

六角晶格中的次近邻  $d+id$  超导配对对称性\*

张 晓 马 驰 马天星†

(北京师范大学物理学系, 100875, 北京)

**摘要** 为了深入理解掺杂石墨烯中电子关联驱动的超导电性, 采用约束路径量子蒙特卡罗(MC)方法, 探讨了六角晶格上扩展哈伯德(Hubbard)模型中的磁和超导配对关联行为: 半填充时, 体系存在强的反铁磁关联, 且随库仑排斥势  $U$  的增大而增大, 随次近邻相互作用  $V$  的增大而减弱; 偏离半填充时, 低掺杂下相比其他对称性的超导配对, 次近邻  $d+id$  占据主导地位, 且其对较小的近邻相互作用  $V$  不敏感, 但较大的  $V$  会对次近邻  $d+id$  波超导配对产生明显的抑制作用. 这些结果可用于解释魔角双层石墨烯中的超导态.

**关键词** 石墨烯; 超导电性; 量子蒙特卡罗方法; 配对对称性

**中图分类号** O469

**DOI:** 10.12202/j.0476-0301.2022175

## 0 引言

石墨烯中的超导电性是物理学家研究的热点问题之一<sup>[1-3]</sup>. 该体系最值得关注的性质是其无质量狄拉克费米子能谱和二维六角晶格平面结构, 系统的电子关联效应可由定义在六角晶格上的 Hubbard 模型进行研究. 理论研究发现半填充的六角晶格 Hubbard 模型具有显著的反铁磁自旋涨落<sup>[4-5]</sup>. 受铜氧化物高温超导研究启发, 反铁磁涨落可能诱导非常规超导电性, 这引起了人们对石墨烯相关体系的超导电性的研究热情<sup>[6-12]</sup>. Uchoa 等<sup>[6]</sup>对平均场研究的结果预言了该体系可能存在  $s$  波超导相, 并把这种超导相归因于六角晶格的特殊结构; Serban 等<sup>[7]</sup>认为其更可能是手性  $p$  波超导体; 也有理论研究表明单层石墨烯中可能有最近邻配对的  $d+id$  波超导相<sup>[8]</sup>; Honerkamp<sup>[9]</sup>对弱耦合泛函重整化群研究发现, 考虑最近邻 (NN) 自旋相互作用  $J$  项, 远离半填充的掺杂可能出现  $d+id$  超导态, 这与三角形晶格上的超导态类似<sup>[13-14]</sup>; 有学者在唯象哈密顿量的平均场研究<sup>[10-11]</sup>时, 也预言了稳定的  $d+id$  超导态, 排斥 Hubbard 模型的变分蒙特卡罗模拟研究, 进一步支持了  $d+id$  超导态<sup>[12]</sup>; 行列式量子 MC 和约束路径 MC 方法的研究均表明, 由于低掺杂的单层石墨烯中极低的电子态密度, 电子关联可能不足以驱动非常规超导电性<sup>[19]</sup>.

石墨烯相关体系的化学势可以通过电场来调节,

进而改变载流子浓度, 形成电子型或空穴型材料, 有望成为碳基电子器件的候选<sup>[2, 15]</sup>. Cao 等<sup>[16]</sup>在制备的魔角双层石墨烯中发现了超导电性, 与非常规高温超导的相图高度相似, 这为研究高温超导现象提供了一种新的思路. 通过旋转层间角度, 双层石墨烯超晶格结构大小改变, 形成摩尔条纹, 在能谱中产生了准平带<sup>[1]</sup>, 突显了强电子关联效应, 进而可导致非常规超导电性的产生. 为解释魔角双层石墨烯中的非常规超导电性, Yuan 等<sup>[17]</sup>构造了双轨道 Hubbard 模型, 指出魔角双层石墨烯中超导配对可能是  $d+id$  超导配对对称性; Gu 等<sup>[18]</sup>从  $t$ - $J$ - $D$  模型出发, 研究了魔角双层石墨烯的强电子关联效应, 认为在  $t$ - $U$ - $V$  模型中, 当参数  $V$  的值与库仑相互作用值大小相当时, 基于单层六角晶格的  $t$ - $U$ - $V$  模型也可以描述魔角双层石墨烯的性质.

