

Effect of Diagonal Hopping and Nearest-Neighbor Coulomb Interaction in Square Hubbard Clusters

Yongzheng Wu¹, Cong Mei¹, Yun Gao², Zhongbing Huang^{1*}

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

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

Email: huangzb@hubu.edu.cn

Received: May 3rd, 2015; accepted: May 22nd, 2015; published: May 26th, 2015

Copyright © 2015 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

In the high- T_c cuprates, the nanoscale electronic state is important for understanding their complex physical properties and unconventional superconducting mechanism. In this work, numerical exact diagonalization method has been used to study the effect of diagonal hopping t' and nearest-neighbor Coulomb interaction V on the electron pair binding energy, spin and charge gaps and corresponding crossover temperatures in the square Hubbard clusters. The calculated results show that t' extends the regime of U in which electron, spin and charge pairings are formed, and corresponding crossover temperature increased. On the contrary, V exhibits opposite effects compared to t' . When V approaches to the energy scale of effective attraction induced by U , electron pairing is completely destroyed. Our findings demonstrate that t' can help the formation of superconducting state, while V will suppress the superconductivity.

Keywords

High- T_c Cuprates, Square Hubbard Cluster, Electron Pairing, Spin and Charge Pairing

四方哈伯德团簇中对角跃迁和近邻库仑相互作用的物理影响

吴永政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](mailto:huangzb@hubu.edu.cn)

收稿日期: 2015年5月3日; 录用日期: 2015年5月22日; 发布日期: 2015年5月26日

摘要

铜氧化物高温超导体中纳米尺度的电子态对理解这类材料的复杂物理特性和非常规超导机理具有重要的意义。本文采用数值精确对角化方法研究了纳米尺度四方哈伯德团簇中对角跃迁 t' 和近邻库仑相互作用 V 对电子对束缚能、自旋和电荷能隙及其对应跨越温度的物理影响。研究结果表明对角跃迁 t' 有效地扩展了电子配对、自旋和电荷配对的哈伯德 U 参数区间, 升高了它们对应的跨越温度; 与此相反, 近邻库仑相互作用 V 显著地缩小了电子配对、自旋和电荷配对的哈伯德 U 参数区间, 并降低了它们对应的跨越温度。当 V 与哈伯德 U 产生的有效电子吸引相互作用能量尺度相当时, 在整个 U 值区间不能形成稳定的电子配对态。我们的研究结果说明 t' 有利于形成电子配对的超导态, 而 V 将抑制超导态的形成。

关键词

铜氧化物高温超导体, 四方哈伯德团簇, 电子配对, 自旋和电荷配对

1. 引言

铜氧化物高温超导体属于典型的低维(二维)强关联电子系统, 对其正常态性质和非常规超导机理的理解是当今凝聚态物理领域的一个难题。人们普遍认为该类材料的物理行为可以根据掺杂的莫特(Mott)绝缘体来加以描述。随着掺杂载流子性质(空穴或者电子)和浓度的变化, 铜氧化物高温超导体中存在电荷和自旋自由度的相互竞争、多种不同的长程和短程自旋关联、电荷有序、以及 d 波超导电性等复杂的相图。近年来, 中子散射、角分辨光电子谱、扫描隧道显微镜等大量的实验研究发现铜氧化物高温超导体呈现出纳米尺度的非均匀特性[1], 包括条纹电荷序[2]、棋盘电荷序[3]、非公度电荷序[4]等。这些实验结果表明澄清纳米尺度的电子态对于理解铜氧化物高温超导体的物理特性具有重要的意义。由于四方哈伯德团簇(图1实线围成的正方形)是构成 CuO_2 平面(由图1所示点线连接而成)的基本结构单元, 因而研究其自旋和电荷关联特征有助于理解铜氧化物高温超导体在纳米尺度的电子态[5]。

A.N. Kocharian 等人在考虑图1所示近邻电子跃迁 t 和在位哈伯德 U 的情况下, 研究了四方哈伯德团簇的自旋-电荷分离、相分离、电子配对涨落、以及能隙等物理特性[6]-[11]。研究结果表明当平均电子数 $\langle N \rangle = 3$ 且 U 小于临界值 $U_c = 4.584 t$ 时, 电子趋于形成配对状态, 并导致出现 $\langle N \rangle = 2$ 和 $\langle N \rangle = 4$ 的相分离状态; 而当 U 大于 U_c 时, 体系趋于形成自旋-电荷分离的莫特-哈伯德绝缘态。他们的研究结果不仅证实关联电子系统在纳米尺度上表现出复杂的物理行为, 而且成功地解释了铜氧化物高温超导体中观测到的重要实验现象。

