

铜基二轨道哈伯德模型中自旋条纹序与超导电性相互关系的量子蒙特卡罗研究*

方世超[†] 朱佳芮

(南阳理工学院数理学院, 南阳 473004)

(2025年10月8日收到; 2025年12月15日收到修改稿)

为澄清铜氧化物高温超导材料具有不同超导转变温度的原因以及自旋条纹序和超导电性之间的关系, 基于铜基二轨道哈伯德模型, 采用大尺度无偏差的约束路径量子蒙特卡罗方法研究了 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道对 LSCO 和 HBCO 两类典型的铜基超导体中的超导电性和自旋条纹序的影响. 首先, 研究不同类型的铜基超导材料的轨道能级差的差异. 数值结果显示, 相比于 LSCO 超导材料, HBCO 超导材料中的 d 波超导电子配对对称性的配对关联函数和有效配对关联函数的强度表现出更为显著的优势, 表明 HBCO 超导材料的超导转变温度高于 LSCO 超导材料的超导转变温度的原因与 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道的作用有关. 其次, 考察 LSCO 和 HBCO 两类超导材料中自旋条纹序的形成情况. 数值模拟结果显示, LSCO 体系的自旋条纹序呈现出相对较长的单个畴区, 而 HBCO 体系的自旋条纹序呈现出周期性且具有多个畴区, 表明 LSCO 体系存在局域有序的自旋条纹序, HBCO 体系存在非局域长程有序的自旋条纹序. 更为重要的是, HBCO 超导材料中 d 波超导电子配对对称性的配对关联函数和有效配对关联函数在长程序上表现出明显的优势, 这说明长程有序的自旋条纹序有利于提高材料的超导电性, 即自旋条纹序和超导电性存在协同效应.

关键词: d 波超导态, 自旋条纹序, 约束路径量子蒙特卡罗方法

DOI: 10.7498/aps.75.20251362

CSTR: 32037.14.aps.75.20251362

1 引言

铜氧化物高温超导体作为最典型的非常规超导体, 理解其超导机理一直是凝聚态物理学的重要研究课题^[1-4]. 其重要性在于, 不同于利用 Bardeen-Cooper-Schrieffer (BSC) 理论^[5,6]解释常规超导体的超导机制为各向同性的 s 波超导电子配对对称性^[6], 当前最大的共识是铜基超导体的电子配对对称性为各向异性的 d 波超导电子配对对称性^[7,8]. 在理解铜氧化物高温超导体超导电性的过程中, 普遍认同的观点是铜氧化物高温超导材料具有与钙钛矿晶体相似的结构, 该结构通常是扭曲的氧缺失

的多层结构, 导电性主要发生在 CuO_2 平面层, 因此, 准二维的 CuO_2 平面层被认为是铜基材料表现出超导电性的关键^[9]. 为了对铜基材料的超导电性有更清楚的认识, 先前的研究工作分析了 CuO_2 平面中 Cu^{2+} 的外层电子排布, 发现 Cu^{2+} 的外层电子构型为 d^9 填充, 在八面体配合体晶体场的作用下 5 条 d 轨道发生劈裂, 形成由 $d_{x^2-y^2}$ 和 $d_{3z^2-r^2}$ 组成的 e_g 轨道以及 d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} 组成的 t_{2g} 轨道, 进一步地, 姜-泰勒效应或顶点氧原子的缺失使得 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道能量低于 Cu 的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道能量^[10]. 正是由于 Cu^{2+} 的外层电子呈现这样的轨道排布, 早期的理论研究采用单轨道哈伯德模型^[11-14](由 Cu 的 $d_{x^2-y^2}$ 构成) 以及三轨道哈伯德模型^[15-18](由 Cu

* 南阳理工学院博士科研启动基金 (批准号: NGBJ-2022-43) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: shichaofang@nyist.edu.cn

的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道和 O 的 p_x 和 p_y 轨道构成) 成功解释了实验上观测到铜氧化物高温超导体的超导电子配对对称性为 d 波超导电子配对对称性的结果 [7,8].

虽然人们已经很清楚地知晓铜氧化物高温超导体的超导电子配对形式为 d 波配对对称性, 但是不同类型的铜基超导体的超导特性差异很大, 其中典型的 $\text{La}_{2-x}(\text{Sr}/\text{Ba})_x\text{CuO}_4$ (L(S/B)CO) [19,20] 的超导转变温度 $T_c \approx 40$ K, 而 $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ (HBCO) 的超导转变温度 $T_c \approx 90$ K [21], 甚至调节合适的氧占比 $\delta \approx 0.12$, 该系统的超导转变温度可接近 $T_c \approx 100$ K [22]. 目前, 不同类型的铜氧化物高温超导体为何具有不同的超导转变温度仍是一个广泛争论的问题. 近期, 基于描述铜基超导体基态物理性质的 Emery 模型, 即所谓的三轨道哈伯德模型, Vitali 等 [17] 指出铜轨道和氧轨道间的在位能量差 $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ 的大小对应不同类型的铜基超导体, 例如 LSCO 的能量差 $\Delta = 4.4$ eV, 而 HBCO 的能级差 $\Delta = 1.9$ eV. 值得注意的是, 他们利用约束路径量子蒙特卡罗方法模拟的数值结果显示, 随着铜轨道和氧轨道能量差的减小, d 波超导电子配对对称性对应的配对关联函数的数值逐渐增大, 这确实可以帮助解释为何 HBCO 的超导转变温度高于 LSCO 的超导转变温度. 然而, 进一步观察 d 波超导电子配对对称性的配对关联函数的变化情况, 发现其长程部分表现出随模拟晶格尺寸增大而急剧减小的行为, 可以预见, 在热力学极限下 d 波超导电子配对对称性很难存活. 此结果也说明从铜基三轨道模型难以准确捕获铜氧化物高温超导材料的准确物理信息.

在解决铜氧化物高温超导材料具有不同超导转变温度的问题上, 近些年来实验上取得了重要的新进展, Li 等 [23] 报道了在极高压与高温条件下合成的铜氧化物 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-y}$ (Ba214, 或者等效地记为 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$) 材料表现出独特的性质. 其一, 高压合成的 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 材料的超导转变温度达到 $T_c \approx 73$ K, 比典型的铜氧化物 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 材料的超导转变温度高出约 30 K; 其二, 该材料在磁化率、比热、中子散射、X 射线散射、X 射线吸收谱、 μ 自旋旋转以及共振非弹性散射等实验上测出的结果表现出一系列的异常性质, 使其展现出一系列与传统铜氧化物高温超导材料迥然不同的特征 [23,24]. 这些特征主要表现为: 1) 顶点氧键长显著缩短; 2) 局域 CuO_6 八面体呈现独特的压缩构型; 3) 超导电性发生在极高空穴掺杂位置. 这些显著特征表明

$\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ 的原子结构虽然与 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 类似, 但由于 B^{2+} 离子半径过大, 使得 CuO_6 八面体压缩导致晶格参数呈现显著差异. 其主要原因在于顶点氧的键长显著缩短, 使得额外的 O_δ 原子进入平面氧点位, 使得 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道能级上移至 $d_{x^2-y^2}$ 轨道之上, 从而引发 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 和 $d_{x^2-y^2}$ 轨道能级发生反转. 上述结果毫无争议地说明 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道在影响材料的超导特性方面扮演着关键作用. 受此工作的启发, 在理解铜氧化物高温超导材料的特性时是否也应考虑 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道的影响. 我们注意到早期的理论工作指出过 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道的重要性. Sakakibara 等 [25] 利用第一性原理计算对比了 La_2CuO_4 , $\text{HgBa}_2\text{CaCu}_2\text{O}_6$ 等八种不同类型的铜氧化物高温超导材料的能带结构. 第一性原理计算结果表明, 铜基超导体的超导转变温度 T_c 和费米面的翘曲程度存在密切关联. 对于超导转变温度较低的 La_2CuO_4 超导材料, 费米面翘曲程度明显小于超导转变温度较高的 $\text{HgBa}_2\text{CaCu}_2\text{O}_6$ 超导材料的费米面翘曲程度. 细致分析能带结构发现, 导致上述情况的原因在于 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道在费米面附近的贡献权重不同, $d_{3z^2-r^2}$ 轨道贡献越小费米面翘曲程度越严重. 该理论充分说明了 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道在理解铜氧化物高温超导材料的物性中具有关键作用.