Ma 等<sup>[19]</sup>讨论了  $t$ - $U$ - $V$  中 NN 相互作用  $V$  对  $d+id$  超导配对的影响, 发现 NN 相互作用  $V$  (排斥或吸引) 对扩展  $s$  波配对关联的影响很小, 但强烈抑制了  $d+id$  超导配对关联; 他们还研究了重度掺杂单层石墨烯扩展  $s$  波和 NN 的  $d+id$  超导配对情况.

## 1 模型和方法

经过几十年的发展, 约束路径 MC 方法已经成为研究电子关联体系磁性和超导电性的重要工具<sup>[15, 20-21]</sup>.

\* 国家自然科学基金资助项目(11974049)

† 通信作者: 马天星(1977—), 男, 博士, 教授. 研究方向: 强关联电子系统. E-mail: txma@bnu.edu.cn

收稿日期: 2022-04-29

本文运用约束路径 MC 方法<sup>[22]</sup>来研究定义在六角晶格上的  $t-U-V$  模型. 约束路径 MC 算法是一种可以直接计算体系基态的算法, 包括 2 点: 1) 算法通过重要性抽样随机游走, 把 Slater 行列式空间中的任意初态映射到基态上; 2) 随机游走的路径不是任意的, 需要保证产生的 Slater 行列式与试探波函数的内积是正值. 这样就有效地避免了算法的“符号问题”, 它还结合了格林函数和辅助场 MC 这 2 种算法的主要优势, 不但运用了试探波函数进行重要性采样来提升计算效率, 而且更容易得到关联函数期望值, 进而得到物理量测值.

$t-U-V$  Hubbard 模型为

$$H = -t \sum_{ij\sigma} a_{i\sigma}^\dagger b_{i+\eta\sigma} + H.c. + U \sum_i (n_{ai\uparrow} n_{ai\downarrow} + n_{bi\uparrow} n_{bi\downarrow}) + V \sum_{ij} n_{ai} n_{bi+\eta} + \mu \sum_{i\sigma} (n_{ai\sigma} + n_{bi\sigma}), \quad (1)$$

式中:  $a_{i\sigma}$  ( $a_{i\sigma}^\dagger$ ) 是子晶格 A 中位置  $R_i$  处自旋为  $\sigma$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) 的电子湮灭 (产生) 算符;  $b_{i\sigma}$  ( $b_{i\sigma}^\dagger$ ) 是子晶格 B 中位置  $R_i$  处自旋为  $\sigma$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) 的电子湮灭 (产生) 算符;  $n_{ai\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ ,  $n_{bi\sigma} = b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}$ ;  $t$  是最近邻跳跃项, 这里将以  $t$  为单位;  $U$ 、 $V$  分别表示在位库仑排斥势和 NN 相互作用.

图 1 给出了六角晶格结构示意图, 其中蓝色和黄色圆圈分别代表 A 和 B 子晶格.

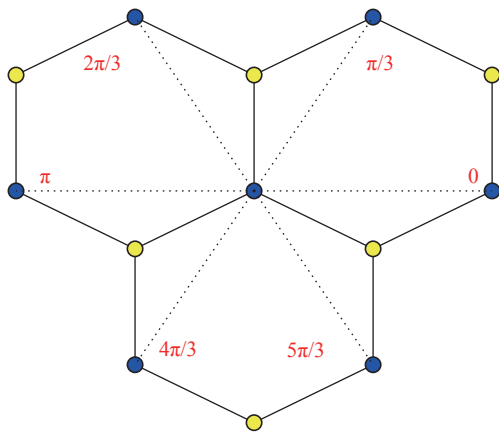


图 1 六角晶格中次近邻  $d+id$  配对对称性形式 (虚线)