在铜氧化物高温超导体中, 次近邻格点间电子跃迁 t' (或者称为对角跃迁, 如图1所示)对其磁性和 d 波超导特性具有重要的影响。我们前期关于二维哈伯德模型的量子蒙特卡罗模拟结果发现 t' 抑制了反铁磁自旋涨落[12]。此外, 大量的理论研究结果表明近邻库仑相互作用 V 对多电子体系的电荷和自旋关联、以及电子配对态等同样具有重要的影响。例如, Onari 等人对二维扩展哈伯德模型的研究发现 V 将引起电荷涨落的增强, 从而使得电子配对的对称性发生改变, 而且在 $V = U/4$ 时甚至导致电荷密度波的出现[13]。

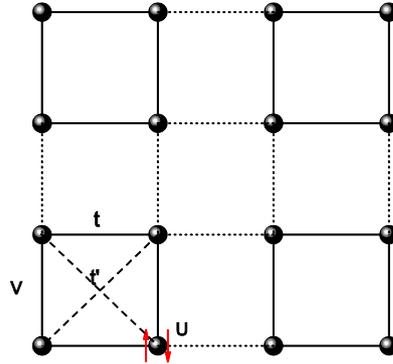


Figure 1. Square Hubbard clusters and the connected CuO_2 plane
图 1. 四方哈伯德团簇及其连接而成的 CuO_2 平面

为了进一步理解铜氧化物高温超导体在纳米尺度上的物理特性，本文采用数值精确对角化方法系统地研究了四方哈伯德团簇中 t' 和 V 对电子对束缚能、自旋和电荷能隙、及其对应跨越温度的物理影响。

2. 模型和物理量

我们研究的四方哈伯德团簇如图 1 中实线围成的正方形所示，其哈密顿量表达为：

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \quad (1)$$

这里 $\langle i,j \rangle$ 和 $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ 分别代表近邻和次近邻的一对格点 i 与 j ，并约定每对只求和一次，也即描述从格点 j 向格点 i 的跃迁， i 向 j 的跃迁用它的厄米共轭 $h.c.$ 表示。 t 和 t' 分别表示近邻和次近邻跃迁积分， $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ 表示自旋为 σ 电子密度算符， U 和 V 分别表示在位哈伯德与近邻库仑相互作用强度。本文中我们取近邻跃迁积分 t 作为能量单位。

在铜氧化物高温超导体中，自旋和电荷之间的相互竞争、多种竞争序、以及超导状态出现在靠近电子半填充的低掺杂区域，因而我们将集中分析当平均电子数 $\langle N \rangle = 3$ (对应于在 $\langle N \rangle = 4$ 的半填充系统中加入一个空穴) 时四方哈伯德团簇的物理特性。为了考察加入的空穴是否形成配对状态，我们定义如下的电子对束缚能：

$$\Delta^3 = E(2,T) + E(4,T) - 2E(3,T) \quad (2)$$

式中 $E(N,T)$ 表示平均电子数为 N 温度为 T 时系统的总能量。当电子对束缚能 $\Delta^3 < 0$ 时，加入的空穴易于形成配对状态，同时平均电子数 $\langle N \rangle = 3$ 的体系趋于相分离为 $\langle N \rangle = 4$ (半填充) 和 $\langle N \rangle = 2$ (加入两个空穴) 的非均匀分布状态，相应于图 1 中不同的四方团簇具有不同的电子数。

定义有限温度下的化学势如下[6]：

$$\mu_+(T) = E(M+1, M'; T) - E(M, M'; T) \quad (3)$$

$$\mu_-(T) = E(M, M'; T) - E(M-1, M'; T) \quad (4)$$

式中 $E(M, M'; T)$ 表示上下电子分别为 M 和 M' 时的系统总能量， $\mu_+(T)$ 和 $\mu_-(T)$ 代表体系电子数为 $N = M + M'$ 时，增加或者减少一个电子所需要的最低能量。对于我们研究的情况， $M = 1$ ， $M' = 2$ ， $N = 3$ 。注意公式(1)采用的是巨正则系综、而公式(3)和(4)采用的是正则系综。根据上述两个化学势，电荷能隙可以表示为[6]：

