

В.М. ЛОКТЕВ,¹ В. ТУРКОВСЬКИЙ²

¹ Інститут теоретичної фізики ім. Боголюбова НАН України
(Вул. Метрологічна, 14-б, Київ 03143; e-mail: vloktev@bitr.kiev.ua)

² Фізичний факультет Університету Центральної Флориди
(Орlando, Флориди 32816, США)

СИМЕТРІЯ ТА ЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКУ У ДВОВИМІРНИХ НЕМАТИЧНИХ НАДПРОВІДНИКАХ

УДК 539

У цій роботі ми вивели рівняння для надпровідного нематичного параметра порядку та хімічного потенціалу для гексагональної ґратки з урахуванням перескоку електронів на найближчі і наступні після найближчих вузли. З аналізу енергії основного надпровідного стану було встановлено, що симетрія параметра порядку та деякі інші надпровідні властивості системи сильно залежать від знака та модуля параметра перескоку на наступні після найближчих вузли. Як показано, спарювання з розширеною s - і d -симетрією дають значний внесок у надпровідне спарювання в системі, яке можна змінювати, варіюючи параметри перескоку. Обговорено можливий зв'язок отриманих результатів із властивостями деяких одношарових допованих надпровідників (графену і дихалькогенідів перехідних металів).

Ключові слова: теорія надпровідності, 2D системи, нематичність.

1. Вступ

Можливість надпровідності в низьковимірних – одно- (1D) або двовимірних (2D) – фізично і технологічно важливих “релятивістських” системах, таких як графен, нещодавно стала гарячою темою досліджень [1–12]. Цей інтерес отримав подальший стрибок з відкриттям надпровідності у скрученому двошаровому графені, де було показано, що при певних кутах закручування система демонструє яскраво виражені надпровідні властивості (для огляду див. роботу [13]). Як було запропоновано кількома авторами, домінуючим механізмом спарювання в скрученому графені є спарювання в нематичному каналі, де електрони переважно притягуються, якщо вони займають найближчі місця в різних підґратках і розділені вектором, який можна визначити як “директор”, в каналі, де є тенденція до утворювання пар з переважною просторовою орієнтацією.

Цитування: Локтев В.М., Турковський В. Симетрія та значення параметра порядку у двовимірних нематичних надпровідниках. *Укр. фіз. журн.* **69**, № 8, 530 (2024).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2024. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

530

Нині зв'язок між симетрією кристалічної структури та **симетрією надпровідного параметра порядку** є темою інтенсивних дебатів. Двовимірні системи з гексагональною або її окремим випадком, стільниковою, ґраткою є одними з найбільш досліджених (див., наприклад, роботи [7, 14–17]) завдяки експериментальній реалізації таких систем (наприклад, графен, MoS₂, тощо), які виявляють свій потенціал або демонструють надпровідність при легуванні. Зокрема, у роботі [7] розглянуто основні теоретичні докази існування хірального d -хвильового надпровідного стану в графені і стверджується, що поява хіральної d -хвильової надпровідності в графені тісно пов'язана з гексагональною кристалічною ґраткою. У спорідненому дослідженні [14] було повідомлено про теоретично знайдений d -хвильовий надпровідний стан із змішаною хіральністю (з топологічною кіральною $(d + id)$ -хвильовою симетрією в одній діраківській долині, але з $(d - id)$ -хвильовою симетрією в іншій) в області співіснування між антиферромагнітним (AFM) і надпровідним станами в слабологованих стільникових матеріалах.

Аналіз розширеної моделі Хаббарда з локальною U -взаємодією та V -взаємодією найближчих сусідів (nearest-neighbor, NN) для графену за до-

помогою теорії динамічного середнього поля показав [15], що за малих U та V або малого легування система віддає перевагу спарюванню з реальною (нехіральною) триплетною p -хвильовою симетрією, тоді як при великих U і V або при низькому легуванні система перебуває в надпровідному режимі з комбінацією параметрів хірального порядку $p + ip$. Важливо, було також виявлено, що синглетна надпровідність (розширена s - або d -хвиля) або відсутня, або не домінує. Для іншої спорідненої системи, моношару MoS_2 , було теоретично виявлено [16], що при низькому легуванні домінує непарне спарювання з f -хвильовою $\text{Mo } NN$ структурою. Поблизу заповнення сингулярності Ван Хова, система надає перевагу феромагнітному (FM) стану, і було показано, що поблизу цього заповнення триплетне спарювання зумовлене FM флуктуаціями. З іншого боку, для моделі корельованих легуваних квантових спин-холлівських ізоляторів зі стільниковою ґраткою без інверсійної симетрії було знайдено [17], що у деякому діапазоні параметрів існує надпровідність із співіснуючими спин-синглетним, $d + id$, та спин-триплетним, $p + ip$, спарюваннями. Таким чином, гексагональні структури можуть демонструвати різноманіття симетрій надпровідного спарювання.