为了对铜基超导材料有更全面的认识, 除了要理解不同类型的铜基材料为何具有不同的超导转变温度, 还要理解这类材料中呈现出的各个物相与超导电性之间具有何种关系. 原因在于非常规类超导体一个典型的共同特征是都具有电子-电子关联效应所导致的丰富且复杂的物理相图. 对于铜氧化物高温超导材料而言, 其相图独特之处为在欠掺杂区域超导转变温度 T_c 之上存在赝能隙区域 [26,27]. X 射线散射、核磁共振谱学、扫描隧道显微镜、角分辨光电子能谱和输运测试等实验数据都表明, 赝能隙区域除具有向超导区域演化的趋势之外, 同时伴随着形成其他各种有序相的趋势, 这些有序相包含电荷密度波序 [28,29]、自旋密度波序 [30]、配对密度波序 [31,32] 以及向列序态等新奇的关联态 [33-35]. 自然地, 在赝能隙区间向超导演化的过程中, 这些有序态和超导态之间必然存在密切关联. 这些有序态中条纹序是一种特殊的电子基态, 其特征在于电荷有序和磁有序的耦合共存, 并且其波矢受到特定的

约束^[29]. 这意味着条纹序同时携带自旋和电荷调制, 可以预见其对材料的超导电性具有重要的影响. 目前多数的欠掺杂铜氧化物高温超导材料都普遍观测到稳定的电荷条纹序, 但在各类铜氧化物高温超导材料中自旋条纹序至少在静态长程有序的形式下未出现, 因此自旋条纹序是否以短程和涨落的形式存在还是一个有争议的话题. 铜氧化物高温超导材料中自旋条纹序涨落的实验证据主要集中在普遍观测到的“沙漏型”磁激发谱^[36]. 理论方面基于强关联标准模型 (Hubbard 模型或 t-J 模型), 平均场理论^[37,38]、密度重整化群理论^[39,40]、张量网络^[41]、量子蒙特卡罗方法^[42-45]都预言了自旋条纹序的存在, 然而这些工作都主要集中讨论自旋条纹序的起源以及演化过程, 而没有过多地重视自旋条纹序与超导电性之间的关系.

受上述一系列研究工作的启发, 本文利用大尺度无偏差的约束路径量子蒙特卡罗方法研究铜氧化物高温超导材料的两轨道哈伯德模型中自旋条纹和超导电性之间的关系, 以典型的 LSCO 和 HBCO 为例进行研究. 首先, 从不同类型的铜氧化物高温超导材料具有不同的超导转变温度的层面, 数值结果表明, Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道对超导电性具有重要影响. 其次, 从自旋条纹序和超导电性关系的层面, 分析了 LSCO 和 HBCO 两类铜氧化物高温超导材料中是否存在稳定的自旋条纹序, 在旋转对称性破缺的晶格中, 本文的数值结果显示, HBCO 高温超导材料中容易形成稳定且长程有序的自旋条纹序. 该结果表明在铜氧化物高温超导材料中自旋条纹序和超导电性之间存在协同关系.

2 模型和计算方法

2.1 理论模型

该工作进行数值模拟时使用的铜氧化物高温超导材料两轨道哈伯德模型包括动能部分 \hat{H}_t 和相互作用部分 \hat{H}_{int} , 在动量空间内系统的动能部分描述为

$$\hat{H}_t = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k^{xx} \hat{d}_{kx\sigma}^\dagger \hat{d}_{kx\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k^{zz} \hat{d}_{kz\sigma}^\dagger \hat{d}_{kz\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k^{xz} (\hat{d}_{kx\sigma}^\dagger \hat{d}_{kz\sigma} + \text{h.c.}) + e_z \sum_{k\sigma} \hat{d}_{kz\sigma}^\dagger \hat{d}_{kz\sigma}, \quad (1)$$

式中, $\hat{d}_{\alpha\sigma} (\hat{d}_{\alpha\sigma}^\dagger)$ 表示 $\alpha (\alpha = x, z)$ 轨道上自旋为 $\sigma =$

\uparrow, \downarrow 的湮灭 (产生) 算符, 这里的 x 指标代表 Cu 的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道, z 指标代表 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道; $e_z = E_z - E_x$ 表示由于晶体场劈裂导致 Cu 的 $d_{x^2-y^2}$ 和 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道之间形成的能级差; $\varepsilon^{\alpha,\beta} (\alpha, \beta = x, z)$ 表示轨道内和轨道间电子跳跃的动能, 在最远考虑到第三近邻电子跳跃强度的基础上, 电子的动能可以描述为

$$\begin{aligned} \varepsilon_k^{xx} &= -2t_x (\cos k_x + \cos k_y) \\ &\quad - 4t'_x \cos k_x \cos k_y \\ &\quad - 2t''_x (\cos 2k_x + \cos 2k_y), \\ \varepsilon_k^{zz} &= -2t_z (\cos k_x + \cos k_y) \\ &\quad - 4t'_z \cos k_x \cos k_y \\ &\quad - 2t''_z (\cos 2k_x + \cos 2k_y), \\ \varepsilon_k^{xz} &= 2t_{xz} (\cos k_x - \cos k_y) \\ &\quad + 2t''_{xz} (\cos 2k_x - \cos 2k_y). \end{aligned} \quad (2)$$

这里 $t_\alpha, t'_\alpha, t''_\alpha (\alpha = x, z)$ 分别代表 α 轨道内的最近邻、第二近邻以及第三近邻格点之间的电子跳跃强度; t_{xz} 和 t''_{xz} 代表轨道间最近邻和第二近邻格点之间的电子跳跃强度. 对于典型的 LSCO 和 HBCO 两类铜氧化物高温超导材料, 参考先前的工作^[46-49], 两类铜氧化物高温超导材料的能带结构最重要的不同在于轨道间的能级差. 因此数值模拟时针对此两类材料, 本文选择的电子跳跃强度参数相同, 通过不同的轨道间能量差来重点反映 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道的影响. 具体参数见表 1, 其中电子跳跃强度单位为 eV. 依据表 1 的参数, 图 1 分别给出了 LSCO 和 HBCO 铜氧化物高温超导材料的能带结构以及态密度. 可以清楚看到, 由于轨道能级差的不同, Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道对态密度的贡献完全不同. 对于 LSCO 高温超导材料, $d_{3z^2-r^2}$ 轨道靠近 $d_{x^2-y^2}$ 轨道; 而 HBCO 高温超导材料, $d_{3z^2-r^2}$ 轨道远离 $d_{x^2-y^2}$ 轨道.

为了抓住系统最基本的物理信息, 哈密顿量的相互作用部分只考虑了在位库仑排斥相互作用项, 该部分的哈密顿量 \hat{H}_{int} 描述如下:

$$\hat{H}_{int} = U \sum_{i\alpha} \hat{n}_{i\alpha\uparrow} \hat{n}_{i\alpha\downarrow}, \quad (3)$$

式中 α 表示 x, z 轨道, U 表示轨道内的在位库仑排斥相互作用强度, $\hat{n}_{i\alpha\sigma} = \hat{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger \hat{d}_{i\alpha\sigma}$ 代表位于 i 格点 α 轨道上的密度算符.

表 1 参考文献 [46,49] 选定的铜基两轨道哈伯德模型动能部分的电子跳跃参数

Table 1. Electronic hopping parameters in the kinetic-energy part of the two-orbital Hubbard model for cuprate superconductors are chosen according to Refs. [46,49].