对具有周期性边界条件  $L = 3, 4, 5, 6$  的晶格进行数值模拟, 总格点数为  $N_s = 2 \times 3L^2$ , 乘数 2 代表六角晶格中包含 2 个嵌套的三角子晶格; 乘数 3 则代表每个三角子晶格是由 3 个  $L \times L$  的正方晶格组成. 图 1 中通过虚线段标注了中心处格点的次近邻  $d+id$  配对

形式; 应用零温约束路径 MC 方法进行了数值模拟. 因为磁激发在电子关联系统的超导机制中起重要作用, 故先求六角晶格的磁关联, 即求自旋结构因子, 有

$$S^{zz} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle S_i^z S_j^z \rangle, \quad (2)$$

式中:  $i$  和  $j$  表示格点位置, 如果  $i$  和  $j$  属于同一种子晶格, 那么  $i, j = 1$ , 否则  $i, j = -1$ ;  $S_i^z = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ , 它是  $i$  处的自旋;  $N$  为总格点数. 为了探究六角晶格的超导配对机制, 需求配对关联

$$C_\alpha(\mathbf{r} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \langle \Delta_\alpha^\dagger(i) \Delta_\alpha(j) \rangle, \quad (3)$$

式中  $\alpha$  代表配对对称性. 我们计算了不同配对对称性的超导配对关联函数, 包括 NN  $d+id$  波对称性的  $d$ -wave 以及次近邻  $d+id$  波对称性的  $dn$ -wave. 相应的序参量为

$$\Delta_\alpha^\dagger(i) = \sum_l f_\alpha(\delta_l) (a_{i\uparrow} b_{i+\delta_l} - a_{i\downarrow} b_{i+\delta_l}^\dagger), \quad (4)$$

式中:  $f_\alpha(\delta_l)$  是配对函数的形成因子; 矢量  $\delta_l$  代表配对格点间连接强度. 主要区分  $d$ -wave 和  $dn$ -wave 配对对称性的形成因子, 分别为

NN  $d$  波配对  $d$ -wave:

$$f_{d+id}(\delta_l) = e^{i(l-1)\frac{2\pi}{3}}, \quad l = 1, 2, 3;$$

次近邻  $d$  波配对  $dn$ -wave:

$$f_{d+id}(\delta_l) = e^{i(l-1)\frac{\pi}{3}}, \quad l = 1, 2, \dots, 6. \quad (5)$$

由此可知次近邻  $d+id$  波配对具有 6 重对称性.

## 2 结果与讨论

图 2-a、b、c 分别给出了电子浓度为半满即  $\langle n \rangle = 1$  时, 不同 NN 相互作用强度  $V$  下, 不同尺寸  $L$  晶格中自旋结构因子  $S^{zz}$  随在位相互作用  $U$  的变化.  $S^{zz} > 0$  表示体系呈现反铁磁关联; 同一尺寸相同  $V$  的情况下,  $S^{zz}$  随着  $U$  的增大而增大, 这说明六角晶格中的反铁磁关联随着  $U$  的增大得到了加强;  $U$  的大小相同时,  $V$  的增大会使  $S^{zz}$  减小, 因此反铁磁关联受到了抑制. 图 2-d 展示了相同的  $U$  时, 不同尺寸  $L$  下  $S^{zz}$  随  $V$  的变化关系. 显然,  $S^{zz}$  随着  $V$  的增加不断减小, 进一步说明了次近邻相互作用对反铁磁关联的抑制作用. 由此, 在位相互作用  $U$  会增强晶格中的反铁磁关联, 但最近邻相互作用则会减弱晶格中的反铁磁关联. 在铜氧化物高温超导体中, 强的在位库仑排斥势会引起反铁磁自旋涨落诱导的超导电性, 在六角晶格中也可能存在同样机制引起的电子强关联驱动的超导电性.