У цьому сенсі тип моделі дуже важливий. Зокрема ефект *перескоку на наступний після найближчого* (next-nearest-neighbor, NNN) вузол може відігравати досить важливу або навіть домінуючу роль [18–29]. Так, у роботі [20] було виявлено, що на стільниковій ґратці Хаббарда з надпровідністю, опосередкованою спіновими і зарядовими флуктуаціями при рівнях легування 0,02–0,2 і лише локальному U -відштовхуванні, спин-синглетна $(d_{x^2-y^2} + id_{xy})$ -хвиля є домінуючою (d -хвильове спарювання при низькому легуванні було також знайдено в роботі [21]). У цьому випадку, надпровідна щільність є результатом суміші NN і NNN спарювань. Зміщуючи енергетичний рівень між двома підґратками вище критичного значення, автори знайшли спин-триплетне f -хвильове спарювання, яке в основному складається з NNN спарювання. Крім того, було виявлено, що NNN кулонівська взаємодія V також сприяє спин-триплетному f -хвильовому спарюванню. У роботі [23] було продемонстровано для моделі Хаббарда на стільниковій ґратці, що амплітуди NN стрибків другого та третього порядку сильно

впливають на симетрію $(d + id)$ -спарювання. У пов'язаному дослідженні [24] стверджувалося, що в багатьох ґратках NN і NNN спарювання не зміщуються спонтанно одне з одним через обмеження, накладені симетрією ґратки, тоді як стільникова ґратка, завдяки своїй унікальності, надає можливість аналізувати суміш NN та NNN спарюючих компонент (у цій роботі аналізувалося зміщення різних d -компонентів). У роботі [25], аналіз спарювання в легуваному MoS_2 показав спин-триплетне спарювання разом з f -хвильовим спарюванням у широкому діапазоні легування.

Виходячи за межі гексагональних структур, для квадратної ґратки та моделі ґратки Каґоме (модельна система AV_3Sb_5) було продемонстровано [26], що існують вагомні докази конкуруючих нестабільностей при заповненні Ван Хова вищого порядку з виродженням аромату $SU(N_f)$ (N_f – кількість ароматів/типів ферміонів). У цій роботі було виявлено, що системи мають багаті фазові діаграми з феромагнітним (FM), AFM, надпровідним, та померанчуківським порядками. У теоретичних дослідженнях інших систем, таких як топологічний надпровідник з гексагональною структурою $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$, були знайдені ознаки нематичної надпровідності [27, 28], тоді як для легуваної дірками трикутної ґраткової моделі Хаббарда атомів олова на кремнієвій підкладці було виявлено [29], що розширена взаємодія Хаббарда має вирішальне значення для отримання триплетного спарювання (f - (p) -спарювання при помірному (вищому) легуванні дірками).

Існують також *експериментальні* докази можливості хіральної надпровідності в сильно легуваному графені [30]. Зокрема, при високому легуванні, коли сингулярність Ван Хова в π -зоні зайнята, система може перейти до екзотичного основного стану в результаті взаємодії багатьох тіл. В роботі [30] було показано, що з легуючого графену, можна перейти через перехід Ліфшица, де топологія поверхні Фермі розвивається з двох електронних кишень в одну велику діркову кишеню.

Нижче буде проаналізована можливість нематичної надпровідності в основному стані у 2D системі зі стільниковою ґраткою, приділяючи особливу увагу ролі NNN перескоків у формуванні симетрії можливих параметрів порядку. Ми покажемо, що канал спарювання у цій системі дуже чутливий до знака та величини цього параметра, і тому

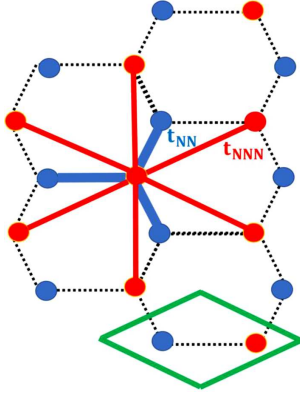


Рис. 1. Кристалічна структура та елементарні комірки (зеленим) стільникової ґратки. NN та NNN зв'язки показані синім і червоним кольором, відповідно

системи з однаковою структурою ґратки можуть демонструвати різну симетрію надпровідного стану залежно від параметрів сильного зв'язку.

Цю роботу ми присвячуємо 115-річчю видатного фізика-теоретика, одного з основоположників теорії надпровідності Миколи Боголюбова. Відомо, що у своїх роботах він розглядав куперівське спарювання з ізотропним параметром порядку, не звертаючи уваги на походження притягання між двома носіями заряду (двома електронами або двома дірками). Нашою метою в цій роботі є аналіз локального анізотропного спарювання, яке в найпростішому випадку відповідає спарюванню частинок на NN вузлах. Такі пари можна розглядати як “нематичні” елементи, які загалом можуть генерувати надпровідний конденсат як з ізотропними, так і з анізотропними глобальними параметрами порядку.

2. Гамільтоніан

Стільникова ґратка та можливі NN і NNN процеси перескоку в системі показані на рис. 1. Гамільтоніан сильного зв'язку системи у випадку NN і NNN перескоків та NN притягання з синглетним спарюванням можна записати в такій формі:

$$H = -t_{NN} \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle, \sigma} (a_{\mathbf{n}\sigma}^+ b_{\mathbf{m}\sigma} + b_{\mathbf{m}\sigma}^+ a_{\mathbf{n}\sigma}) - t_{NNN} \sum_{\langle\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle\rangle, \sigma} (a_{\mathbf{n}\sigma}^+ a_{\mathbf{m}\sigma} + b_{\mathbf{n}\sigma}^+ b_{\mathbf{m}\sigma} + \text{h.c.}) + \mu \sum_{\mathbf{n}, \sigma} (a_{\mathbf{n}\sigma}^+ a_{\mathbf{n}\sigma} + b_{\mathbf{n}\sigma}^+ b_{\mathbf{n}\sigma}) - V_{\text{attr}} \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} \hat{\Delta}_{\mathbf{nm}}^+ \hat{\Delta}_{\mathbf{nm}}, \quad (1)$$

де t_{NN} і t_{NNN} – це параметри NN і NNN перескоків (див. рис. 1), а V_{attr} – це параметр NN притягання. Оператор

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{nm}}^+ = \hat{\Delta}_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\boldsymbol{\rho}}^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{\mathbf{n}\uparrow}^+ b_{\mathbf{m}\downarrow}^+ - a_{\mathbf{n}\downarrow}^+ b_{\mathbf{m}\uparrow}^+). \quad (2)$$