跳跃参数	LSCO			HBCO		
	1st(t)	2nd(t')	3rd(t'')	1st(t)	2nd(t')	3rd(t'')
轨道内 t_x	0.471	-0.0923	0.0734	0.471	-0.0923	0.0734
轨道内 t_z	0.0682	0.0	0.0	0.0682	0.0	0.0
轨道间 t_{xz}	0.178	0.0	0.0258	0.178	0.0	0.0258
轨道间能级差 e_z		-0.91			-2.19	

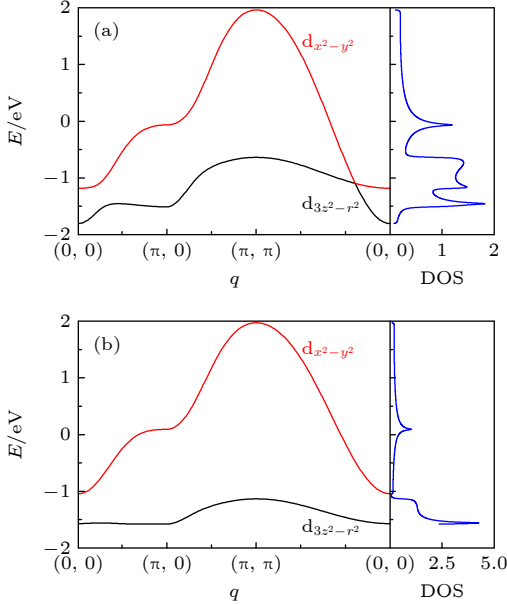


图 1 (a) LSCO 铜氧化物高温超导材料的能带和态密度图; (b) HBCO 铜氧化物高温超导材料的能带和态密度图
Fig. 1. (a) Band structure and density of states of the high- T_c cuprate superconductor LSCO; (b) band structure and density of states of the high- T_c cuprate superconductor HBCO.

2.2 计算物理量和方法简介

为了理解铜基二轨道哈伯德模型中的超导特性, 本文主要计算了 s 波和 d 波超导电子配对对称性的配对关联函数, 定义为

$$C(R = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j + \mathbf{R}} \langle \Delta^\dagger(\mathbf{r}_i) \Delta(\mathbf{r}_j) \rangle, \quad (4)$$

式中, $\Delta^\dagger(\mathbf{r}_i)$ ($\Delta(\mathbf{r}_i)$) 为电子配对产生 (湮灭) 算符, \mathbf{r}_i 和 \mathbf{r}_j 为位于格点 i 和 j 的位置矢量, N 为晶格包含的总晶胞数. 方程 (4) 中的电子配对产生算符定义为

$$\Delta^\dagger(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\delta\alpha\beta} f(\delta) \left(\hat{d}_{\mathbf{r}_i\alpha\uparrow}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{r}_i+\delta\beta\downarrow}^\dagger - \hat{d}_{\mathbf{r}_i\beta\downarrow}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{r}_i+\delta\alpha\uparrow}^\dagger \right), \quad (5)$$

同样地, 方程 (5) 中的 $\hat{d}_{i\alpha\sigma}^\dagger$ 表示产生一个位于格点 i , 在 $\alpha = x, z$ 轨道上自旋为 $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 的电子; $f(\delta)$ 是形状因子, 用于区别不同类型的配对方式. 对于 s 波超导电子配对对称性, $\delta = \pm x$ 时, $f(\pm) = 1$; $\delta = \pm y$ 时, $f(\pm) = 1$. 而对于 d 波超导电子配对对称性, $\delta = \pm x$ 时, $f(\pm) = 1$; $\delta = \pm y$ 时, $f(\pm) = -1$.

在考察超导电子配对关联函数的基础上, 为了更全面地证实超导电子配对对称性的实质变化行为, 还可以忽略哈密顿量中的非相互作用部分对关联函数的贡献 [50-52], 以有效配对关联函数, 进一步反映电子之间的相互作用对超导电子配对关联函数的影响. 这里, 有效配对关联函数的定义为

$$V_\alpha(R) = C(R) - \tilde{C}(R), \quad (6)$$

式中, $\tilde{C}_\alpha(R)$ 是非关联的单粒子贡献, 可以通过将 $\langle \hat{d}_{i\downarrow}^\dagger \hat{d}_{j\downarrow} \hat{d}_{k\uparrow}^\dagger \hat{d}_{l\uparrow} \rangle$ 解耦为 $\langle \hat{d}_{i\downarrow}^\dagger \hat{d}_{j\downarrow} \rangle \langle \hat{d}_{k\uparrow}^\dagger \hat{d}_{l\uparrow} \rangle$ 得到.

针对系统可能呈现出自旋条纹序的情况, 本文通过计算交错的自旋关联函数来表征自旋条纹序的变化情况, 其定义为

$$S^*(R = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = (-1)^{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j + \mathbf{R}} \langle \hat{S}_z(\mathbf{r}_i) \hat{S}_z(\mathbf{r}_j) \rangle, \quad (7)$$

式中, $\hat{S}_z(\mathbf{r}_i) = (\hat{n}_{ix\uparrow} - \hat{n}_{ix\downarrow})/2$ 表示格点 i 位置上 Cu 的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道上自旋 z 方向的分量.

为了求解上述物理量, 本文基于铜基二轨道哈伯德模型, 使用能够精确获得关联电子系统基态信息的大尺度无偏差的约束路径量子蒙特卡罗方法进行数值模拟. 该方法的核心思想是在约束的斯莱特行列式空间中通过多分支的随机游走投影一个试探波函数 $|\Psi_T\rangle$, 得到关联电子系统的基态波函数 $|\Psi_g\rangle$, 投影方程写为

$$|\Psi_g\rangle \propto \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\tau \hat{H}} |\Psi_T\rangle, \quad (8)$$

这里, \hat{H} 表示系统的哈密顿量, τ 是实数且大于 0.

数值模拟时该投影方程通过反复迭代的方式来实现, 即

$$|\Psi^{(n+1)}\rangle = e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\Psi^{(n)}\rangle. \quad (9)$$

首次迭代时 $|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi_T\rangle$, 对于很小的 $\Delta\tau$ 利用 Trotter-Suzuki (TS) 分解^[53,54], 忽略高阶近似的情况下, 方程 (9) 可近似写为

$$|\Psi^{(n+1)}\rangle \approx e^{-\Delta\tau\hat{H}_t/2}e^{-\Delta\tau\hat{H}_m}e^{-\Delta\tau\hat{H}_t/2}|\Psi^{(n)}\rangle, \quad (10)$$

式中, \hat{H}_t 是二次型费米算符, 故其指数形式的算符作用到迭代波函数上仅仅是将一个斯莱特行列式转换成另一个斯莱特行列式. 对于四次型费米算符 \hat{H}_{int} , 借助于离散 Hubbard-Stratonovich (HS) 变换^[55] 可将其转换成二次算符形式, 即

$$e^{-\Delta U\hat{n}_{i\alpha\uparrow}\hat{n}_{i\alpha\downarrow}} = \frac{1}{2} \times \sum_{x_{i\alpha}=\pm 1} e^{\gamma x_{i\alpha}(\hat{n}_{i\alpha\uparrow}-\hat{n}_{i\alpha\downarrow})} e^{-\Delta\tau U(\hat{n}_{i\alpha\uparrow}+\hat{n}_{i\alpha\downarrow})/2}, \quad (11)$$

对于方程 (11), 当 $U > 0$ 时方程中的 γ 满足关系式 $\cosh(\gamma) = \exp(\Delta\tau U/2)$.

