

Quantum Monte Carlo Study of the Single-Layered High-Tc Cuprates with a Two-Orbital Model

Ying Guan¹, Cong Mei¹, Yun Gao², Zhongbing Huang^{1*}

¹Faculty of Physics and Electronic Technology, Hubei University, Wuhan Hubei

²Faculty of Materials Science and Engineering, Hubei University, Wuhan Hubei

Email: *huangzb@hubu.edu.cn

Received: Apr. 22nd, 2016; accepted: May 9th, 2016; published: May 12th, 2016

Copyright © 2016 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

Abstract

On the basis of a two-orbital model (including $d_{x^2-y^2}$ and d_{z^2} orbitals), we perform a systematic study of the superconducting property in single-layered $\text{La}_{2-x}(\text{Sr/Ba})_x\text{CuO}_4$ and $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ by using the constrained-path Monte Carlo method. We find that the d -wave pairing correlation is strongly enhanced with increasing the energy difference ΔE between $d_{x^2-y^2}$ and d_{z^2} orbitals, which provides a reasonable explanation of higher superconducting critical temperature T_c in $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ than in $\text{La}_{2-x}(\text{Sr/Ba})_x\text{CuO}_4$. The similar spin correlations in the La- and Hg-based systems suggest that antiferromagnetism is not responsible for material-dependent superconductivity. Further analysis indicates that the hole density on the $d_{x^2-y^2}$ orbital increases with increasing ΔE , leading to a higher T_c in the Hg-based system with larger ΔE . Our results are useful for understanding the superconducting property in single-layered high- T_c cuprates.

Keywords

High-Tc Cuprates, Superconductivity, Two-Orbital Model, Quantum Monte Carlo

基于双轨道模型单层铜氧化物高温超导体的量子蒙特卡罗探究

关莹¹, 梅聪¹, 高云², 黄忠兵^{1*}

*通讯作者。

¹湖北大学物理与电子科学学院, 湖北 武汉

²湖北大学材料科学与工程学院, 湖北 武汉

Email: *huangzb@hubu.edu.cn

收稿日期: 2016年4月22日; 录用日期: 2016年5月9日; 发布日期: 2016年5月12日

摘要

基于描述单层铜氧化物高温超导体的双轨道模型(包含 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{z^2} 轨道), 我们采用约束路径量子蒙特卡罗方法研究了 $\text{La}_{2-x}(\text{Sr/Ba})_x\text{CuO}_4$ 和 $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ 的超导特性。我们发现随着两个轨道间能量差 ΔE 的增加, d 波配对关联函数被显著增强。该结果合理解释了 $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ 相比于 $\text{La}_{2-x}(\text{Sr/Ba})_x\text{CuO}_4$ 具有更高超导临界转变温度这一特性。由于两个超导体系中的自旋关联函数相似, 因而形成库伯对的反铁磁自旋涨落不是导致与材料相关的超导特性的根源。进一步分析发现 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的空穴浓度随着 ΔE 的增大而增加, 使得有更多空穴参与配对的 $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ 具有更高的超导临界转变温度。我们的研究有助于理解单层铜氧化物高温超导体的超导特性。

关键词

铜氧化物高温超导体, 超导, 双轨道模型, 量子蒙特卡罗

1. 引言

自从铜氧化物高温超导体发现以来, 对其反常物理特性和超导机理的理解一直是凝聚态物理学中的前沿研究课题。大量的实验研究已经确认 d 波是超导能隙函数的主要部分[1]-[3], 这为理解超导机理提供了可靠的实验依据。同时, 人们发现不同系列的铜氧化物材料具有不同的超导临界转变温度。这和材料晶体结构中所含有的 CuO_2 层数紧密相关, 一般而言 CuO_2 层越多, 超导临界转变温度 T_c 就越高。但是即使都是单层铜氧化物结构的材料, 其超导临界转变温度也有非常大的差距, 例如 $\text{La}_{2-x}(\text{Sr/Ba})_x\text{CuO}_4$ 的 T_c 约为 40 K [4], 而 $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ 的 T_c 却高达 90 K [5]。