$$\Delta^c = \mu_+(T) - \mu_-(T) \quad (5)$$

与电荷能隙相类似，在一定温度下，我们定义自旋能隙为两种不同自旋位形的能量差[6]：

$$\Delta^s = E(N, S', T) - E(N, S, T) \quad (6)$$

这里， $N = 3$ ， S 和 S' 分别对应于体系处于最低能量状态和第一激发态的总自旋值。

3. 计算结果和讨论分析

我们首先考察对角跃迁 t' 和近邻库仑相互作用 V 对电子配对的影响。由图 2(a) 可以看出 Δ^3 为负值对应的最大 U_c 随着 t' 的增加逐渐向右移动，导致电子配对的 U 值区间不断扩大，而且当 $U > 1.5$ 时， Δ^3 随着 t' 的增加逐渐降低。由图 2(b) 可以看出 Δ^3 为负值对应的最小 U_o 和最大 U_c 随着 V 的增加分别向右和向左移动，导致电子配对的 U 值区间缩小，而且在整个 U 值区间， Δ^3 随着 V 的增加逐渐升高。我们还发现当 $V > 0.05$ 时，在整个 U 值区间 Δ^3 皆为正值。图 2(a) 和图 2(b) 表明 t' 有利于电子形成配对态，而 V 将显著抑制电子形成配对态。图 2(c) 和图 2(d) 分别表示 $t' = 0.2$ 和 $V = 0.04$ 时，温度对电子对束缚能的影响，从中可以看到，当 $U < 4.0$ 时，电子对束缚能随着温度的升高而增加，表明电子配对受到热涨落的削弱。

图 3 表示温度 $T = 0.001$ 、对角跃迁 t' 取不同值时，自旋和电荷能隙随 U 的变化关系，其中 U_c 代表电荷能隙由负变正对应的临界哈伯德相互作用强度。在 $0 < U < U_c$ 区间，负的电荷能隙意味着电子形成配对状态，正的自旋能隙意味着配对电子处于总自旋为 0 的自旋单重态。当 $U < U_c$ 时，我们发现自旋能隙与电荷能隙的绝对值相等，即 $\Delta^s = |\Delta^c|$ 。该行为与 U 取负值(相互吸引哈伯德模型)时的结果类似，表明电子间形成相干配对，从而容易产生超导状态。而当 $U > U_c$ 时，四方哈伯德团簇处于 $S = 1/2$ 的未饱和和铁磁态，正的 Δ^s 和 Δ^c 表示在 $S = 1/2$ 和 $S = 3/2$ 态之间存在自旋能隙，且单粒子激发需要提供有限能量，因而该区域可以称为自旋液体态。由图 3 可以发现，从 $t' = 0.0$ 增加到 $t' = 0.2$ 的过程中， U_c 随着 t' 的增大而增大，表明 t' 扩展了电子配对的 U 值区间。

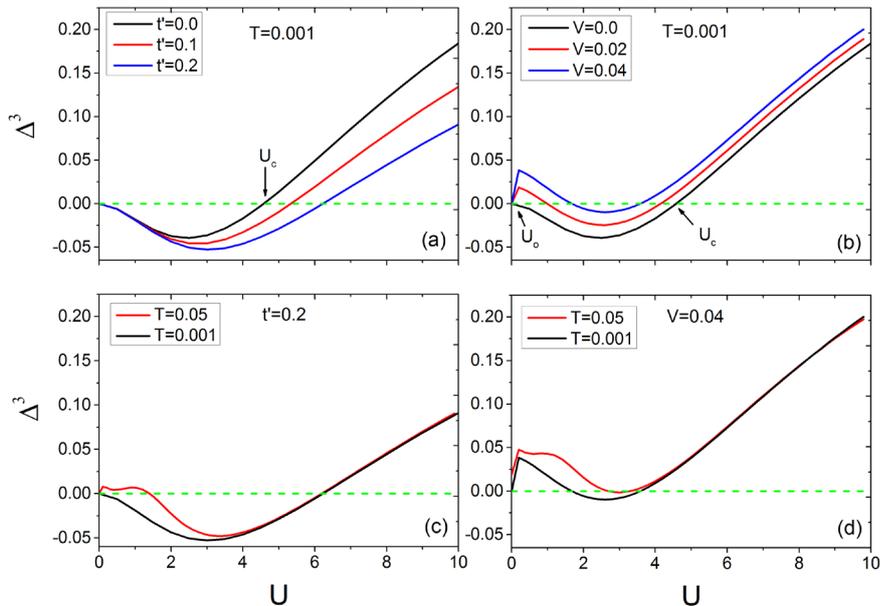


Figure 2. Curve: The electron pair binding energy as a function of U . (a) and (b) correspond to different t' or V at $T = 0.001$. (c) $t' = 0.2$, $T = 0.001$ and 0.05 ; (d) $V = 0.04$, $T = 0.001$ and 0.05