у рівнянні (1) є NN спін-синглетним оператором народження надпровідних пар, а $\boldsymbol{\rho} \in NN$ векторами. Вибір NN притягання був зумовлений такими причинами. Коли два електрони з однаковим спіном займають найближчі вузли, один з них не може перестрибнути на сусідній вузол через принцип Паулі, тому між ними немає ефективного притягання. З іншого боку, коли один електрон має спін протилежний спіну іншого електрона, він може перескочити на зайняте місце, а потім перескочити назад (через локальне кулонівське відштовхування з енергією U), що зменшує енергію пари на величину порядку сталої обміну t_{NN}^2/U і призводить до NN електронно-електронного притягання, що у певному сенсі феноменологічно включене в гамільтоніан (1). Фактично, останній доданок у формулі (1) подібний до взаємодії резонансного валентного зв'язку (RVB) з $V_{\text{attr}} \sim J_{\text{exch}} \sim t_{NN}^2/U$. Таким чином, ми опосередковано приймаємо, що в системі, якщо її можна описати ефективною моделлю Хаббарда, нерівність $t_{NN} \ll U$, яка виключає подвійне заповнення вузлів, задовольняється (випадає $t_{NN} \sim U$ потребує окремого дослідження).

Щоб використати наближення середнього поля, введемо, як це було зроблено Боголюбовим, середнє від оператора надпровідного параметра порядку $\hat{\Delta}_{\mathbf{nm}}$:

$$\Delta_{\mathbf{nm}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle a_{\mathbf{n}\downarrow} b_{\mathbf{m}\uparrow} \rangle - \langle a_{\mathbf{n}\uparrow} b_{\mathbf{m}\downarrow} \rangle). \quad (3)$$

Тоді в імпульсному представленні гамільтоніан (1) має вигляд

$$H = -t_{NN} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} (e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}_\alpha} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ b_{\mathbf{k}\sigma} + \text{h.c.}) - t_{NNN} \sum_{\mathbf{k}, \beta, \sigma} (e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}'_\beta} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}'_\beta} b_{\mathbf{k}\sigma}^+ b_{\mathbf{k}\sigma} + \text{h.c.}) + \mu \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + b_{\mathbf{k}\sigma}^+ b_{\mathbf{k}\sigma}) - \sum_{\mathbf{k}, \alpha} [\Delta_\alpha e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}_\alpha} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ + a_{\mathbf{k}\downarrow}^+ b_{-\mathbf{k}\uparrow}^+) + \text{h.c.}] + 2 \frac{N}{V_{\text{attr}}} \sum_{\alpha} |\Delta_\alpha|^2, \quad (4)$$

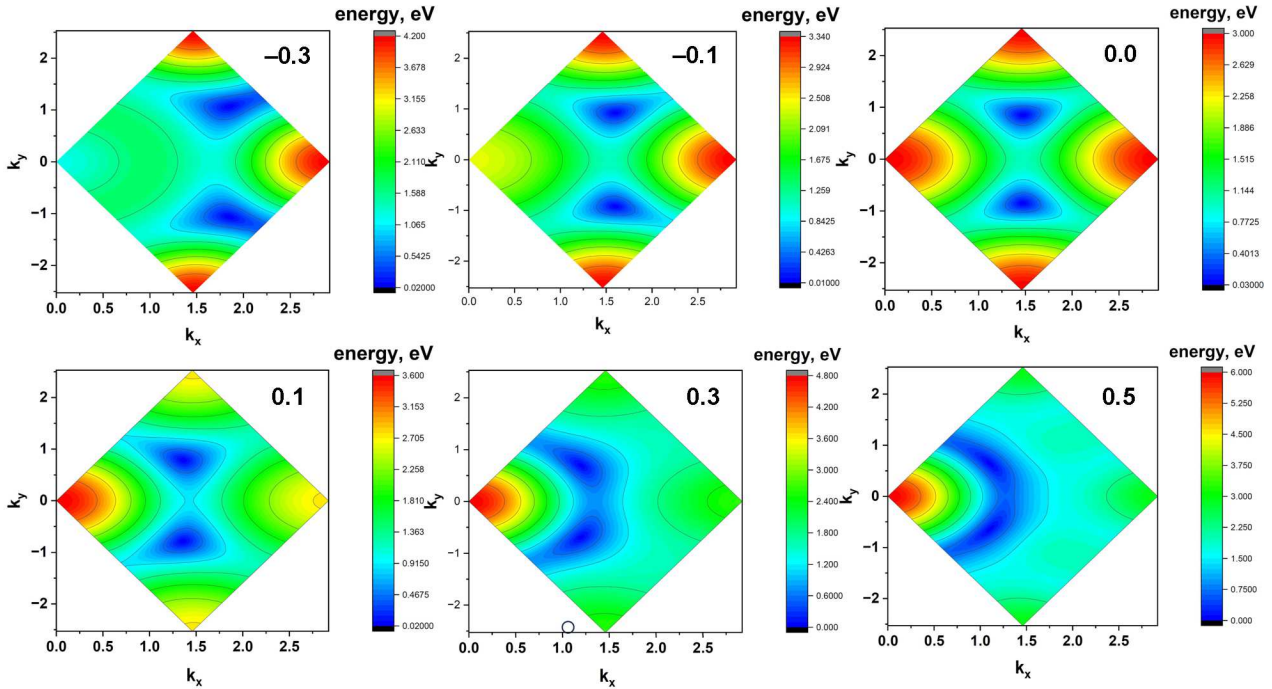


Рис. 2. Дисперсія зони (7) при $t_{NN} = 1$ eВ і різних значеннях t_{NNN} (в eВ). Імпульси подано в одиницях $2\pi/(3a)$

де N – це кількість k -точок у зоні Бріллюена (BZ), ρ_α ($\alpha = 1, 2, 3$) – NN вектори, ρ'_β ($\beta = 1, \dots, 6$) – NNN вектори, а

$$\Delta_\alpha = \Delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n} + \rho_\alpha} \quad (5)$$

– це три 2D просторово-різні параметри порядку (припускається, що система трансляційно-інваріантна, тому параметри порядку не залежать явно від номера вузла \mathbf{n} на підгратці).