为了解释不同系列铜氧化物高温超导体的超导特性差异, 人们基于含近邻跃迁 t 和次近邻跃迁 t' 的单轨道模型开展了大量的理论研究, 其中 Hg 系的次近邻跃迁值比 La 系的值要大。基于 t - t' -J 模型的变分蒙特卡罗[6]和运动方程[7]研究发现随着 t' 的增大, d 波超导受到明显增强, 这和实验结果一致。另一方面, 基于 t - t' -U 单带哈伯德模型的量子蒙特卡罗[8] [9]和动态团簇[10]研究发现 t' 的增大将导致 d 波超导受到显著抑制。上述研究结果表明从单轨道模型出发难以得到统一的结论。最近, Sakakibara 等人[11] [12]根据第一性原理计算的结果提出了描述单层铜氧化物高温超导体的双轨道模型, 其中包含 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{z^2} 两个轨道, 前者源于 Cu 的 $3d_{x^2-y^2}$ 和铜氧平面内 O 的 $2p_\sigma$ 轨道, 后者源于 Cu 的 $3d_{z^2}$ 和顶角 O 的 $2p_z$ 轨道。他们进一步采用涨落交换近似研究了模型的超导特性, 发现随着 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{z^2} 轨道间能量差的增大, d 波超导显著增强。该结果成功地解释了为什么具有较大能量差的 Hg 系呈现出更高的 T_c 。

在本文中, 考虑到铜氧化物高温超导体中电子关联和量子涨落对其物理特性具有重要的影响, 我们将采用约束路径量子蒙特卡罗方法[13]-[16]深入研究 Sakakibara 等人提出的双轨道模型。我们的研究工作一方面可以检验近似计算所得结论是否可靠, 另一方面通过分析自旋关联函数和空穴分布与模型参数的依赖关系可以加深理解不同体系具有不同超导特性的根源。

2. 模型结构和哈密顿量

对于单层铜氧化物高温超导体，我们采用如下的哈密顿量加以描述[12]。

$$H = \sum_i \sum_u \sum_\sigma \varepsilon_u n_{iu\sigma} + \sum_{ij} \sum_{uv} \sum_\sigma t_{ij}^{uv} c_{iu\sigma}^+ c_{jv\sigma} + \sum_i U \sum_u n_{iu\uparrow} n_{iu\downarrow} \quad (1)$$

这里 i, j 分别代表不同的格点， u, v 则表示两个轨道， σ 表示电子自旋。 $c_{iu\sigma}^+$ 表示在 $d_{x^2-y^2}$ 或 d_{z^2} 轨道产生一个空穴， $n_{iu\sigma}$ 为粒子数算符。 ε_u 表示 u 轨道的能量， t_{ij}^{uv} 表示轨道间或轨道内电子的跃迁积分， U 代表同一轨道上的在位库仑相互作用。

在表 1 中，我们列出了 La 系和 Hg 系的模型参数值，其中 ΔE 代表 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{z^2} 轨道间的能量差， t_1 、 t_2 、 t_3 分别表示近邻、次近邻、第三近邻格点间 $d_{x^2-y^2}$ 轨道内的跃迁积分，而 t_4 表示近邻格点两个轨道之间的跃迁积分。

为了分析模型(1)的超导特性，我们定义了如下的 d 波配对关联函数[8]。

$$P_d(\mathbf{R}) = \langle \Delta_d^+(\mathbf{R}) \Delta_d(0) \rangle \quad (2)$$

上式中 $\Delta_d(\mathbf{R}) = \sum_{\boldsymbol{\delta}} f_d(\boldsymbol{\delta}) \left(c_{Rd_{x^2-y^2}\uparrow} c_{R+\boldsymbol{\delta}d_{x^2-y^2}\downarrow} - c_{Rd_{x^2-y^2}\downarrow} c_{R+\boldsymbol{\delta}d_{x^2-y^2}\uparrow} \right)$ 代表近邻格点间 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的 d 波配对算符。当 $\boldsymbol{\delta} = \pm\hat{x}$ 时， $f_d(\boldsymbol{\delta}) = 1$ ；当 $\boldsymbol{\delta} = \pm\hat{y}$ 时， $f_d(\boldsymbol{\delta}) = -1$ 。

模型的磁性通过 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的自旋结构因子 $S(\mathbf{q})$ 来加以表征，其定义如下：