图 2. 电子对束缚能随哈伯德 U 的演化曲线。(a)和(b)分别对应于温度 $T = 0.001$ ， t' 或者 V 取不同值；(c) $t' = 0.2$ ， $T = 0.001$ 和 0.05 ；(d) $V = 0.04$ ， $T = 0.001$ 和 0.05

图 4 表示温度 $T = 0.001$ 、近邻库仑相互作用 V 取不同值时，自旋和电荷能隙随 U 的变化关系，其中 U_o 和 U_c 代表电荷能隙取负值对应的最小和最大临界哈伯德相互作用强度。与图 3 类似，在 $U_o < U < U_c$ 区间，电子间形成相干配对状态，而当 $U > U_c$ 时，四方哈伯德团簇处于自旋液体态。当 $U < U_o$ 时，零自旋能隙和有限电荷能隙表明系统处于哈伯德-莫特绝缘体状态。由图 4 还可以发现，从 $V = 0.0$ 增加到 $V = 0.04$

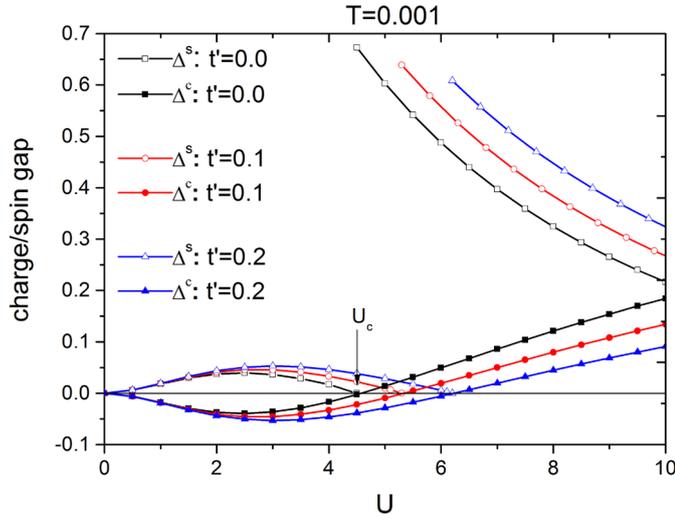


Figure 3. Curve: The charge gap Δ^c and spin gap Δ^s as a function of U . $T = 0.001$, and t' increases from 0.0 to 0.2