Для діагоналізації кінетичної складової гамільтоніана (4), треба виконати таке перетворення ферміонних операторів:

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} + d_{\mathbf{k}\sigma} \\ e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} (c_{\mathbf{k}\sigma} - d_{\mathbf{k}\sigma}) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

де $c_{\mathbf{k}\sigma}$ – оператор анігіляції в нижній зоні з енергією $-\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu$, а $d_{\mathbf{k}\sigma}$ – оператор анігіляції у верхній зоні з енергією $\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu$. Дисперсія відповідних зон має вигляд

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \left| t_{NN} \sum_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\rho_\alpha} + t_{NNN} \sum_{\beta} e^{i\mathbf{k}\rho'_\beta} \right|. \quad (7)$$

Спектр (7) наведено на рис. 2 для різних значень параметра NNN перескоку. Як впливає з цього рисунка, за відсутності NNN перескоків, мінімум спектра знаходиться в діраківських точках \mathbf{K} і \mathbf{K}' (сині мінімуми на нижньому рисунку у центральній колонці). Зі збільшенням абсолютної величини периметра NNN перескоків, мінімуми енергії зсуваються від центра BZ, стають видовженими, та утворюючи кишені Фермі подібної форми. Ці форми найбільш розширені при великих позитивних значеннях t_{NNN} ($= 0,5$ eВ).

У рівнянні (6), величина

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \arg \left(t_{NN} \sum_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\rho_\alpha} \right) \quad (8)$$

– це кут комплексного числа $t_{NN} \sum_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\rho_\alpha}$ відносно осі x .

У нових операторах, гамільтоніан (4) набуває вигляду

$$H = - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{\mathbf{k}\sigma} + \mu \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + d_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{\mathbf{k}\sigma}) +$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\text{ev}}(\mathbf{k}) \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ - d_{\mathbf{k}\downarrow}^+ d_{-\mathbf{k}\uparrow}^+ \right) + \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\text{odd}}(\mathbf{k}) \left(d_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ - c_{\mathbf{k}\downarrow}^+ d_{-\mathbf{k}\uparrow}^+ \right) + \\
 & + 2 \frac{N}{V_{\text{attr}}} \sum_{\alpha} |\Delta_{\alpha}|^2, \tag{9}
 \end{aligned}$$

де

$$\Delta_{\text{ev}}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha} \Delta_{\alpha} \cos(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \tag{10}$$

– це внутрішньозонний спін-синглетний (парний) параметр порядку, а

$$\Delta_{\text{odd}}(\mathbf{k}) = i \sum_{\alpha} \Delta_{\alpha} \sin(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \tag{11}$$

– міжзонний спін-синглетний (непарний) параметр порядку.

Перетворення Боголюбова в рівнянні (9) дає такий спектр квазічастинок (індекси імпульсу в правій частині опущені):

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\varepsilon^2 + \mu^2 + |\Delta_{\text{ev}}|^2 + |\Delta_{\text{odd}}|^2 \pm |A|}, \tag{12}$$

де

$$\begin{aligned}
 A^2 & = 4\varepsilon^2 \mu^2 + 2 |\Delta_{\text{odd}}|^2 (2\varepsilon^2 + |\Delta_{\text{ev}}|^2) + \\
 & + \Delta_{\text{ev}}^2 \Delta_{\text{odd}}^{*2} + \Delta_{\text{ev}}^{*2} \Delta_{\text{odd}}^2.
 \end{aligned}$$

Коли міжзонне спарювання пригнічується ($\Delta_{\text{odd}} = 0$), спектр має форму, звичну до теорії Бардіна–Купера–Шріффера (BCS),

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(\varepsilon \pm \mu)^2 + |\Delta_{\text{ev}}|^2}.$$

3. Симетрія параметрів порядку

Для параметрів порядку при скінченній температурі можна отримати такі рівняння:

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\alpha} & = \frac{V_{\text{attr}}}{N} \sum_{\mathbf{k}, \beta} \left[\cos(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \cos(\mathbf{k}\rho_{\beta} - \varphi_{\mathbf{k}}) \times \right. \\
 & \times \left. \left\{ \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu}{2T_c}}{2[\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu]} + \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}}{2[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]} \right\} + \right. \\
 & + \sin(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \sin(\mathbf{k}\rho_{\beta} - \varphi_{\mathbf{k}}) \times \\
 & \times \left. \frac{\sinh \frac{\mu}{T_c}}{2\mu \cosh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu}{2T_c} \cosh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}} \right] \Delta_{\beta}, \tag{13}
 \end{aligned}$$

де перший доданок в квадратних дужках є регулярним членом BCS для двох зон.