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{iq(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left\langle \left(n_{id_{x^2-y^2}\uparrow} - n_{id_{x^2-y^2}\downarrow} \right) \left(n_{jd_{x^2-y^2}\uparrow} - n_{jd_{x^2-y^2}\downarrow} \right) \right\rangle \quad (3)$$

上式中 N 为模拟晶格的格点数。

3. 计算结果与讨论

我们对具有周期性边界条件的 6×6 、 8×8 、以及 10×8 有限尺寸晶格进行了量子蒙特卡罗模拟计算，并集中分析了最佳掺杂浓度 0.15 附近的磁性和超导特性。哈密顿量(1)中 U 取为 $4|t_1|$ ，上述三个晶格的空穴填充数目分别为 42、74、94，相应的空穴掺杂浓度分别为 0.167、0.156、0.175。图 1 显示三个晶格上 La 系和 Hg 系的 d 波配对关联函数随库伯对之间距离 R 的变化行为。我们可以清楚地看到，尽管不同晶格上的配对关联函数由于有限尺寸效应而存在较大的差异，但是 Hg 系的长程($R > 2$)配对关联函数均大于 La 系的值，这说明 Hg 系有利于形成更高 Tc 的 d 波超导态。这与实验结果完全相符合，同时证实了 Sakakibara 等人的涨落交换近似计算结果[11] [12]。

为了解 Hg 系具有更高 Tc 的物理原因，我们在表 2 中列出了 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的磁矩平方值

$$m^2(d_{x^2-y^2}) = \left\langle \left(n_{id_{x^2-y^2}\uparrow} - n_{id_{x^2-y^2}\downarrow} \right)^2 \right\rangle$$

、空穴占据数 $n(d_{x^2-y^2}) = \left\langle n_{id_{x^2-y^2}\uparrow} + n_{id_{x^2-y^2}\downarrow} \right\rangle$ 、 d_{z^2} 轨道上的空穴占据数 $n(d_{z^2}) = \left\langle n_{id_{z^2}\uparrow} + n_{id_{z^2}\downarrow} \right\rangle$ 、以及反铁磁波矢 $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ 处的自旋结构因子 $S(\pi, \pi)$ 。从表 2 中我们可以看出，La 系和 Hg 系中 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的磁矩和自旋结构因子取值较为接近。按照 d 波超导的反铁磁自旋涨落交换机制，体系的反铁磁自旋关联越强，越有利于 d 波超导配对的形成。显然，La 系和 Hg 系中反铁磁自旋关联的差别程度太小，因而难以解释这两个体系超导特性的显著差异。

从表 2 中我们还发现，空穴主要分布在 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上，而 d_{z^2} 轨道上的空穴浓度较低，这是因为后者的轨道能量较高的缘故。两个超导体体系的一个重要差别是 Hg 系的 $n(d_{x^2-y^2})$ 显著大于 La 系的值，而 $n(d_{z^2})$

Table 1. The parameters used in our calculations for La- and Hg-based systems. ΔE denotes the energy difference between $d_{x^2-y^2}$ and d_{z^2} orbitals. t_1 , t_2 , and t_3 stand for the first, second, and third neighbor hoppings for the $d_{x^2-y^2}$ orbital, and t_4 stands for the nearest-neighbor hopping between two orbitals

表 1. 表中列出 La 系和 Hg 系的双轨道模型参数值。 ΔE 代表 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{z^2} 轨道间的能量差, t_1 、 t_2 、 t_3 分别表示近邻、次近邻、第三近邻格点间 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的跃迁积分, 而 t_4 表示近邻格点两个轨道之间的跃迁积分

	$t(d_{x^2-y^2} \rightarrow d_{x^2-y^2})$			$t(d_{x^2-y^2} \rightarrow d_{z^2})$	$E(d_{z^2}) - E(d_{x^2-y^2})$
	t_1	t_2	t_3	t_4	ΔE
La [eV]	-0.471	0.0932	-0.0734	0.178	0.91
Hg [eV]	-0.456	0.0993	-0.0897	0.105	2.19

Table 2. Square of magnetic moment m^2 and $S(\pi, \pi)$ on the $d_{x^2-y^2}$ orbital. The hole occupations $n(d_{x^2-y^2})$ and $n(d_{z^2})$. The results are given for 6×6 , 8×8 , and 10×8 lattices