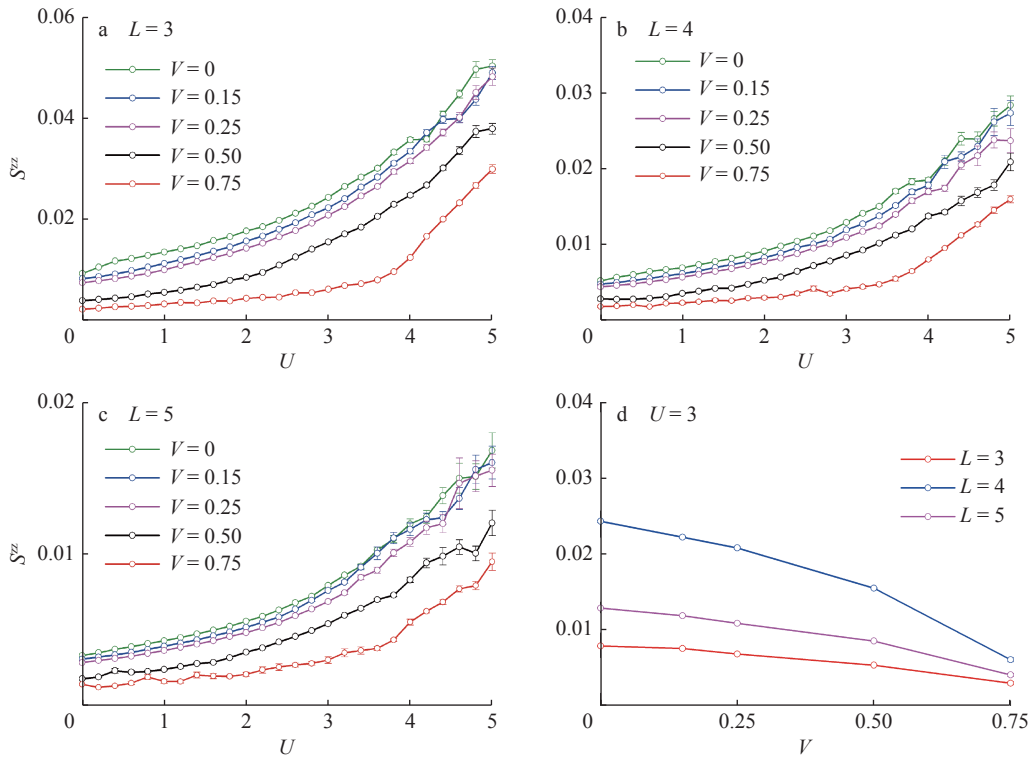


图 2 不同  $L$  时  $S^z$  随  $U$  的变化 (a、b、c) 及相同  $U$  时不同  $L$  下  $S^z$  随  $V$  的变化 (d) 关系

我们探究了在低掺杂情况下 NN 相互作用对配对关联的影响。图 3-a 展示了在  $L=5$  晶格中，在位相互作用  $U=3.0$ ，电子浓度  $\langle n \rangle = 0.973$ ，不同 NN 相互作用  $V$  的情况下，各种配对对称性的配对关联函数长程部分的对比。在不同的  $V$  下，对于所有长程距离的电子配对而言，次近邻  $C_{dn-wave}$  都要明显大于其他配对。这表明在低掺杂下，次近邻  $dn-wave$  配对关联函数要占据绝对的优势。为了说明  $V$  对配对关联的影响，研究考察了不同最近邻相互作用  $V=0, 0.25, 0.5$ ，在  $L=5$ ， $U=3.0, \langle n \rangle = 0.973$  情况下次近邻  $d+id$  配对关联强度，如图 3-b 所示。在 NN 相互作用  $V$  增强的情况下：当  $V$  比较小 ( $V=0.25$ ) 时， $C_{dn-wave}$  几乎不会发生变化；而当  $V$  较大 ( $V=0.5$ ) 时， $C_{dn-wave}$  明显变小。因此，较大的 NN 相互作用会对超导配对产生明显的抑制作用。

如图 4 所示，在  $U=3$  和 NN 相互作用  $V=0.5$  的情况下计算了  $L=5$ ，晶格电子浓度  $\langle n \rangle = 0.893$  时不同配