在 TS 分解和 HS 变换的帮助下, 迭代方程 (9) 可以写为多维辅助场的求和, 相应的表达式为

$$|\Psi^{(n+1)}\rangle = \sum_x P(x)B(x)|\Psi^{(n)}\rangle, \quad (12)$$

式中, $P(x) = (1/2)^{2N}$ 是关于 x 的概率密度函数, $x = (x_{1,x/z}, x_{2,x/z}, \dots, x_{N,x/y})$ 是 HS 辅助场的集合; $B(x)$ 代表 HS 变化的辅助场传播因子, 由哈密顿量 \hat{H}_t 和 \hat{H}_{int} 的指数形式的乘积构成; N 是轨道的数目; 波函数 $|\Psi^{(n)}\rangle$ 通常写成斯莱特行列式的线性集合, 即 $|\Psi^{(n)}\rangle = \sum_{k=1}^{N_{\text{walkers}}} \chi_k^n |\phi_k^n\rangle$, $|\phi_k^n\rangle$ 称为随机游走者, χ_k^n 和 N_{walkers} 分别表示随机游走者的权重和随机游走者的总数.

对于辅助场量子蒙特卡罗方法而言, 该方法是对辅助场 x 的多维求和. 具体来说, 根据概率密度函数 $P(x)$, 对每个随机游走者 $|\phi_k^n\rangle$ 的辅助场 x 进行抽样以及对辅助场传播子 $B(x)$ 进行更新. 对所有的随机游走者进行求和可以得到基态波函数 $|\Psi_g\rangle$, 利用得到的波函数基于回传技术来计算物理量的期望值^[56], 即

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{BP}} = \frac{\langle \Psi_T | e^{-l_{\text{BP}}\Delta\tau\hat{H}} \mathcal{O} | \Psi_g \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-l_{\text{BP}}\Delta\tau\hat{H}} | \Psi_g \rangle}, \quad (13)$$

式中, l_{BP} 为回传步数, 先前的一系列研究表明, 数值计算时 $l_{\text{BP}} = 40$ 足以保证计算结果的准确性^[51,52,57].

对于达到平衡的系统, 物理量的测量通常需要进行上万次的测量, 然后进行统计平均, 本文对测量的物理量进行 $m = 20000$ 次测量. 对于 m 次的测量, 又将其均分成 $N_{\text{bin}} = 40$ 块, 分别对每一块求平均值 $\mathcal{O}_i (i = 1, 2, \dots, N_{\text{bin}})$, 即

$$\langle \mathcal{O} \rangle_i = (\langle \mathcal{O} \rangle^{n+1} + \langle \mathcal{O} \rangle^{n+2} + \dots + \langle \mathcal{O} \rangle^{n+N})/N. \quad (14)$$

本文计算时每个块内进行 500 次的测量, 最后对所有块内的平均值再平均, 就可以求得最终的期望值:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N_{\text{bin}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{bin}}} \langle \mathcal{O} \rangle_i. \quad (15)$$

每个块内的计算都是相互独立的, 以有效地降低系统的误差, 关于物理量 \mathcal{O} 的误差可以通过标准误差来进行评估, 即

$$\begin{aligned} \sigma(\langle \mathcal{O} \rangle) &\approx \frac{1}{\sqrt{N_{\text{bin}} - 1}} \sigma(\langle \mathcal{O} \rangle_i) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{bin}} - 1}} \sqrt{\frac{1}{N_{\text{bin}}} \sum_i \langle \mathcal{O} \rangle_i^2 - \langle \mathcal{O} \rangle^2}. \end{aligned} \quad (16)$$

通过以上描述看出, 初始波函数 $|\Psi_T\rangle$ 的选择在数值模拟过程中起着重要的作用. 而约束路径量子蒙特卡罗方法的优势在于, 无论是以自由电子波函数为初始波函数, 还是以其他类型的波函数为初始波函数, 得到的统计误差和结果一致^[58-61]. 该方法有此优势的原因在于, 约束路径量子蒙特卡罗方法在进行计算时为了避免负符号问题, 通过合理定义一个界面 N' 将抽样样本局限在一个特定的抽样空间, 始终要求试探波函数 $|\Psi_T\rangle$ 和抽样样本 $|\phi_i^n\rangle$ 有正的交叠积分 $\langle \Psi_T | \phi_i^n \rangle > 0$. 这就是所谓的约束路径近似, 也是约束路径量子蒙特卡罗方法的核心优势.

最后, 针对本文模拟的铜基二轨道哈伯德模型, 为了保证计算结果的快速收敛以及精确度, 使用约束路径量子蒙特卡罗方法进行数值模拟时选择电子闭壳层填充以及自由电子波函数为初始波函数, 模拟中的主要参数为随机游走数 9000, 投影步长 $\Delta\tau = 0.04$. 在测量物理量之前进行 2000 步的蒙卡抽样, 测量物理量时设置为 500 步的蒙卡抽样, 40 次独立测试确保统计的独立性.

3 计算结果与讨论

3.1 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道对超导电性的影响

本节以铜氧化物高温超导材料的正晶格模型

系统讨论 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道对超导电性的影响. 图 2 展示了数值模拟在 8×8 的正方晶格中, 当在位库仑相互作用强度 $U = 2.0$ 以及空穴掺杂浓度 $n = 0.156$ 时, 配对关联函数和有效配对关联函数在配对长程距离 $R \geq 3$ 情况下的函数演化曲线. 首先, 从图 2(a) 展示的配对关联函数出发可以有两点发现: 第一, d 波超导电子配对对称性的配对关联强度大于 s 波超导电子配对对称性的配对关联强度. 该结果表明, 基于铜基二轨道哈伯德模型铜氧化物高温超导材料中主导的超导电子配对对称性是 d 波超导电子配对对称性, 同时该结果也与先前采用单轨道 [11-14] 和三轨道哈伯德模型 [15-18] 得出的结论一致. 第二, 针对 LSCO 和 HBCO 两种典型的铜氧化物高温超导体, HBCO 高温超导材料的 d 波超导电子配对对称性的配对关联函数的强度在几

乎所有的长程距离上都大于 LSCO 高温超导材料的 d 波超导电子配对对称性的配对关联函数的强度, 该数值模拟结果直接说明了 HBCO 超导体的超导转变温度高于 LSCO 超导体的超导转变温度. 更为重要的是, 该结果表明 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道是影响铜氧化物高温超导体超导转变温度的关键因素. 其次, 为了能够充分证实上述结论, 还考察了有效配对关联函数的演化情况, 图 2(b) 展示了 s 波和 d 波超导电子配对对称性的有效配对关联函数随配对距离 R 的演化曲线. 可以观察到, 长程距离 $R \geq 3$ 上 d 波超导电子配对对称性的有效配对关联函数的强度大于 s 波超导电子配对对称性的强度, 以及 HBCO 体系中 d 波超导电子配对对称性的有效配对关联函数的强度在所有长程距离上都大于 LSCO 体系中 d 波超导电子配对对称性的有效配对关联函数的强度. 结合配对关联函数和有效配对关联函数, 此数值模拟结果从理论上说明了铜氧化物高温超导材料中主导的电子配对对称性为 d 波超导电子配对对称性, 以及 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道与 $d_{x^2-y^2}$ 轨道的能级差会影响不同类型的铜氧化物高温超导材料具有不同的超导转变温度.