表 2. 三个晶格中 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的磁矩平方值 m^2 , (π, π) 点的自旋结构因子 $S(\pi, \pi)$, 以及两个轨道上的空穴占据数 $n(d_{x^2-y^2})$ 和 $n(d_{z^2})$

晶格		$m^2(d_{x^2-y^2})$	$S(\pi, \pi)(d_{x^2-y^2})$	$n(d_{x^2-y^2})$	$n(d_{z^2})$
6×6	La	0.65730(1)	1.135(5)	0.92240(3)	0.24420(3)
	Hg	0.64614(5)	0.995(1)	1.14327(2)	0.02339(2)
8×8	La	0.65561(7)	1.175(4)	0.92690(2)	0.22930(2)
	Hg	0.66508(6)	1.162(3)	1.12683(3)	0.02941(3)
10×8	La	0.66508(6)	1.200(1)	0.92800(3)	0.24455(5)
	Hg	0.66173(5)	1.246(4)	1.14567(3)	0.02932(5)

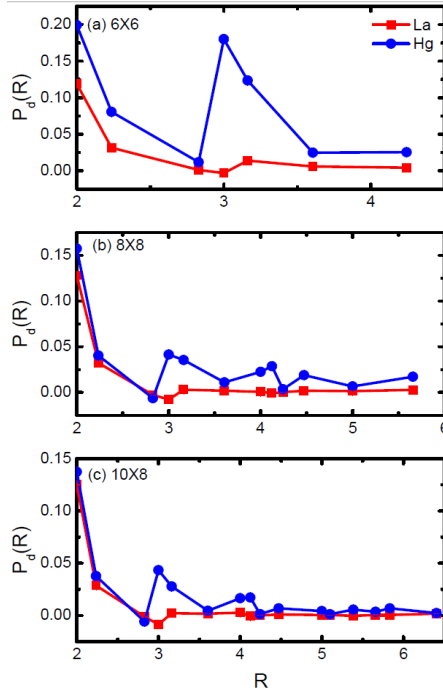


Figure 1. The d -wave pairing correlation function $P_d(R)$ of La- and Hg-based systems as a function of distance R . (a), (b), and (c) show the results for the 6×6 , 8×8 , and 10×8 lattices

图 1. La 系和 Hg 系的 d 波配对关联函数 $P_d(R)$ 随库伯间距 R 的变化曲线。(a)、(b)、(c) 分别给出 6×6 、 8×8 、以及 10×8 晶格上的计算结果

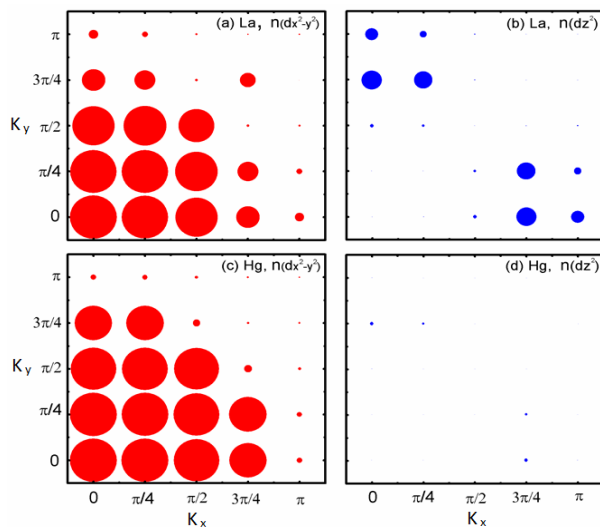


Figure 2. The distribution of holes in the Brillouin zone of La- and Hg-based systems on the 8×8 lattice. The sizes of filled circles are proportional to the hole occupations
图 2. 8×8 晶格中 La 系和 Hg 系各轨道上的空穴在布里渊区中的分布，其中圆圈的大小正比于空穴数