对称性的配对关联函数的长程部分，并且与电子浓度  $\langle n \rangle = 0.973$  下次近邻  $d+id$  超导配对关联函数作对比，如图 4 中虚线所示。 $\langle n \rangle = 0.893$  和  $0.973$  是接近半满且满壳层情况下的电子浓度，这些电子浓度下，约束路径 MC 可以得到精确的结果。对  $\langle n \rangle = 0.893$  和  $0.973$ ，具有次近邻  $d+id$  对称性的超导配对关联函数都强于其他超导配对对称性，这说明低掺杂区域具有次近邻  $d+id$  对称性的超导配对模式是稳固的。

为了分析晶格尺寸对超导配对关联函数的影响，进一步计算了  $L=6$  晶格中电子浓度  $\langle n \rangle = 0.926$  时，不同配对对称性的配对关联函数的长程部分，如图 5 所示。

同时还给出了电子浓度  $\langle n \rangle = 0.981$  下，次近邻  $d+id$  超导配对关联函数，如图 5 中虚线所示。在这 2 种情况下，次近邻  $d+id$  超导配对对称性也占据主导地位，这进一步确认了次近邻  $d+id$  超导配对对称性在低掺杂的六角晶格  $t-U-V$  模型的鲁棒性。

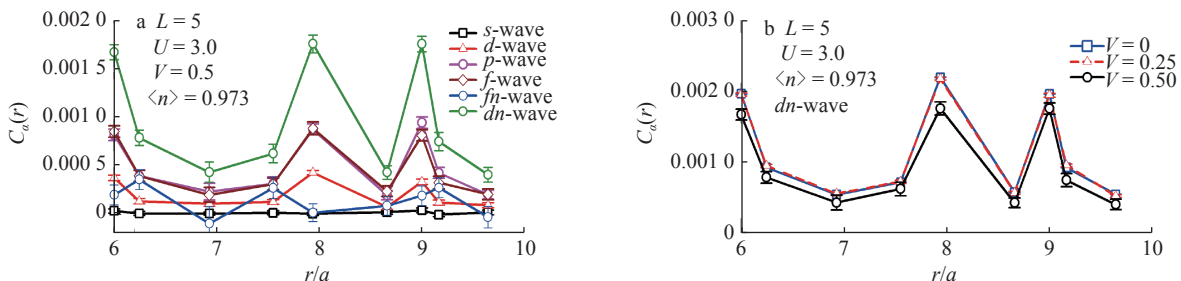


图 3 不同配对对称性与  $V$  下次近邻  $d$  波配对的关联函数随距离的变化关系

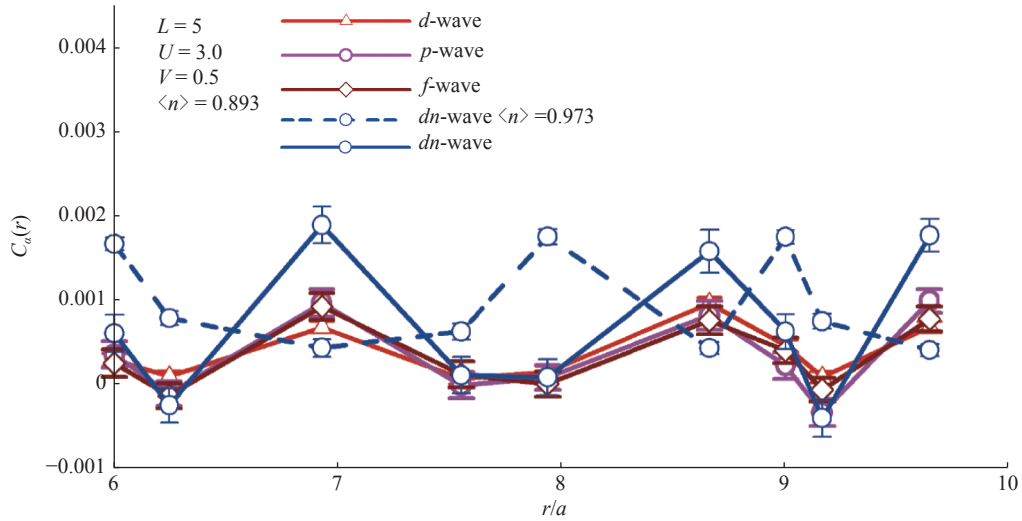


图 4 不同电子密度配对对称性的配对关联函数  $C$  随距离的变化关系对比

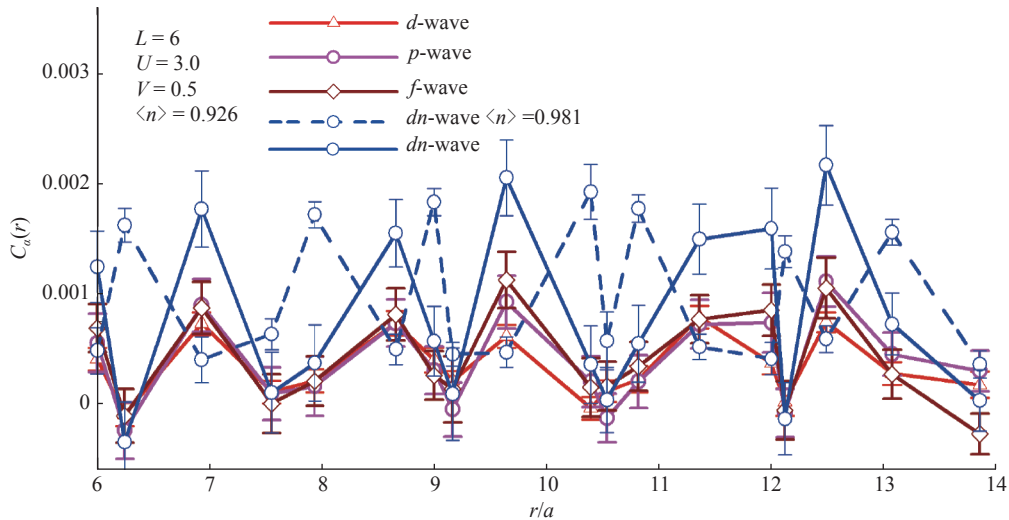


图 5 不同电子密度配对对称性的配对关联函数  $C$  随距离的变化关系对比 (更大晶格尺寸上)

### 3 结语

利用约束路径 MC 方法,研究了六角晶格上  $t-U-V$  扩展 Hubbard 模型中的反铁磁关联和超导配对关联. 计算结果表明:半满时反铁磁关联随着在位库仑相互作用  $U$  的增大显著增大,随着最近邻相互作用  $V$  的增大而减小. 进一步研究了低掺杂时的超导配对关联函数,相比其他超导配对对称性,次近邻  $d+id$  超导配对对称性占据主导地位,配对关联函数的数值随着最近邻相互作用  $V$  项的增大而减小. 这些研究有助于深入理解魔角双层石墨烯中的磁性和超导配对对称性.

### 4 参考文献

[1] NETO A H C, GUINE F, PERES N M R, et al. The electronic properties of graphene[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2009, 81(1):109

[2] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Two-dimensional gas of massless Dirac Fermions in graphene[J]. *Nature*, 2005, 438:197

[3] RAGHU S, QI X L, HONERKAMP C, et al. Topological Mott insulators[J]. *Physical Review Letters*, 2008, 100(15):6401

[4] PERES N M R, ARAUJO M A N, BOZI D. Phase diagram and magnetic collective excitations of the Hubbard model for graphene sheets and layers[J]. *Physical Review B*, 2004, 70(19):5122

[5] PAIVA T, SCALETTAR R T, ZHENG W, et al. Ground-state and finite-temperature signatures of quantum phase transitions in the half-filled Hubbard model on a honeycomb lattice[J]. *Physical Review B*, 2005, 72(8):5123

[6] UCHOA B, NETO A H C. Superconducting states of pure and doped graphene[J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98(4):6801