为了保证数值模拟结果不受晶格尺寸效应的影响, 我们还在晶格大小为 16×16 的正方晶格中进行了数值模拟, 图 3(a) 和图 3(b) 展示了在位库仑相互作用强度 $U = 2.0$ 情况下, 配对关联函数和有效配对关联函数关于长程距离 R 的函数演化曲线, 这里选择的电子填充浓度 $\langle n \rangle = 0.148$. 从图 3 可以观察到, d 波超导电子配对对称性的配对关联函数以及有效配对关联函数的强度都大于 s 波超导电子配对对称性对应的配对关联函数和有效配对关联函数的强度. 与此同时, 针对 d 波超导电子配对对称性, 在更大的格子上从关联函数出发, 发现在长程距离上较难判断 HBCO 体系的超导电性是否优于 LSCO 体系的超导电性. 这明显说明哈密顿量中无相互作用部分对关联函数的影响大于相互作用部分对关联函数的影响. 鉴于关联函数在分析超导电子配对对称性方面的不足, 从图 3(b) 所示的有效配对关联函数的演化曲线可以看出, 几乎所有的长程距离上 HBCO 体系下的 d 波超导电子配对对称性的有效配对关联强度都处于领先地位. 该结果进一步证实了在铜氧化物高温超导体体系中 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道对于调控超导电性具有重要作用, 这为解释 HBCO 超导体的超导转变温度高于

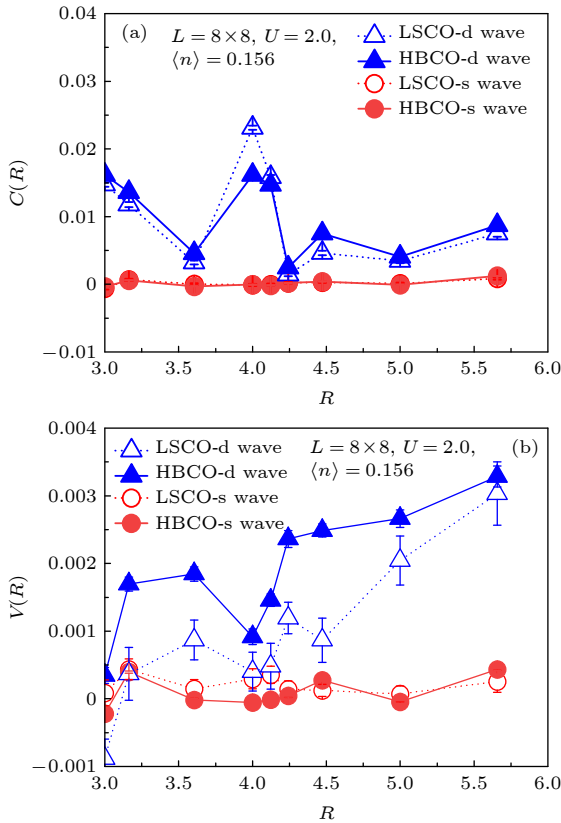


图 2 (a) 配对关联函数 $C(R)$ 关于配对距离 R 的函数曲线; (b) 有效配对关联函数 $V(R)$ 关于配对距离 R 的函数曲线. 数值模拟选择的参数为晶格大小 8×8 , 在位库仑相互作用强度 $U = 2.0$, 掺杂浓度 $n = 0.156$

Fig. 2. (a) Pairing correlation function $C(R)$ as a function of pairing distance R ; (b) effective pairing correlation function $V(R)$ as a function of pairing distance R . The simulations are performed on an 8×8 lattice with an on-site Coulomb interaction strength of $U = 2.0$ and doping concentration $n = 0.156$.

LSCO超导体的超导转变温度提供了合理的理论依据。

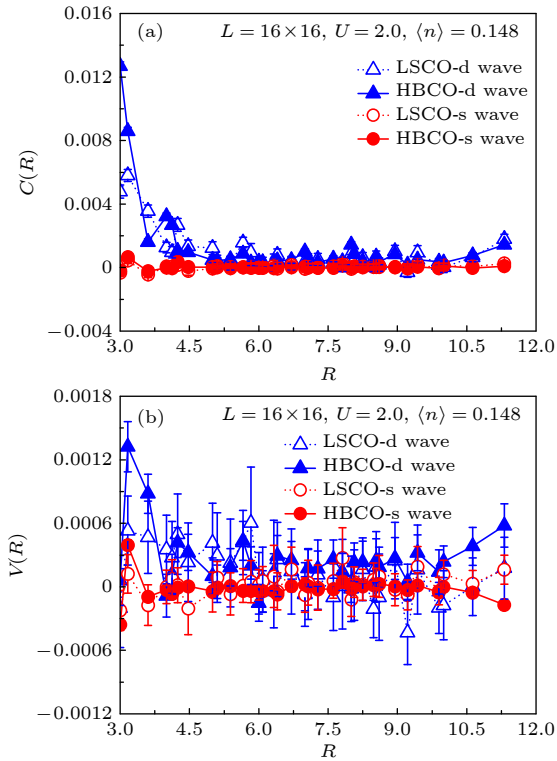


图 3 (a) 配对关联函数 $C(R)$ 关于配对距离 R 的函数曲线; (b) 有效配对关联函数 $V(R)$ 关于配对距离 R 的函数曲线. 数值模拟选择的参数为晶格大小为 16×16 , 在位库仑相互作用强度 $U = 2.0$, 掺杂浓度 $n = 0.148$

Fig. 3. (a) Pairing correlation function $C(R)$ as a function of pairing distance R ; (b) effective pairing correlation function $V(R)$ as a function of pairing distance R . The simulations are performed on an 16×16 lattice with an on-site Coulomb interaction strength of $U = 2.0$ and doping concentration $n = 0.148$.

3.2 自旋条纹序与超导电性的关系

除了讨论不同类型的铜氧化物高温超导材料的超导转变温度存在差异之外, 当前铜氧化物高温超导材料体系中一个重要的研究课题是澄清超导电性与其他物相之间的关系, 尤其是赝能隙态、电荷序、自旋序、配对密度波等物态与超导电性之间的关系^[62-68]. 其中自旋条纹序因与磁性和超导电子配对紧密联系而受到特别关注. 与电荷序在欠掺杂区域的普适性相比, 自旋条纹序的普适性尚不明确, 其存在形式随材料类型和掺杂水平的不同而显著变化^[69,70], 因而澄清自旋条纹序和超导电性之间的关系十分重要. 考虑到自旋条纹序会自发破缺晶格的旋转对称性, 形成沿单一方向的自旋密度周期

性调制, 其周期性结构通常与正方晶格的周期性结构不相容而产生自旋排布的各向异性. 因此, 数值模拟中若采用正方晶格, 将无法通过周期性边界条件准确反映自旋条纹序的各向异性. 为克服该限制, 数值模拟中采用矩形晶格来描述自旋条纹序的排布情况, 这样的晶体结构选择保证了在横向方向上能够容纳多个条纹周期, 从而能够真实地刻画电子自旋排布自发形成的自旋条纹结构, 同时也可分析其与超导电性之间的相互关系.

图 4 展示了在 16×4 的矩形晶格中空穴掺杂浓度 $\langle n \rangle = 0.156$ 的条件下通过计算交错自旋关联函数 $S^*(R)$ 得到的两类典型的铜氧化物高温超导材料体系 LSCO 和 HBCO 的自旋条纹序. 首先从图中标识的绿色虚线可以清楚看到自旋条纹畴壁的存在, 这表明空穴的引入导致局域反铁磁序的调制, 从而形成沿晶格方向周期性排列的条纹序. 其次, 对于 LSCO 体系, 自旋条纹序表现出相对较长的畴区, 这说明其容易形成局域有序的自旋条纹序; 对于 HBCO 体系, 自旋条纹序表现出周期性且具有多个畴壁, 畴间距相对较短, 这说明相同空穴掺杂浓度下 HBCO 的条纹序更为稳定, 且容易形成非局域长程有序的自旋条纹序.