У такому випадку рівняння (13) можна записати у матричному вигляді:

$$\frac{1}{V_{\text{attr}}} \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B & B \\ B & A & B \\ B & B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_3 \end{pmatrix}, \tag{14}$$

де використовуються такі позначення:

$$\begin{aligned}
 A & = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\cos^2(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \left\{ \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu}{2T_c}}{2[\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu]} + \right. \right. \\
 & + \left. \left. \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}}{2[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]} \right\} + \sin^2(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \times \right. \\
 & \times \left. \frac{\sinh \frac{\mu}{T_c}}{2\mu \cosh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu}{2T_c} \cosh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}} \right], \tag{15}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B & = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\cos(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \cos(\mathbf{k}\rho_{\beta} - \varphi_{\mathbf{k}}) \times \right. \\
 & \times \left\{ \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu}{2T_c}}{2[\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu]} + \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}}{2[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]} \right\} + \\
 & + \sin(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}) \sin(\mathbf{k}\rho_{\beta} - \varphi_{\mathbf{k}}) \times \\
 & \times \left. \frac{\sinh \frac{\mu}{T_c}}{2\mu \cosh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu}{2T_c} \cosh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}} \right]. \tag{16}
 \end{aligned}$$

У рівнянні (15) α має будь-яке з трьох значень, а в рівнянні (16) α і β – два будь-які різні значення.

4. Основні рівняння

Рівняння (14) має такі власні значення:

$$\varepsilon_1 = A + 2B - V_{\text{attr}}^{-1}, \tag{17}$$

$$\varepsilon_2 = A - B - V_{\text{attr}}^{-1}. \tag{18}$$

Тепер підстановка власних значень (17) і (18) у рівняння (14) дозволяє отримати власні вектори, тобто компоненти параметрів порядку $\Delta_1 - \Delta_3$, що разом із рівнянням (13) визначають залежність від імпульсу параметра порядку, а отже і його симетрію. Нижче, розв'язки розглянуто більш детально.

1. З рівняння (17) видно, що його розв'язок можна представити у вигляді

$$\begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_3 \end{pmatrix} \sim \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Цей розв'язок та рівняння (10) призводять до парного параметра порядку

$$\Delta_{\text{ev}}(\mathbf{k}) \sim \sum_{\alpha} \cos(\mathbf{k}\rho_{\alpha} - \varphi_{\mathbf{k}}). \quad (20)$$

Тобто ми отримали, що цей параметр порядку має **розширену s-симетрію**.

З іншого боку, для міжзонного спарювання з такою симетрією, з рівняння (14) випливає, що

$$\Delta_{\text{odd}}(\mathbf{k}) = 0. \quad (21)$$

2. Розв'язок рівняння (18) є подвійно виродженим і має вигляд

$$\begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_3 \end{pmatrix} \sim \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_3 \end{pmatrix} \sim \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Використовуючи ці результати та рівняння (10), можна легко знайти, що

$$\Delta_{\text{ev}}(\mathbf{k}) \sim \begin{cases} 2 \cos(\mathbf{k}\rho_1 - \varphi_{\mathbf{k}}) - \cos(\mathbf{k}\rho_2 - \varphi_{\mathbf{k}}) - \\ - \cos(\mathbf{k}\rho_3 - \varphi_{\mathbf{k}}), \\ \cos(\mathbf{k}\rho_2 - \varphi_{\mathbf{k}}) - \cos(\mathbf{k}\rho_3 - \varphi_{\mathbf{k}}), \end{cases} \quad (23)$$

тобто, цей параметр порядку має **розширену d-симетрію**.

Для міжзонного спарювання з розширеною s-симетрією отримуємо

$$\Delta_{\text{odd}}(\mathbf{k}) \quad (24)$$

– **p-симетрія**. Можна просто показати, що лише у випадку внутрішньозонного спарювання параметр порядку з d-симетрією з'являється та формується при вищій критичній температурі T_c .

Нижче ми розглянемо лише випадок внутрішньозонного спарювання, тобто ігноруємо $\Delta_{\text{odd}}(\mathbf{k})$, і беремо до уваги лише домінуючі доданки з $\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$ у рівняннях (15) та (16). Такі спрощення не призводять до суттєвої зміни фізичних результатів і дозволяють прозора проаналізувати роль NNN перескоків.

Для s-хвильового розв'язку, значення T_c визначається з рівняння (17). Якщо ми покладемо $\varepsilon_1 = 0$, тобто якщо надпровідна щілина зникає, це рівняння матиме вигляд

$$1 = V_{\text{attr}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [\cos^2(\mathbf{k}\rho_1 - \varphi_{\mathbf{k}}) +$$

$$+ 2 \cos(\mathbf{k}\rho_1 - \varphi_{\mathbf{k}}) \cos(\mathbf{k}\rho_2 - \varphi_{\mathbf{k}})] \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}}{2(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)}. \quad (25)$$

У випадку d-хвильового каналу [рівняння (18)], рівняння (17) має вигляд

$$1 = V_{\text{attr}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [\cos^2(\mathbf{k}\rho_1 - \varphi_{\mathbf{k}}) - \cos(\mathbf{k}\rho_1 - \varphi_{\mathbf{k}}) \times \\ \times \cos(\mathbf{k}\rho_2 - \varphi_{\mathbf{k}})] \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}}{2(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)} \quad (26)$$

(для визначеності ми використали явні значення чисел вектора ґратки, $\alpha = 1, \beta = 2$). Оскільки основний внесок у суму надходить від малих імпульсів, а для цих імпульсів значення $\varphi_{\mathbf{k}}$ є малим, то для спрощення аналізу ми поклали у розрахунках, що $\varphi_{\mathbf{k}} = 0$. Щоб врахувати можливу зміну рівня легування, рівняння (25) та (26) розв'язувалися самоузгоджено з рівнянням для числа частинок

$$n_f = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[1 - \tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c} \right]. \quad (27)$$

5. Розв'язки

Розв'язки, отримані для критичної температури в обох каналах як функції притягання при відношенні $t_{NN}/t_{NNN} = 0,05$ та рівні легування 0,5, показано на рис. 3. Як впливає з цього рисунка, d-канал дає головний внесок у надпровідність.