图 3. 电荷能隙 Δ^c 和自旋能隙 Δ^s 随哈伯德 U 的演化曲线。温度 $T = 0.001$ ， t' 从 0.0 增加到 0.2

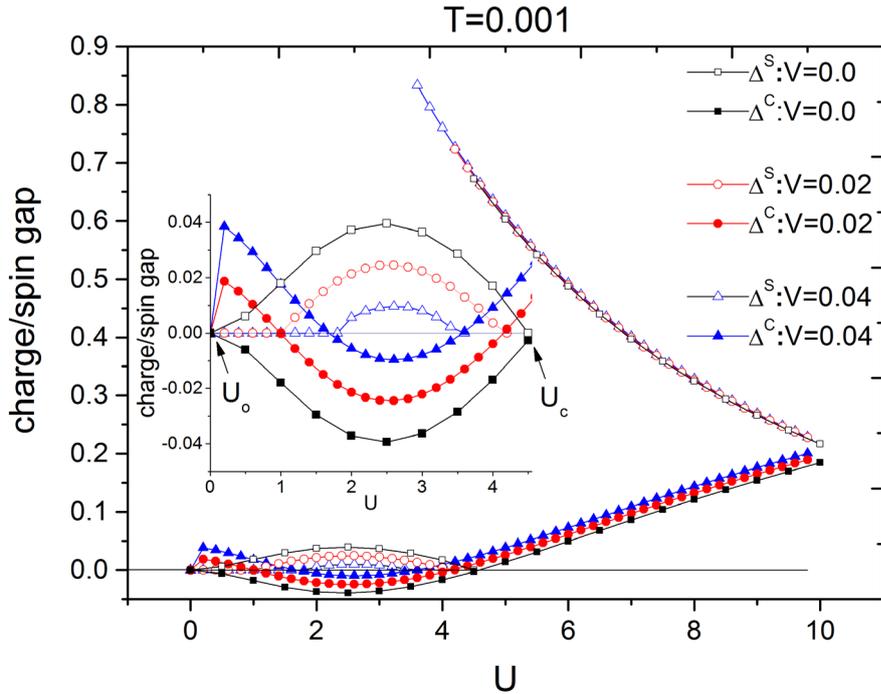


Figure 4. Curve: The charge gap Δ^c and spin gap Δ^s as a function of U . $T = 0.001$, and V increases from 0.0 to 0.04. The inset figure shows the behavior for $U < 5$

图 4. 电荷能隙 Δ^c 和自旋能隙 Δ^s 随哈伯德 U 的演化曲线。温度 $T = 0.001$ ， V 从 0.0 增加到 0.04。内图显示 $U < 5$ 的部分曲线

的过程中, U_c 随着 V 的增大向右移动, 而且 U_c 随着 V 的增大却向左移动, 表明 V 显著缩小了电子配对的 U 值区间。

对于一个无相互作用多电子体系, 电子的电荷和自旋激发具有相似的特征, 即不产生自旋 - 电荷分离。然而在相互作用系统中, 情况会有所不同, 电子的电荷自由度可能会与它的自旋自由度产生分离。图 5 给出 t' 取不同值时的 T-U 相图。图中 Fermi liquid, MH insulator, charge pairing, 和 spin pairing 分别代表费米液体, 莫特 - 哈伯德绝缘体、电荷配对、以及自旋配对相。电荷配对临界温度 T_c^p 和自旋配对临界温度 T_s^p 可以从相应的能隙为零条件 ($\Delta_c^p(T_c) = 0$ 和 $\Delta_s^p(T_s) = 0$) 得出, 而金属 - 绝缘体转变温度 T_c 同样根据电荷能隙为零的条件给出。在费米液体区, 自旋和电荷能隙皆为零, 而在莫特 - 哈伯德绝缘体区, 系统处于电荷能隙有限但自旋能隙为零的自旋 - 电荷分离态。在温度低于 T_c^p 而高于 T_s^p 时, 电荷形成配对而自旋能隙为零, 表明系统处于自旋 - 电荷分离态。在临界温度 T_s^p 以下, 电荷配对与自旋配对同时形成, 即自旋和电荷自由度同时发生凝聚, 从而可以导致图 1 中 CuO_2 平面内超导态的形成。由图 5 可以发现, T_s^p 曲线随着 t' 的增加扩展到更大的 U_c , 且在同一 U 值 T_s^p 随着 t' 的增加而升高, 该结果进一步证明 t' 有助于形成电子配对的超导态。

图 6 给出 V 取不同值时的 T-U 相图。图中各相与图 5 给出的结果相同, 电荷配对临界温度 T_c^p 和自旋配对临界温度 T_s^p , 以及金属 - 绝缘体转变温度 T_c 同样根据电荷和自旋能隙为零的条件给出。从图 6 可以看出, 随着 V 的增大, 电荷配对及自旋配对相应的 U 值区域急剧缩小, 且在同一 U 值 T_s^p 随着 V 的增加而迅速降低, 该结果进一步证明 V 对超导态具有显著的抑制作用。我们还发现, 当 $V \approx 0.05$ 时, 自旋能隙区将从相图中消失, 表明系统不能形成稳定的电子配对态。