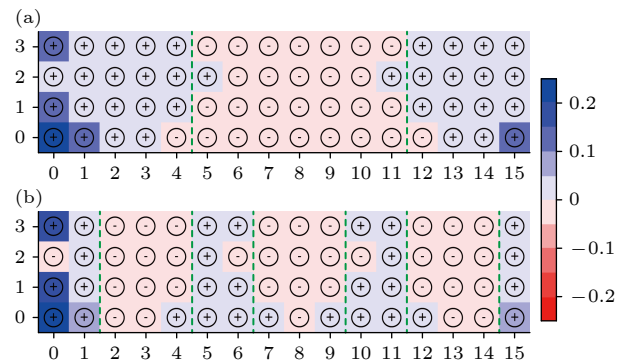


图 4 在 16×4 的矩形晶格中, 在位库仑相互作用 $U = 2.0$ 以及空穴掺杂浓度 $\langle n \rangle = 0.156$ 条件下, 通过数值模拟计算的交错自旋关联函数 $S^*(R)$ 描绘的不同体系的自旋条纹序 (a) LSCO 体系; (b) HBCO 体系. 图中的绿色虚线标示了自旋反相畴壁的大致位置, 所有的关联函数的数值都为非零值, 统计误差范围为 $5 \times 10^{-5} - 3 \times 10^{-4}$

Fig. 4. Spin stripe order on a 16×4 rectangular lattice at on-site Coulomb interaction $U = 2.0$ and hole doping $\langle n \rangle = 0.156$, characterized by the staggered spin correlation function $S^*(R)$: (a) LSCO; (b) HBCO. Green dashed lines indicate the approximate positions of antiphase spin domain walls. All correlations remain nonzero within statistical uncertainties, which are bounded in the range 5×10^{-5} to 3×10^{-4} .

为了进一步说明条纹序的稳定性问题, 我们还分析了自旋结构因子 $S(q)$ 在布里渊区内的演化趋势. 这里自旋结构因子 $S(q)$ 定义为

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{iq(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle \hat{S}_z(\mathbf{r}_i) \hat{S}_z(\mathbf{r}_j) \rangle.$$

图 5 展示了在 16×4 的矩形晶格中, 空穴掺杂浓度为 $\langle n \rangle = 0.156$ 情况下, LSCO 和 HBCO 两类体系的自旋结构因子在布里渊区高对称性线上的演化曲线. 对于 LSCO 体系, 自旋结构因子 $S(q)$ 在 (π, π) 位置呈现出明显的峰值, 这表明该体系呈现出有序的反铁磁态以及局域的自旋条纹序. 对于 HBCO 体系, 相比于 LSCO 体系最显著的变化是, 自旋结构因子 $S(q)$ 在 (π, π) 位置的强度显著降低, 但是在 $(\frac{3\pi}{4}, \pi)$ 和 $(\frac{5\pi}{4}, \pi)$ 处出现了非共度的微小峰值, 这两个峰值与早期实验上采用中子散射实验在空穴掺杂的 $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.125}\text{CuO}_4$ 和 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ 超导体中发现在 (π, π) 附近出现的低能非共度峰一致, 这是体系呈现出稳定自旋条纹序的直接证据 [71,72]. 结合交错自旋关联函数和自旋结构因子在不同体系中的变化情况, 可以说明相比于 LSCO 体系, HBCO 体系会形成更加长程且稳定的自旋条纹序.

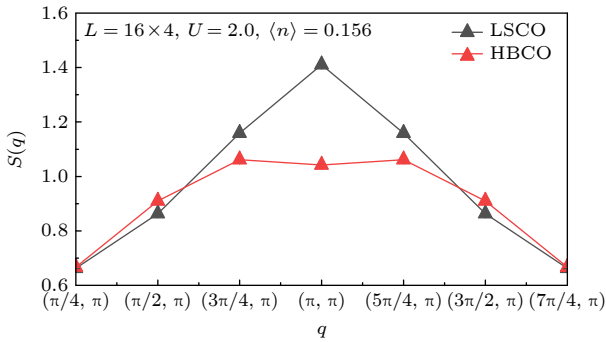


图 5 在 16×4 的矩形晶格中, 在位库仑相互作用 $U = 2.0$ 以及空穴掺杂浓度 $\langle n \rangle = 0.156$ 条件下, 自旋结构因子 $S(q)$ 在布里渊区内的演化曲线

Fig. 5. Evolution of the spin structure factor $S(q)$ within the Brillouin zone for a 16×4 rectangular lattice at onsite Coulomb interaction $U = 2.0$ and hole doping level $\langle n \rangle = 0.156$.

分析完两类典型的铜氧化物高温超导材料中自旋条纹序的稳定性问题, 接下来更为关心的是自旋条纹序的形成是否有利于超导电性. 图 6 所示为在 16×4 的晶格中同样选择在位库仑相互作用 $U = 2.0$, 空穴掺杂浓度 $n = 0.156$ 的情况下, 数值

模拟的超导配对关联函数和有效配对关联函数在长程距离 $R \geq 3$ 上的演化曲线. 对于 LSCO 和 HBCO 两个体系, 无论是从配对关联函数还是从有效配对关联函数出发, d 波超导电子配对对称性的强度都大于 s 波超导电子配对对称性的强度, 此结果再次说明铜基材料体系中主导的电子配对对称性为 d 波超导电子配对对称性. 此外, 针对 d 波超导电子配对对称性, HBCO 超导体内的 d 波超导电子配对对称性的关联函数和有效配对关联函数在大部分的长程距离上都明显强于 LSCO 超导体内的 d 波超导电子配对对称性. 这同样说明 HBCO 的超导电性优于 LSCO 的超导电性. 更为重要的是, 联系两类铜氧化物超导材料体系内自旋条纹序的稳定情况, 可以说明稳定且长程有序的自旋条纹序有利于提高体系的超导电性, 故自旋条纹序和超导电性之间存在协同关系.

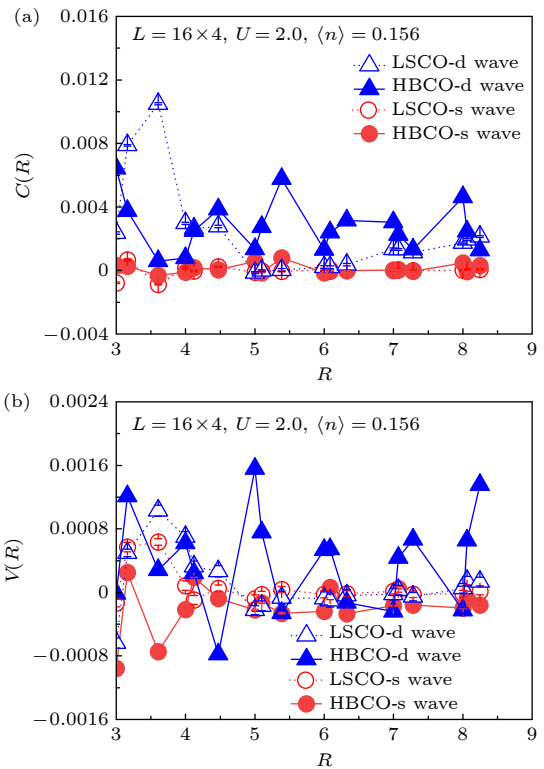


图 6 (a) 配对关联函数 $C(R)$ 关于配对距离 R 的函数曲线; (b) 有效配对关联函数 $V(R)$ 关于配对距离 R 的函数曲线. 数值模拟选择的参数为晶格大小为 16×4 , 在位库仑相互作用强度 $U = 2.0$, 掺杂浓度 $n = 0.156$

Fig. 6. (a) Pairing correlation function $C(R)$ as a function of pairing distance R ; (b) effective pairing correlation function $V(R)$ as a function of pairing distance R . The simulations are performed on an 16×4 lattice with an onsite Coulomb interaction strength of $U = 2.0$ and doping concentration $n = 0.156$.

4 结 论

本文采用无偏差的大尺度约束路径量子蒙特卡罗方法研究了两类典型的铜氧化物高温超导材料中的超导电性以及超导电性与自旋条纹序之间的关系. 首先, 基于二轨道哈伯德模型讨论了 LSCO 和 HBCO 超导材料的超导转变温度不同的原因. 从 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道对不同材料超导电性调控的角度出发, 数值模拟结果表明铜氧化物高温超导材料中主导的电子配对对称性为 d 波超导电子配对对称性; 另外从 d 波超导电子配对对称性的关联函数和有效配对关联函数的强度出发, 发现 HBCO 超导材料的超导电性优于 LSCO 超导材料的超导电性. 该结果说明了 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道在决定材料的超导转变温度方面具有重要作用.