Ця властивість залишається якісно незмінною, при зміні параметра NNN перескоку (див. рис. 4). Як впливає з рис. 4, спарювання в d-каналі характеризується критичною температурою, що є в

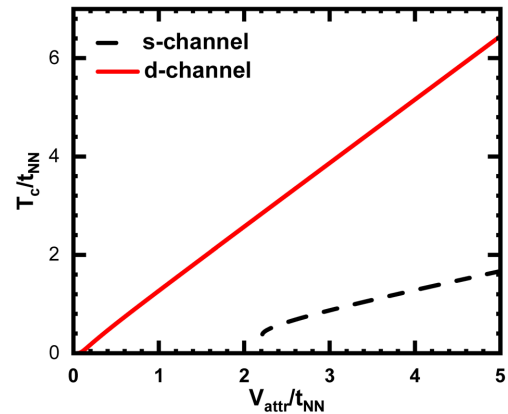


Рис. 3. Критична температура в різних каналах як функція притягання при $t_{NNN} = 0,05t_{NN}$ і рівні легування 0,5

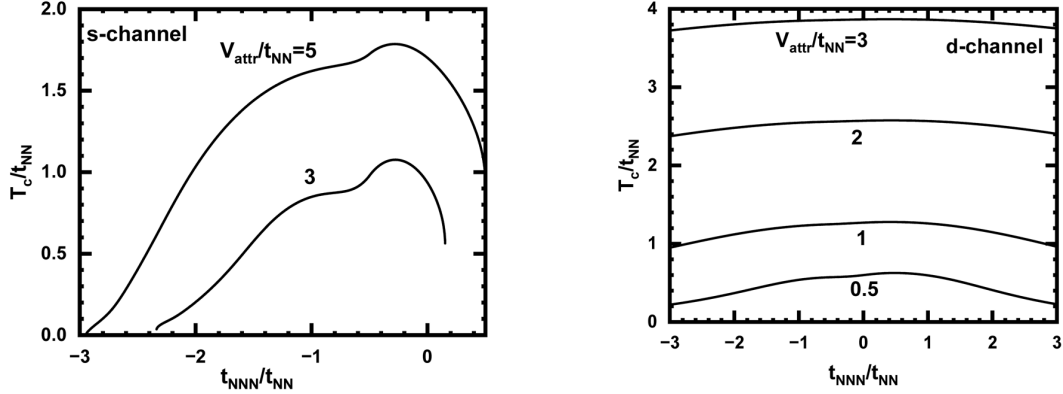


Рис. 4. Критична температура в різних каналах як функція параметра NNN перескоків при різних значеннях притягання та рівні легування 0,5

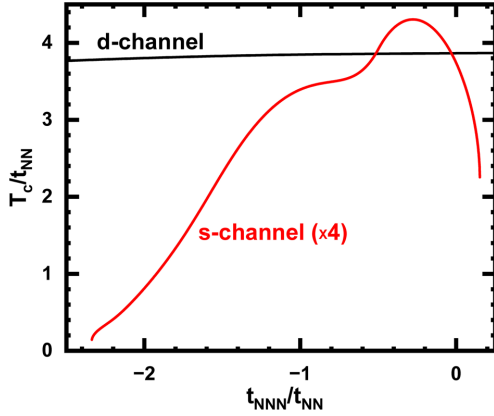


Рис. 5. Критична температура в каналах d - і s -спарювання (в останньому випадку помножена на 4) як функція параметра NNN перескоків при $V_{attr}/t_{NN} = 3$ і рівні легування 0,5

кілька разів вищою. Однак роль NNN перескоків в обох каналах дуже різна. Найпомітнішим є те, що при позитивних значеннях цього параметра s -надпровідність швидко зменшується з ростом цього параметра, що призводить до чистого d -спарювання при значеннях t_{NNN} більших, ніж приблизно $0,1t_{NN}$.

Як це випливає з рис. 5, можна регулювати співвідношення між відносними внесками s - та d -пар у конденсаті, змінюючи співвідношення t_{NNN}/t_{NN} . Зокрема, в той час як d -спарювання відносно слабо залежить від параметра NNN перескоків, s -канал демонструє різке збільшення надпровідності, якщо параметр NNN перескоків знаходиться приблизно в інтервалі $-0,5t_{NN} < t_{NNN} < 0$. Це можна частково пояснити модифікацією поверхні Фермі, показаної на рис. 2. А саме, поверхня Фер-

мі стає надзвичайно деформованою та зміщеною від K -долин при $t_{NNN}/t_{NN} \sim -0,3$. У наступному розділі ми наведемо інші аргументи, чому це відбувається.

6. Природа протилежної ролі t_{NNN} в s - та d -каналах

Розглянемо два розв'язки (19) і (23) окремо при розкладанні в ряд рівнянь для критичної температури (25) і (26) в лінійному наближенні по t_{NNN} . В s -каналі, рівняння (25) при $k\rho_1 = \frac{1}{2}k_x a + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y a$ та $k\rho_2 = \frac{1}{2}k_x a - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y a$ має вигляд

$$1 = V_{attr} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[2 \cos^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) \cos^2 \left(\frac{k_y \sqrt{3} a}{2} \right) - \frac{1}{2} \sin(k_x a) \sin(k_y \sqrt{3} a) - \left(1 - \cos^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) - \cos^2 \left(\frac{k_y \sqrt{3} a}{2} \right) \right) \right] \times \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}}{2(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)}, \quad (28)$$