[7] SERBAN I, BERI B, AKHMEROV A R, et al. Domain wall

- in a chiral  $p$ -wave superconductor: a pathway for electrical current[J]. Physical Review Letters, 2010, 104(14): 7001
- [8] BLACK-SCHAFFER A M, HUR K L. Topological superconductivity in two dimensions with mixed chirality[J]. Physical Review B, 2015, 92(14): 503
- [9] HONERKAMP C. Density waves and cooper pairing on the honeycomb lattice[J]. Physical Review Letters, 2008, 100(14):6404
- [10] BLACK-SCHAFFER A M, DONIACH S. Resonating valence bonds and mean-field  $d$ -wave superconductivity in graphite[J]. Physical Review B, 2007, 75(13):4512
- [11] BASKARAN G. Resonating-valence-bond contribution to superconductivity in  $\text{MgB}_2$ [J]. Physical Review B, 2002, 65(21):2505
- [12] PATHAK S, SHENOY V B, BASKARAN G. Possible high-temperature superconducting state with a  $d+id$  pairing symmetry in doped graphene[J]. Physical Review B, 2010, 81(8): 5431
- [13] KUMAR B, SHASTRY B S. Superconductivity in  $\text{CoO}_2$  layers and the resonating valence bond mean-field theory of the triangular lattice  $t$ - $J$  model[J]. Physical Review B, 2003, 68(10): 4508
- [14] WANG Q H, LEE D H, LEE P A. Doped  $t$ - $J$  model on a triangular lattice: possible application to  $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{Na}_{1-x}\text{TiO}_2$ [J]. Physical Review B, 2004, 69(9): 2504
- [15] MA T X, HU F M, HUANG Z B, et al. Controllability of ferromagnetism in graphene[J]. Applied Physics Letters, 2010, 97(11):2504
- [16] CAO Y, FATEMI V, FANG S A, et al. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices[J]. Nature, 2018, 556:43
- [17] YUAN N F Q, FU L. Model for the metal-insulator transition in graphene superlattices and beyond[J]. Physical Review B, 2018, 98(4):5103
- [18] GU X Y, CHEN C, LEAW J N, et al. Antiferromagnetism and chiral  $d$ -wave superconductivity from an effective  $t$ - $J$ - $D$  model for twisted bilayer graphene[J]. Physical Review B, 2020, 101(18): 0506
- [19] MA T X, HUANG Z B, HU F M, et al. Pairing in graphene: a quantum Monte Carlo study[J]. Physical Review B, 2011, 84(12): 1410
- [20] HIRSCH J E. Two-dimensional Hubbard model: numerical simulation study[J]. Physical Review B, 1985, 31(7): 4403
- [21] MA T X, LIN H Q, GUBERNATIS J E. Triplet  $p+ip$  pairing correlations in the doped Kane-Mele-Hubbard model: a quantum Monte Carlo study[J]. Europhysics Letters, 2015, 111(4): 7003
- [22] ZHANG S W, CARLSON J, GUBERNATIS J. Constrained path quantum Monte Carlo method for fermion ground states[J]. Physical Review Letters, 1995, 74(18): 3652

## Superconducting pairing symmetry in doped honeycomb lattice

ZHANG Xiao MA Chi MA Tianxing

( Department of Physics, Beijing Normal University, 100875, Beijing, China)

**Abstract** To explore electron correlation-driven superconductivity in doped graphene, we use constrained path quantum Monte Carlo method to study magnetic correlation and superconducting pairing correlation in  $t$ - $U$ - $V$  Hubbard model on a honeycomb lattice. At half-filling this system shows strong antiferromagnetic correlation. Antiferromagnetic correlation increases with Coulomb interaction  $U$ , but is suppressed with the nearest neighbor interaction  $V$ . Away from half-filling, next-nearest-neighbor  $d+id$  pairing symmetry dominates at low doping compared to other pairing symmetries, and is insensitive to small nearest-neighbor interaction  $V$ . A larger  $V$  will, however, significantly suppress next-nearest-neighbor  $d+id$  superconducting pairing correlation. These results may lead to further understanding of superconductivity states in twisted bilayer graphene.

**Keywords** graphene; superconductivity; QMC; pairing symmetry

【责任编辑: 陆有忠】