其次, 在矩形晶格模型中数值模拟结果显示, HBCO 超导材料中能够形成更为稳定且长程有序的自旋条纹序, 联系两类体系中的 d 波超导电子配对对称性的关联函数和有效配对关联函数随长程距离的变化, 同样也发现 HBCO 超导材料的超导电性优于 LSCO 超导材料的超导电性. 该结果说明了稳定的自旋条纹序有利于提高材料的超导电性. 这一系列的结果不仅有助于理解铜氧化物高温超导材料具有不同超导转变温度的原因以及物相之间的关联, 还说明了 Cu 的 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道在调控铜基材料的超导电性以及自旋涨落方面扮演着重要的角色, 这为研究该类关联系统提供了新的研究思路和理论视角.

感谢湖北第二师范学院杨辉博士的积极讨论.

参考文献

- [1] Sigrist M, Ueda K 1991 *Rev. Mod. Phys.* **63** 239
- [2] Norman M R 2011 *Science* **332** 196
- [3] Scalapino D J 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 1383
- [4] Stewart G R 2017 *Adv. Phys.* **66** 75
- [5] Cooper L N 1956 *Phys. Rev.* **104** 1189
- [6] Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R 1957 *Phys. Rev.* **108** 1175
- [7] Tsuei C C, Kirtley J R 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 969
- [8] Damascelli A, Hussain Z, Shen Z X 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 473
- [9] Hu J P 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 017101 (in Chinese) [胡江平 2021 物理学报 **70** 017101]
- [10] Hu J 2016 *Sci. Bull.* **61** 561
- [11] Maier T, Jarrell M, Pruschke T, Keller J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 1524
- [12] Halboth C J, Metzner W 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 5162
- [13] Lichtenstein A I, Katsnelson M I 2000 *Phys. Rev. B* **62** R9283
- [14] Foley A, Verret S, Tremblay A M S, Sénéchal D 2019 *Phys. Rev. B* **99** 184510
- [15] Guerrero M, Gubernatis J E, Zhang S 1998 *Phys. Rev. B* **57** 11980
- [16] Kent P R C, Saha-Dasgupta T, Jepsen O, Andersen O K, Macridin A, Maier T A, Jarrell M, Schulthess T C 2008 *Phys. Rev. B* **78** 035132
- [17] Vitali E, Shi H, Chiciak A, Zhang S 2019 *Phys. Rev. B* **99** 165116
- [18] Cui Z H, Sun C, Ray U, Zheng B X, Sun Q, Chan G K L 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 043259
- [19] Jorgensen J D, Schüttler H B, Hinks D G, Capone II D W, Zhang K, Brodsky M B, Scalapino D J 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 1024
- [20] Tarascon J M, Greene L H, McKinnon W R, Hull G W, Geballe T H 1987 *Science* **235** 1373
- [21] Li Y, Balécent V, Barišić N, Cho Y, Fauqué B, Sidis Y, Yu G, Zhao X, Bourges P, Greven M 2008 *Nature* **455** 372
- [22] Aksenov V L, Balagurov A M, Sikolenko V V, Sinkin V G, Alyoshin V A, Antipov E V, Gippius A A, Mikhailova D A, Putilin S N, Bouree F 1997 *Phys. Rev. B* **55** 3966
- [23] Li W M, Zhao J F, Cao L P, Hu Z, Huang Q Z, Wang X C, Liu Y, Zhao G Q, Zhang J, Liu Q Q, Yu R Z, Long Y W, Wu H, Lin H J, Chen C T, Li Z, Gong Z Z, Guguchia Z, Kim J S, Stewart G R, Uemura Y J, Uchida S, Jin C Q 2019 *PNAS* **116** 12156
- [24] Fumagalli R, Nag A, Agrestini S, Garcia-Fernandez M, Walters A C, Betto D, Brookes N B, Braicovich L, Zhou K J, Ghiringhelli G, Moretti Sala M 2021 *Physica C* **581** 1353810
- [25] Sakakibara H, Suzuki K, Usui H, Miyao S, Maruyama I, Kusakabe K, Arita R, Aoki H, Kuroki K 2014 *Phys. Rev. B* **89** 224505
- [26] Kordyuk A A 2015 *Low Temp. Phys.* **41** 319
- [27] Valla T, Fedorov A V, Lee J, Davis J C, Gu G D 2006 *Science* **314** 1914
- [28] Gerber S, Jang H, Nojiri H, Matsuzawa S, Yasumura H, Bonn D A, Liang R, Hardy W N, Islam Z, Mehta A, Song S, Sikorski M, Stefanescu D, Feng Y, Kivelson S A, Devereaux T P, Shen Z X, Kao C C, Lee W S, Zhu D, Lee J S 2015 *Science* **350** 949
- [29] Comin R, Damascelli A 2016 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **7** 369
- [30] Parker C V, Aynajian P, da Silva Neto E H, Pushp A, Ono S, Wen J, Xu Z, Gu G, Yazdani A 2010 *Nature* **468** 677
- [31] He R H, Hashimoto M, Karapetyan H, Koralek J D, Hinton J P, Testaud J P, Nathan V, Yoshida Y, Yao H, Tanaka K, Meevasana W, Moore R G, Lu D H, Mo S K, Ishikado M, Eisaki H, Hussain Z, Devereaux T P, Kivelson S A, Orenstein J, Kapitulnik A, Shen Z X 2011 *Science* **331** 1579
- [32] Wang Z, Xu J, Li H, Fan S, Yang H, Wen H H 2025 *Phys. Rev. B* **112** 064502
- [33] Ando Y, Segawa K, Komiya S, Lavrov A N 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 137005
- [34] Daou R, Chang J, LeBoeuf D, Cyr-Choinière O, Laliberté F, Doiron-Leyraud N, Ramshaw B J, Liang R, Bonn D A, Hardy W N, Taillefer L 2010 *Nature* **463** 519
- [35] Hinkov V, Haug D, Fauqué B, Bourges P, Sidis Y, Ivanov A, Bernhard C, Lin C T, Keimer B 2008 *Science* **319** 597
- [36] Vojta M 2009 *Adv. Phys.* **58** 699