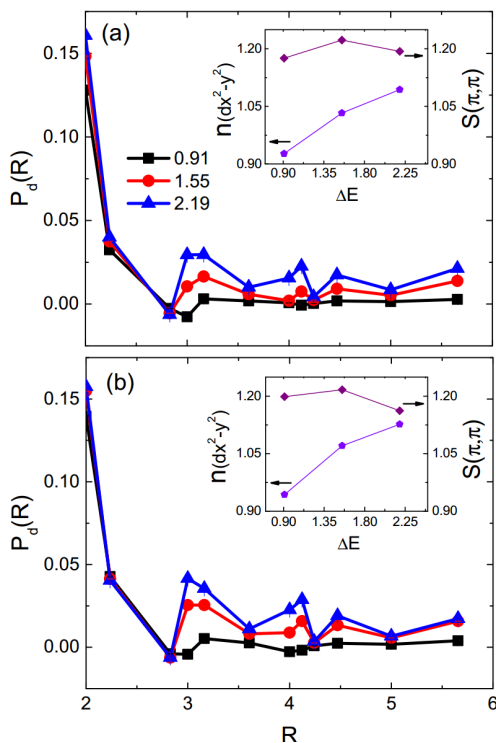


Figure 3. The d -wave pairing correlation function of La-based (a) and Hg-based (b) systems as a function of distance R at different ΔE . The inset figures show the ΔE dependence of hole occupation on the $d_{x^2-y^2}$ orbital and $S(\pi, \pi)$
图 3. 8×8 晶格中 ΔE 取不同值时, La 系(a)和 Hg 系(b)的 d 波配对关联函数随库伯对间距的变化行为。其中的小图显示 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的空穴和 $S(\pi, \pi)$ 随 ΔE 的变化情况

的情况则恰恰相反。由于三个晶格上的空穴掺杂浓度均接近最佳掺杂浓度 0.15，轨道上的空穴占据数说明 Hg 系中掺杂空穴主要占据 $d_{x^2-y^2}$ 轨道，而 La 系中掺杂空穴主要占据 d_{z^2} 轨道。

为了进一步观察空穴在动量空间的分布特征，我们在图 2 中给出 8×8 晶格四分之一布里渊区中各个波矢 (k_x, k_y) 处的空穴占据数。由图 2 可以看出在反节点 $(\pi, 0)$ 和 $(0, \pi)$ 附近，La 系 d_{z^2} 轨道上的空穴占据数明显高于 Hg 系的值，而在反节点 $(\pi, 0)$ 和 $(0, \pi)$ 的连线附近，Hg 系 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的空穴占据数显著大于 La 系的值。由于反节点连线附近的空穴可以通过交换反铁磁自旋涨落形成库伯对，因而 Hg 系相比于 La 系有更多的空穴参与库伯配对，从而在磁关联相似的情况下可以形成更高的超导临界转变温度。

最后，为了进一步说明 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{z^2} 轨道之间的能量差 ΔE 对 d 波配对关联函数的影响，我们在图 3 中给出 ΔE 取不同值时， 8×8 晶格上 La 系(图 3(a))和 Hg 系(图 3(b))的 d 波配对关联函数随库伯对间距 R 的演化行为。这里 ΔE 包含 La 系和 Hg 系的原始值，以及两者的平均值。在两个超导体系中，我们发现 d 波配对关联函数均随 ΔE 的增大而明显增强。图 3 内插图表明反铁磁自旋关联未受到 ΔE 的强烈影响，但是 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上的空穴占据数却随 ΔE 的增大而单调增加。与我们前面的分析类似， ΔE 导致的超导差异主要源于 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上参与配对空穴数目的变化，而非反铁磁自旋涨落的不同。

4. 结论

基于描述单层铜氧化物高温超导体的双轨道模型，我们采用约束路径量子蒙特卡罗方法研究了 La 系和 Hg 系中超导特性的差异。计算结果表明 Hg 系的 d 波配对关联函数显著大于 La 系的值，从而解释了 Hg 系具有更高超导临界转变温度这一特性。结合反铁磁自旋关联和 $d_{x^2-y^2}$ 、 d_{z^2} 轨道上的空穴占据数，我们发现 La 系和 Hg 系超导特性的差异主要源于 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上参与库伯配对的空穴数目与两个轨道之间的能量差紧密相关，而非反铁磁性的不同。我们超越平均场的数值计算结果不仅证实了涨落交换近似的计算结果，而且对不同体系超导差异的根源给出了更为清晰的说明。

致 谢

感谢湖北大学物理与电子科学学院同组的杨辉师兄、吴永政师兄和方世超的交流讨论。

基金项目

国家自然科学基金(批准号：11174072，91221103)资助的课题。

参考文献 (References)

