؛ در حالی که برهم کنش تبدلی غیرقطری می تواند از هر دو نوع پادفرومغناطیس و فرومغناطیس باشد.

سیمای فاز ابررسانایی را می توان با مقایسه دمای گذار بحرانی مربوط به کانال های اسپین- تک تایی و -سه تایی مختلف به دست آورد. همان طور که از معادله مربوط به گاف تک تایی در رابطه (۱۰) مشخص است، سهم برهم کنش کیتائو فقط بازبهنجارش شدت برهم کنش هایزنبرگ است. بنابراین گاف ابررسانایی تک تایی پایدار برای مدل هایزنبرگ- کیتائو گسترده باید موج-s یا موج-d باشد که تقارن وارون زمانی در برای حالت موج-d شکسته است. محدوده پایداری حالت های تک تایی به شدت برهم کنش و مقدار آلییدگی بستگی دارد [۲۱]. قابل ذکر است که رفتار دمای بحرانی این کانال های اسپین- تک تایی بر حسب پارامترهای هامیلتونی مشابه نتایج



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سیمای فاز ابررسانایی مدل کیتائو-هایزنبرگ گسترده با برهم‌کنش‌های تبادلی در مقیاس  $K = -\Gamma = t_0$  با استفاده از روش میدان میانگین به عنوان تابعی از برهم‌کنش هایزنبرگ پادرومغناطیس ( $J_H > 0$ ) در واحد انتگرال پرش ( $t_0$ ) و مقدار آلابدگی ( $\delta$ ).

آلابده شود پیش‌بینی کرد. فاز تک‌تایی موج d، با تقارن وارون زمانی شکسته شده، در محدوده حول و حوش مقدار آلابدگی  $\delta = 0.3$  و شدت جفت‌شدگی  $J_H = t_0$  بین دو فازهای موج p- و موج s- پایدار خواهد شد. همچنین به ازای برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ با شدت  $J_H > t_0$  برای همه مقادیر آلابش، ابررسانای متعارف موج s- پایدار می‌شود. ناپایداری ابررسانایی اسپین-سه‌تایی به اسپین-تک‌تایی به خاطر غالب شدن افت و خیزهای پادرومغناطیس است که از برهم‌کنش هایزنبرگ ناشی می‌شود. ناحیه پایداری ابررسانایی موج p- در مقایسه با سیمای فاز مدل هایزنبرگ-کیتائو به دست آمده در مرجع‌های [۲۲-۲۳] گستره بیشتری دارد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که برهم‌کنش تبادلی غیرقطری نقش مهمی را در گسترش ناحیه پایداری حالت اسپین-سه‌تایی بازی می‌کند.

در این قسمت به بررسی سیمای فاز ابررسانایی مدل آلابده JKΓ با برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ پادرومغناطیس و همچنین کیتائو و غیرقطری با مقادیر ثابت همانند  $K = -\Gamma = t_0$  متمرکز می‌شویم. سیمای فاز این حالت در شکل ۴ نشان داده شده است، که برخلاف دو سیمای فاز قبلی ناحیه پایداری

فرومغناطیس ( $J_H < 0$ ) و مقدار آلابدگی  $\delta$  به دست آورده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که به ازای همه مقادیر شدت برهم‌کنش تبادلی و آلابدگی به ترتیب در بازه  $0 < J_H < 1/5$  و  $0.1 < \delta < 0.5$  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. برهم‌کنش تبادلی هایزنبرگ فرومغناطیس، موجب قطبیده شدن حالت‌های الکترونی می‌شود که این امر موجب تشکیل جفت‌های کوپر در کانال -سه‌تایی خواهد شد.

در شکل ۳. ب کانال چگالش غالب به عنوان تابعی از برهم‌کنش هایزنبرگ پادرومغناطیس ( $J_H < 0$ ) و آلابش محاسبه شده است. در این حالت، یک گذار فاز بین کانال‌های اسپین-تک‌تایی و -سه‌تایی در شدت برهم‌کنش‌های نسبی  $J_H / \Gamma = 1$  وجود دارد. فاز ابررسانایی موج p- به ازای  $J_H < t_0$  در حضور برهم‌کنش هایزنبرگ پایدار است. از آنجایی که برهم‌کنش‌های کیتائو و غیرقطری در اکسید ایریدیت‌ها و  $\alpha-RuCl_3$  غالب هستند، بنابراین پایداری این نوع جفت‌شدگی را می‌توان برای زمانی که این مواد با حفره

لانه زنبوری با استفاده از روش میدان میانگین بوزون کمکی  $U(1)$  مورد علاقه ما بوده است. بررسی سیمای فاز مدل آلاییده  $t - JK\Gamma$  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، ناحیه 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 کند. 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، مطالعه مواد کیتائو را مهیج و جذاب کرده است [۳۳-۳۴].

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  $RuCl_3 - \alpha$ ، 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، مطالعه سیمای فاز ابررسانایی مدل آلاییده هایزنبرگ-کیتائو گسترده روی شبکه

## 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.



- (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.
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**