- [37] Poilblanc D, Rice T M 1989 *Phys. Rev. B* **39** 9749
- [38] Zaanen J, Gunnarsson O 1989 *Phys. Rev. B* **40** 7391
- [39] White S R, Scalapino D J 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 136403
- [40] Hager G, Wellein G, Jeckelmann E, Fehske H 2005 *Phys. Rev. B* **71** 075108
- [41] Corboz P, Rice T M, Troyer M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 046402
- [42] Chang C C, Zhang S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 116402
- [43] Zheng B X, Chung C M, Corboz P, Ehlers G, Qin M P, Noack R M, Shi H, White S R, Zhang S, Chan G K L 2017 *Science* **358** 1155
- [44] Huang E W, Mendl C B, Liu S, Johnston S, Jiang H C, Moritz B, Devereaux T P 2017 *Science* **358** 1161
- [45] Huang E W, Mendl C B, Jiang H C, Moritz B, Devereaux T P 2018 *npj Quantum Materials* **3** 22
- [46] Sakakibara H, Usui H, Kuroki K, Arita R, Aoki H 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 057003
- [47] Sakakibara H, Usui H, Kuroki K, Arita R, Aoki H 2012 *Phys. Rev. B* **85** 064501
- [48] Maier T, Berlijn T, Scalapino D J 2019 *Phys. Rev. B* **99** 224515
- [49] Jiang K, Wu X, Hu J, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 227002
- [50] Ying T, Wessel S 2018 *Phys. Rev. B* **97** 075127
- [51] Fang S C, Liu G K, Lin H Q, Huang Z B 2019 *Phys. Rev. B* **100** 115135
- [52] Fang S C, Zheng X J, Lin H Q, Huang Z B 2020 *J. Phys. Condens. Matter* **33** 025601
- [53] Trotter H F 1959 *Proceedings of the American Mathematical Society* **10** 545
- [54] Suzuki M 1976 *Commun. Math. Phys.* **51** 183
- [55] Hirsch J E 1983 *Phys. Rev. B* **28** 4059
- [56] Zhang S, Carlson J, Gubernatis J E 1997 *Phys. Rev. B* **55** 7464
- [57] Liu G, Kaushal N, Li S, Bishop C B, Wang Y, Johnston S, Alvarez G, Moreo A, Dagotto E 2016 *Phys. Rev. E* **93** 063313
- [58] Shi H, Zhang S 2013 *Phys. Rev. B* **88** 125132
- [59] Shi H, Jiménez-Hoyos C A, Rodríguez-Guzmán R, Scuseria G E, Zhang S 2014 *Phys. Rev. B* **89** 125129
- [60] Vitali E, Shi H, Qin M, Zhang S 2016 *Phys. Rev. B* **94** 085140
- [61] Fang S C, Liao X Y 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 120201 (in Chinese) [方世超, 廖心怡 2025 物理学报 **74** 120201]
- [62] Kondo T, Khasanov R, Takeuchi T, Schmalian J, Kaminski A 2009 *Nature* **457** 296
- [63] Chang J, Blackburn E, Holmes A T, Christensen N B, Larsen J, Mesot J, Liang R, Bonn D A, Hardy W N, Watenphul A, Zimmermann M, Forgan E M, Hayden S M 2012 *Nat. Phys.* **8** 871
- [64] Wang Y, Agterberg D F, Chubukov A 2015 *Phys. Rev. B* **91** 115103
- [65] Chan C 2016 *Phys. Rev. B* **93** 184514
- [66] Chakraborty D, Grandadam M, Hamidian M H, Davis J C S, Sidis Y, Pépin C 2019 *Phys. Rev. B* **100** 224511
- [67] Agterberg D F, Davis J S, Edkins S D, Fradkin E, Van Harlingen D J, Kivelson S A, Lee P A, Radzihovsky L, Tranquada J M, Wang Y 2020 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **11** 231
- [68] Imada M 2021 *J. Phys. Soc. Jpn.* **90** 111009
- [69] Tranquada J M, Sternlieb B J, Axe J D, Nakamura Y, Uchida S 1995 *Nature* **375** 561
- [70] Wu T, Mayaffre H, Krämer S, Horvatić M, Berthier C, Hardy W N, Liang R, Bonn D A, Julien M H 2011 *Nature* **477** 191
- [71] Tranquada J M, Woo H, Perring T G, Goka H, Gu G D, Xu G, Fujita M, Yamada K 2004 *Nature* **429** 534
- [72] Hayden S M, Mook H A, Dai P, Perring T G, Doğan F 2004 *Nature* **429** 531

Quantum Monte Carlo study of interplay between spin stripe order and superconductivity in copper based two-orbital Hubbard model*

FANG Shichao[†] ZHU Jiarui

(School of Mathematics and Physics, Nanyang Institute of Technology, Nanyang 473004, China)

(Received 8 October 2025; revised manuscript received 15 December 2025)

Abstract

To clarify the origin of the distinct superconducting transition temperatures in cuprate high-temperature superconductors and to elucidate the relationship between spin stripe order and superconductivity, we conduct large-scale, unbiased constrained-path quantum Monte Carlo simulations based on a two-orbital Hubbard model for copper oxides. We investigate the influences of the Cu $d_{3z^2-r^2}$ orbital on the superconducting properties and spin stripe order in two prototypical cuprates, LSCO and HBCO.

First, within the frame of square lattice models of sizes 8×8 and 16×16 , we examine the effect of the Cu $d_{3z^2-r^2}$ orbital on superconductivity, and simulate them by using the differences in orbital energy-level separations among different cuprate materials. The numerical results demonstrate that compared with LSCO, the HBCO exhibits that both the pairing correlation function and the effective pairing correlation function associated with d-wave superconducting symmetry are greatly enhanced. This result indicates that the higher superconducting transition temperature of HBCO than LSCO is closely related to the role of the Cu $d_{3z^2-r^2}$ orbital.

Second, as spin stripe order spontaneously breaks the rotational symmetry of the lattice and forms unidirectional, periodically modulated spin-density structures whose periodicity is generally incompatible with that of a square lattice, traditional periodic boundary conditions cannot accurately capture the intrinsic anisotropy of spin stripe order. To overcome this limitation, we use rectangular lattices in our numerical simulations to describe the spin stripe configurations. This approach allows for accommodating multiple stripe periods along the transverse direction, thereby faithfully capturing the spontaneously formed spin stripe structures in the electronic spin distribution and enabling the reliable analysis of their interplay with superconductivity. According to this approach, we investigate the formation of spin stripe order in LSCO and HBCO by using a 16×4 rectangular lattice. The numerical results show that the LSCO develops relatively long single-domain spin stripes, whereas the HBCO exhibits periodic spin stripe structures consisting of multiple domains. These findings indicate that the LSCO possesses locally ordered spin stripes, while the HBCO supports a nonlocal, long-range ordered spin stripe order. More importantly, the pairing correlation function and effective pairing correlation function related to d-wave superconductivity in HBCO maintain an obvious long-range enhancement, demonstrating that long-range ordered spin stripes are beneficial for enhancing superconductivity. This result reveals a cooperative interplay between spin stripe order and superconductivity.

Taken together, these results not only provide insight into the origin of the distinct superconducting transition temperatures in cuprate high-temperature superconductors and the correlations between different ordered phases, but also demonstrate that the Cu $d_{3z^2-r^2}$ orbital plays a crucial role in tuning superconductivity and spin fluctuations in cuprate materials. Our study thus offers a new theoretical perspective for exploring strongly correlated cuprate systems.

Keywords: d-wave superconducting state, spin stripe order, constrained-path quantum Monte Carlo method

DOI: [10.7498/aps.75.20251362](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251362)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251362](https://cstr.net/urn:nid:CN:32037.14.aps.75.20251362)

* Project supported by the Doctoral Research Start-up Fund Project of Nanyang Institute of Technology, China (Grant No. NGBJ-2022-43).

[†] Corresponding author. E-mail: shichaofang@nyist.edu.cn



铜基二轨道哈伯德模型中自旋条纹序与超导电性相互关系的量子蒙特卡罗研究

方世超 朱佳芮

Quantum Monte Carlo study of interplay between spin stripe order and superconductivity in copper based two-orbital Hubbard model

FANG Shichao ZHU Jiarui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 060712 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251362

CSTR: 32037.14.aps.75.20251362

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251362>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

扭角双层石墨烯中磁性和手性d + id超导态的量子蒙特卡罗研究

Quantum Monte Carlo study of magnetism and chiral $-i$ -wave superconductivity in twisted bilayer graphene

物理学报. 2025, 74(12): 120201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250305>

强关联电子体系的量子蒙特卡罗计算

Quantum Monte Carlo study of strongly correlated electrons

物理学报. 2022, 71(12): 127101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220079>

基于哈伯德模型的超冷原子量子模拟研究进展

Recent research progress of ultracold-atom quantum simulation of Fermi-Hubbard model

物理学报. 2025, 74(1): 017101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241595>

铜氧化物超导体电荷序的共振X射线散射研究进展

Research progress of resonant X-ray scattering of charge order in cuprate superconductors

物理学报. 2025, 74(8): 087402 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241402>

高温热辐射输运模拟的蒙特卡罗全局降方差方法

Global variance reduction method for Monte Carlo simulation of thermal radiation transport

物理学报. 2023, 72(13): 139501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230218>

镍基超导体中电荷序的实验研究进展

Experimental research progress of charge order of nickelate based superconductors

物理学报. 2024, 73(19): 197104 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240898>