4. 结论

为了深入理解铜氧化物高温超导体在纳米尺度的电子态性质, 我们采用数值精确对角化方法研究了

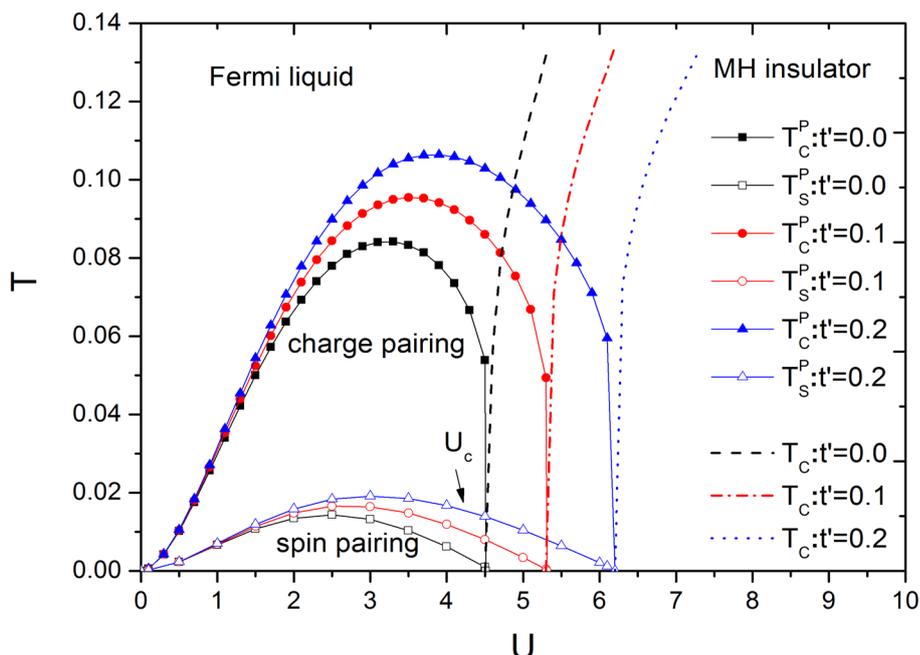


Figure 5. Curve: T-U phase diagram at $t' = 0.0, 0.1, 0.2$. The curves with filled-symbols, open-symbols, and without symbols represent the boundaries of charge pairing, spin pairing, and metal-insulator transition, respectively. U_c denotes the maximum U with spin pairing

图 5. $t' = 0.0, 0.1, 0.2$ 时对应的 T-U 相图。实心符号、空心符号、无符号曲线分别代表电荷配对、自旋配对、以及金属-绝缘体转变的相边界。 U_c 代表自旋配对的最大 U 值

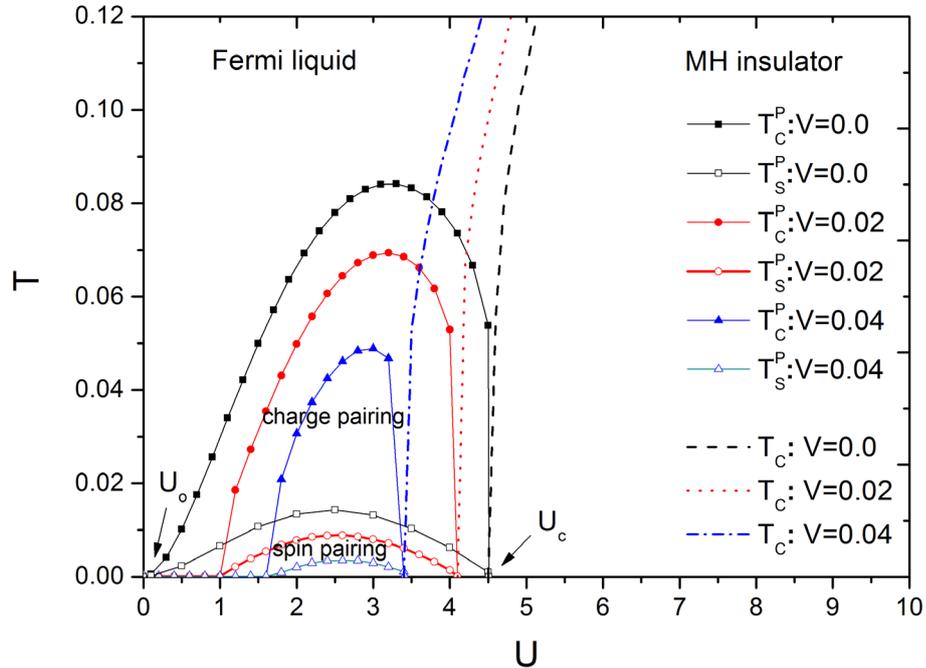


Figure 6. Curve: T-U phase diagram at $V = 0.0, 0.02, 0.04$. The curves with filled-symbols, open-symbols, and without symbols represent the boundaries of charge pairing, spin pairing, and metal-insulator transition, respectively. U_o and U_c denote the minimum and maximum U with spin pairing
图 6. $V = 0.0, 0.02, 0.04$ 时对应的 T-U 相图。实心符号、空心符号、无符号曲线分别代表电荷配对、自旋配对、以及金属 - 绝缘体转变的相边界。 U_o 和 U_c 代表自旋配对的最小和最大 U 值