- [1] Tsuei, C.C. and Kirtley, J.R. (2000) Pairing Symmetry in Cuprate Superconductors. *Review of Modern Physics*, **72**, Article ID: 969. <http://dx.doi.org/10.1103/revmodphys.72.969>
- [2] Damascelli, A., Hussain, Z. and Shen, Z.X. (2003) Angle-Resolved Photoemission Studies of the Cuprate Superconductors. *Review of Modern Physics*, **75**, Article ID: 473. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.75.473>
- [3] Basov, D.N. and Timusk, T. (2005) Electrodynamics of High-Tc Superconductors. *Review of Modern Physics*, **77**, Article ID: 721.
- [4] Jorgensen, J.D., *et al.* (1987) Lattice Instability and High-Tc Superconductivity in $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$. *Physical Review Letters*, **58**, Article ID: 1024. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.1024>
- [5] Wagner, J.L., *et al.* (1993) Structure and Superconductivity of $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$. *Physica C*, **210**, Article ID: 447. [http://dx.doi.org/10.1016/0921-4534\(93\)90989-4](http://dx.doi.org/10.1016/0921-4534(93)90989-4)
- [6] Shih, C.T., Lee, T.K., Eder, R., Mou, C.-Y. and Chen, Y.C. (2004) Enhancement of Pairing Correlation by t' in the Two-Dimensional Extended t-J Model. *Physical Review Letters*, **92**, Article ID: 227002. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.227002>
- [7] Prelovsek, P. and Ramsak, A. (2005) Spin-Fluctuation Mechanism of Superconductivity in Cuprates. *Physical Review B*, **72**, Article ID: 012510. <http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.72.012510>
- [8] Huang, Z.B., Lin, H.Q. and Gubernatis, J.E. (2001) Quantum Monte Carlo Study of Spin, Charge, and Pairing Correla-

- tions in the t - t' - U Hubbard Model. *Physical Review B*, **64**, Article ID: 205101. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.64.205101>
- [9] Veilleux, A.F., Dare, A.M., Chen, L., Vilk, Y.M. and Tremblay, A.-M.S. (1995) Magnetic and Pair Correlations of the Hubbard Model with Next-Nearest-Neighbor Hopping. *Physical Review B*, **52**, Article ID: 16255. <http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.52.16255>
- [10] Chen, K.-S., Meng, Z.Y., Yang, S.-X., Pruschke, T., Moreno, J. and Jarrell, M. (2013) Evolution of the Superconductivity in the Two-Dimensional Hubbard Model. *Physical Review B*, **88**, Article ID: 245110. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.245110>
- [11] Sakakibara, H., Usui, H., Kuroki, K., Arita, R. and Aoki, H. (2010) Two-Orbital Model Explains the Higher Transition Temperature of the Single-Layer Hg-Cuprate Superconductor Compared to That of the La-Cuprate Superconductor. *Physical Review Letters*, **105**, Article ID: 057003. <http://dx.doi.org/10.1103/physrevlett.105.057003>
- [12] Sakakibara, H., Usui, H., Kuroki, K., Arita, R. and Aoki, H. (2012) Origin of the Material Dependence of T_c in the Single-Layered Cuprates. *Physical Review B*, **85**, Article ID: 064501. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.064501>
- [13] Zhang, S.W., Carlson, J. and Gubernatis, J.E. (1997) Constrained Path Quantum Monte Carlo Method for Fermion Ground States. *Physical Review B*, **55**, Article ID: 7464. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.55.7464>
- [14] Zhang, S.W., Carlson, J. and Gubernatis, J.E. (1997) Pairing Correlations in the Two-Dimensional Hubbard Model. *Physical Review Letters*, **78**, Article ID: 4486. <http://dx.doi.org/10.1103/physrevlett.78.4486>
- [15] Huang, Z.B., Lin, H.Q. and Gubernatis, J.E. (2001) Pairing, Charge, and Spin Correlations in the Three-Band Hubbard Model. *Physical Review B*, **63**, Article ID: 115112. <http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.63.115112>
- [16] Huang, Z.B., Lin, H.Q. and Arrigoni, E. (2011) Strong Enhancement of d-Wave Superconducting State in the Three-Band Hubbard Model Coupled to an Apical Oxygen Phonon. *Physical Review B*, **83**, Article ID: 064521. <http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.83.064521>