тоді як у d -каналі рівняння (26) перетворюється на

$$1 = V_{attr} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[2 \cos^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) \cos^2 \left(\frac{k_y \sqrt{3} a}{2} \right) - \frac{1}{2} \sin(k_x a) \sin(k_y \sqrt{3} a) + 2 \left(1 - \cos^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) - \cos^2 \left(\frac{k_y \sqrt{3} a}{2} \right) \right) \right] \times \frac{\tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{2T_c}}{2(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)}. \quad (29)$$

Порівняння останніх двох рівнянь показує, що доданок $[1 - \cos^2(k_x a/2) - \cos^2(k_y \sqrt{3}a/2)]$ у коефіцієнті симетрії цих рівнянь має різний знак у різних каналах та ще множить на 2 в d -каналі. Оскільки цей член позитивний у d -каналі, це призводить до вищої критичної температури. Щоб зрозуміти природу різної залежності критичної температури від параметра NNN перескоків, можна розкласти останній множник у рівнянні (29) у лінійному порядку по t_{NNN} . Оскільки t_{NNN} входить до дисперсії, то запишемо для неї явний вираз у лінійному наближенні:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) &\approx \\ &\approx 2t_{NN} \sqrt{\cos^2\left(\frac{k_y \sqrt{3}a}{2}\right) + \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)} + \\ &+ 2t_{NNN} \left[\cos\left(\sqrt{3}k_y a\right) + 2 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Останній доданок має наступну залежність від імпульсу при малих його значеннях:

$$2t_{NNN} \left[3 - \frac{9}{4} \left((k_x a)^2 + (k_y a)^2 \right) \right] \approx 6t_{NNN}.$$

Тому множення такого доданка на різні множники в різних каналах, а саме,

$$- \left(1 - \cos^2(k_x a/2) - \cos^2(k_y \sqrt{3}a/2) \right)$$

та

$$2 \left(1 - \cos^2(k_x a/2) - \cos^2(k_y \sqrt{3}a/2) \right),$$

призводять до різних внесків NNN перескоків у надпровідне спарювання (в основному, це зміна симетрії спарювання).

7. Підсумки

В роботі проаналізовано вплив параметра NNN перескоків t_{NNN} на надпровідні властивості стільниково-граткової моделі з NN притяганням. Було виявлено, що d -канал спарювання дає основний внесок у надпровідний конденсат при будь-якому значенні t_{NNN} . В той самий час, при $-0,5t_{NN} < t_{NNN} < 0$ маємо значний внесок від s -каналу спарювання. Швидко зменшення надпровідності зі зростанням t_{NNN} потребує більш детального вивчення. Цілком зрозуміло, що неможливо окремо

змінювати значення NN -компоненти матриці перескоків, і ми просто проаналізували роль цього компонента параметра перескоків у надпровідних властивостях системи зі стільниковою граткою (наприклад, у графені і дихалькогенідах перехідних металів).

Як було зазначено вище, роль носія NNN у надпровідності 2D систем майже не аналізувалася. Однак, окрім очевидного випадку електронного спектра, цей параметр визначає притягання між електронами або, точніше, робить це притягання різним у різних каналах, коли пари утворюються на NN вузлах (нематична надпровідність). Останній ефект є певною мірою несподіваним результатом цієї роботи. Також хочемо відзначити, що ефект може бути особливо актуальним для високотемпературних купратних надпровідників з іншою, квадратною, граткою. Хоча ця проблема вимагає окремого кількісного/числового дослідження, та навіть без такого аналізу очевидно, що в купратах конкуренція між s - та d -хвильовими каналами може виникати лише при ненульових значеннях t_{NNN} . Крім того, важливою проблемою, на яку досі не звертали уваги теоретики та експериментатори, є кросовер від (фактично локальних) нематичних пар до великих куперівських пар при збільшенні рівня легування. Наведене вище дослідження є першим кроком до вирішення цих цікавих і важливих проблем.

В.Л. був частково підтриманий грантами 0117U000236 та 0117U000240 Національної академії наук України, а також мав часткову підтримку Фонду Саймонса (Simons Foundation, USA). В.Т. було частково підтримано Міністерством енергетики США в рамках гранту DE-FG02-07ER46354.

1. B. Uchoa, G.G. Cabrera, A.H. Castro Neto. Nodal liquid and s -wave superconductivity in transition metal dichalcogenides. *Phys. Rev. B* **71**, 184509 (2005).
2. B. Uchoa, A.H. Castro Neto. Superconducting states of pure and doped graphene. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 146801 (2007).
3. E. Zhao, A. Paramekanti. BCS-BEC crossover on the two-dimensional honeycomb lattice. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 230404 (2006).
4. V.M. Loktev, V. Turkowski. Suppression of the superconducting transition temperature of doped graphene due to thermal fluctuations of the order parameter. *Phys. Rev. B* **79**, 233402 (2009).