四方哈伯德团簇中对角跃迁 t' 和近邻库仑相互作用 V 对电子对束缚能、自旋和电荷能隙及其对应跨越温度的物理影响。我们考察了系统在低温 $T = 0.001$ 和有限温度下，且平均电子数 $\langle N \rangle = 3$ 时的电子配对、自旋和电荷配对等物理特征。研究表明对角跃迁 t' 有利于形成电子配对的超导态，而近邻库仑相互作用 V 将显著抑制超导态的形成。我们的研究结果对于理解铜氧化物高温超导体的物理特性具有重要的意义。

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] Dagotto, E. (2005) Complex in strongly correlated electronic systems. *Science*, **309**, 257-262.
- [2] Tranquada, J.M., Sternlieb, B.J., Axe, J.D., Nakamura, Y. and Uchida, S. (1995) Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors. *Nature*, **375**, 561-563.
- [3] Hanaguri, T., Lupien, C., Kohsaka, Y., Lee, D.-H., Azuma, M., Takano, M., Takagi, H. and Davis, J.C. (2004) A “checkerboard” electronic crystal state in lightly hole-doped $\text{Ca}_{2-x}\text{NaxCuO}_2\text{Cl}_2$. *Nature*, **430**, 1001-1005.
- [4] Ghiringhelli, G., Le Tacon, M., Minola, M., Blanco-Canosa, S., Mazzoli, C., Brookes, N.B., De Luca, G.M., Frano, A., Hawthorn, D.G., He, F., Loew, T., Moretti Sala, M., Peets, D.C., Salluzzo, M., Schierle, E., Sutarto, R., Sawatzky, G. A., Weschke, E., Keimer, B. and Braicovich, L. (2014) Long-Range Incommensurate Charge Fluctuations in $(\text{Y,Nd})\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. *Science*, **337**, 821-825.
- [5] Schumann, R. (2002) Thermodynamics of a 4-site Hubbard model by analytical diagonalization. *Annales de Physique (Leipzig)*, **11**, 49-87.
- [6] Kocharian, A.N., Fernando, G.W., Palandage, K. and Davenport, J.W. (2006) Exact study of charge-spin separation,

- pairing fluctuations, and pseudogaps in four-site Hubbard clusters. *Physical Review B*, **74**, Article ID: 024511.
- [7] Kocharian, A.N., Fernando, G.W., Wang, T., Palandage, K. and Davenport, J.W. (2007) Exact thermodynamics of pairing and charge-spin separation crossovers in small Hubbard nanoclusters. *Physics Letters A*, **364**, 57-65.
- [8] Kocharian, A.N., Fernando, G.W., Palandage, K. and Davenport, J.W. (2007) Electron coherent and incoherent pairing instabilities in inhomogeneous bipartite and nonbipartite nanoclusters. *Physics Letters A*, **373**, 1074-1082.
- [9] Fernando, G.W., Kocharian, A.N., Palandage, K., Wang, T. and Davenport, J.W. (2007) Phase separation and electron pairing in repulsive Hubbard clusters. *Physical Review B*, **75**, 085109.
- [10] Kocharian, A.N., Fernando, G. W., Palandage, K. and Davenport, J.W. (2008) Coherent and incoherent pairing instabilities and spin-charge separation in bipartite and nonbipartite nanoclusters: Exact results. *Physical Review B*, **78**, Article ID: 075431.
- [11] Kocharian, A.N., Fernando, G.W., Palandage, K. and Davenport, J.W. (2009) Spin-charge separation and electron pairing instabilities in Hubbard nanoclusters. *Ultramicroscopy*, **109**, 1066-1073.
- [12] Huang, Z.B., Lin, H.Q. and Gubernatis, J.E. (2001) Quantum Monte Carlo study of spin, charge, and pairing correlations in the t-t'-U Hubbard model. *Physical Review B*, **64**, Article ID: 205101.
- [13] Onari, S., Arita, R., Kuroki, K. and Aoki, H. (2004) Phase diagram of the two-dimensional extended Hubbard model: Phase transitions between different pairing symmetries when charge and spin fluctuations coexist. *Physical Review B*, **70**, Article ID: 094523.