5. G. Savini, A.C. Ferrari, F. Giustino. First-principles prediction of doped graphane as a high-temperature electron-phonon superconductor. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 037002 (2010).
6. V.M. Loktev, V. Turkowski. Possible high-temperature superconductivity in multilayer graphane: Can the cuprates be beaten? *J. Low Temp. Phys.* **164**, 264 (2011).
7. M. Black-Schaffer, C. Honerkamp. Chiral *d*-wave superconductivity in doped graphene. *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 423201 (2014).
8. E.R. Margine, F. Giustino. Two-gap superconductivity in heavily-doped graphene: Ab initio Migdal-Eliashberg theory. *Phys. Rev. B* **90**, 014518 (2014).
9. A. Garcia-Ruiz, M. Mucha-Kruczyński, V.I. Fal'ko. Superconductivity-induced features in the electronic Raman spectrum of monolayer graphene. *Phys. Rev. B* **97**, 155405 (2018).
10. R.T. Tagiyeva Askerbeyli, I.N. Askerzade. BCS superconductivity of Dirac electrons in graphene monolayer. *J. Supercond. Novel Magnet.* **32**, 1871 (2019).
11. E. Thingstad, A. Kamra, J.W. Wells, A. Sudbø. Phonon-mediated superconductivity in doped monolayer materials. *Phys. Rev. B* **101**, 214513 (2020).
12. A.L. Szabó, B. Roy. Extended Hubbard model in undoped and doped monolayer and bilayer graphene: Selection rules and organizing principle among competing orders. *Phys. Rev. B* **103**, 205135 (2021).
13. D. Qiu, C. Gong, S.S. Wang, M. Zhang, C. Yang, X. Wang, J. Xiong. Recent advances in 2D superconductors. *Adv. Mater.* **33**, 2006124 (2021).
14. A.M. Black-Schaffer, K. Le Hur. Topological superconductivity in two dimensions with mixed chirality. *Phys. Rev. B* **92**, 140503(R) (2015).
15. J.P.L. Faye, P. Sahebsara, D. Senechal. Chiral triplet superconductivity on the graphene lattice. *Phys. Rev. B* **92**, 085121 (2015).
16. J. Yuan, C. Honerkamp. Triplet pairing driven by Hund's coupling in doped monolayer MoS₂. *Preprint arXiv: 1504.04536v2* (2015).
17. D.-H. Lee, C.-H. Chung. Non-centrosymmetric superconductors on honeycomb lattice. *Phys. Status Solidi B* **255**, 1800114 (2018).
18. Y.F. Suprunenko, E.V. Gorbar, V.M. Loktev, S.G. Sharapov. Effect of next-nearest-neighbor hopping on the electronic properties of graphene. *Low Temp. Phys.* **34**, 812 (2008).
19. T. Farajollahpour, A.H. Rezvani, M.R. Khodarahmi, M. Arasteh. Next nearest neighbors effects on berry curvature of graphene. *Acta Phys. Polonica A* **122**, 180 (2012).
20. L.-Y. Xiao, S.-L. Yu, W. Wang, Z.-J. Yao, J.-X. Li. Possible singlet and triplet superconductivity on honeycomb lattice. *Eur. Phys. Lett.* **115**, 27008 (2016).
21. X. Zhu, T. Ying, H. Guo, S. Feng. Quantum Monte Carlo study of the dominating pairing symmetry in doped honeycomb lattice. *Chin. Phys. B* **28**, 077401 (2019).
22. L. Classen, A.V. Chubukov, C. Honerkamp, M.M. Scherer. Competing orders at higher-order Van Hove points. *Phys. Rev. B* **102**, 125141 (2020).
23. P. Jia, S. Yang, W. Li, J. Yang, T. Ying, X. Li, X. Sun. Pairing in the Hubbard model on the honeycomb lattice with hopping up to the third-nearest-neighbor. *Phys. Lett. A* **442**, 128175 (2022).
24. X.-D. Li, H.-R. Liu, Z.-D. Yu, C.-D. Gong, S.-L. Yu, Y. Zhou. Mixture of the nearest- and next-nearest-neighbor *d* + *id*-wave pairings on the honeycomb lattice. *New J. Phys.* **24**, 103035 (2022).
25. J. Wang, X. Zhang, R. Ma, G. Yang, E.V. Castro, T. Ma. Spin-triplet superconducting pairing in doped MoS₂. *Phys. Rev. B* **106**, 134513 (2022).
26. X. Han, A.P. Schnyder, X. Wu. Enhanced nematicity emerging from higher-order Van Hove singularities. *Phys. Rev. B* **107**, 184504 (2023).
27. L. Fu. Odd-parity topological superconductor with nematic order: Application to Cu_xBi₂Se₃. *Phys. Rev. B* **90**, 100509(R) (2014).
28. S. Yonezawa, K. Tajiri, S. Nakata, Y. Nagai, Z. Wang, K. Segawa, Y. Ando, Y. Maeno. Thermodynamic evidence for nematic superconductivity in Cu_xBi₂Se₃. *Nature Phys.* **13**, 123 (2017).
29. S. Wolf, D. Di Sante, T. Schwemmer, R. Thomale, S. Rachel. Triplet superconductivity from nonlocal Coulomb repulsion in an atomic Sn layer deposited onto a Si(111) substrate. *Phys. Rev. Lett.* **128**, 167002 (2022).
30. P. Rosenzweig, H. Karakachian, D. Marchenko, K. Küster, U. Starke. Overdoping graphene beyond the van Hove singularity. *Phys. Rev. Lett.* **125**, 176403 (2020).

Одержано 16.06.24.

Переклад на українську мову О. Войтенка

V.M. Loktev, V. Turkowski

SYMMETRY AND VALUE OF THE ORDER PARAMETER IN 2D NEMATIC SUPERCONDUCTORS

We derive equations for the superconducting nematic order parameter and chemical potential for the hexagonal lattice by accounting for nearest- and next-nearest-neighbor hoppings of electrons. By analyzing the energy of the superconducting ground state, we have found that the symmetry of the order parameter and some other superconducting properties of the system strongly depend on the sign and the magnitude of the next-nearest neighbor hopping. As we will demonstrate, both extended *s*- and *d*-pairings significantly contribute to the pairing in the system, that be tuned by changing the hopping parameters. We discuss a possible connection of the obtained results to the properties of several doped monolayer superconductors – graphene and transition metal dichalcogenides.

Keywords: theory of superconductivity, 2D systems, nematicity.