

# Quantum Monte Carlo Study of the Chiral $d + id$ Superconducting State on the Inhomogeneous Two-Dimensional Honeycomb Lattice

Shichao Fang<sup>1</sup>, Yun Gao<sup>2</sup>, Zhongbing Huang<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Physics and Electronic Technology, Hubei University, Wuhan Hubei

<sup>2</sup>School of Materials Science and Engineering, Hubei University, Wuhan Hubei

Email: [huangzb@hubu.edu.cn](mailto:huangzb@hubu.edu.cn)

Received: May 5<sup>th</sup>, 2017; accepted: May 24<sup>th</sup>, 2017; published: May 27<sup>th</sup>, 2017

---

## Abstract

On the basis of the Hubbard model, the evolution of the chiral  $d + id$  superconducting state with the inhomogeneity on the two-dimensional honeycomb lattice is studied by using the constrained-path Monte Carlo method. We find that when the on-site  $U$  is small, the  $d + id$  pairing correlation function firstly increases with increasing the inhomogeneity, and then decreases beyond a certain inhomogeneity. For relatively larger  $U$ , the enhancement tendency of  $d + id$  pairing correlation function is strongly suppressed. Our results indicate that there exists an optimal inhomogeneity at small  $U$  values, which optimizes the  $d + id$  superconducting state on the honeycomb lattice. Further analysis shows that magnetism is not responsible for the inhomogeneity-dependent superconductivity. In terms of the changes of the density of states at the Fermi level and the effective on-site interaction as a function of inhomogeneity, we offer a reasonable explanation for the inhomogeneity-dependent superconductivity. Our study provides an important route for controlling the superconducting state on the honeycomb lattice.

## Keywords

$d + id$  Superconductivity, Chiral, Honeycomb Lattice, Quantum Monte Carlo

---

# 非均匀二维蜂巢晶格中手征性 $d + id$ 超导态的量子蒙特卡罗探究

方世超<sup>1</sup>, 高云<sup>2</sup>, 黄忠兵<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>湖北大学物理与电子科学学院, 湖北 武汉

<sup>2</sup>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: 2017年5月5日; 录用日期: 2017年5月24日; 发布日期: 2017年5月27日

## 摘要

本文基于哈伯德模型采用约束路径量子蒙特卡罗方法研究了非均匀二维蜂巢晶格中手征性  $d + id$  超导态随非均匀度(由蜂巢内和蜂巢间的跃迁积分之间的比值来表征)的演化特性。研究结果表明当在位库仑相互作用  $U$  较小时, 手征性  $d + id$  电子配对关联函数随着非均匀度的增大先明显增加后逐渐减小, 而在较大  $U$  的情况下手征性  $d + id$  电子配对关联函数随非均匀度的增大趋势被强烈抑制。我们的研究结果说明在较小  $U$  的情况下存在一个最佳的非均匀度, 使得体系具有最强的手征性  $d + id$  超导态。进一步的理论分析显示磁性并不是导致超导态变化的原因。根据体系中费米能附近的电子状态数与有效在位库仑相互作用随非均匀度的变化特征, 我们对手征性  $d + id$  超导态随非均匀度的演化给出了合理的解释。我们的研究对量子调控二维蜂巢晶格中的超导态提供了重要的理论思路。

## 关键词

$d + id$  超导, 手征性, 蜂巢晶格, 量子蒙特卡罗

Copyright © 2017 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

## 1. 引言

近年来, 拓扑超导态因其新奇的物理特性受到了凝聚态物理学界的广泛关注, 其中石墨烯中可能存在的手征性  $d + id$  (具体形式为  $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ ) 超导态更是目前的一个研究热点。理论研究发现手征性  $d + id$  超导态同时缺少了时间反演和宇称对称性, 而且表现出非平庸的拓扑特性, 例如量子化自旋霍尔电导和热霍尔电导、超导涡旋中的马约拉纳态, 以及边界上的无能隙态。Pathak 等人运用变分蒙特卡罗方法模拟哈伯德模型的结果表明在低掺杂的石墨烯中存在手征性  $d + id$  超导态[1], 随后 Nandkishore 等人的重正化群结果显示在 1/4 掺杂的石墨烯中存在手征性  $d + id$  超导态[2]。Black-Schaffer 等人运用重正化平均场以及量子蒙特卡罗方法的计算结果进一步证实了在电子半填充附近存在手征性  $d + id$  超导态[3]。

手征性  $d + id$  超导态的实部即  $d_{x^2-y^2}$  超导态对应于铜氧化物高温超导体的超导状态。为了解释高温超导机理, 人们对均匀[4] [5] [6] [7] 和非均匀[8] [9] [10] [11] 四方晶格中的  $d_{x^2-y^2}$  超导态开展了大量的研究工作, 其中非均匀主要包括棋盘状和条纹状两种形式。Kivelson 等人采用微扰法和数值精确对角化的计算结果表明一定的棋盘状非均匀有助于掺杂空穴形成  $d_{x^2-y^2}$  配对状态[8] [9]。Baruch 等人运用 contractor 重正化群方法的计算结果同样显示适当的棋盘状非均匀有助于增强  $d_{x^2-y^2}$  超导态[10]。最近, 有限温度行列式量子蒙特卡罗方法的模拟结果显示在四方晶格中存在最优化的棋盘状非均匀度使得  $d_{x^2-y^2}$  电子配对关联函数取得最大值, 并且最优化的非均匀度随着在位电子库仑相互作用的增大而增加[11]。

受 Kivelson 等人工作的启发, 我们构造了非均匀二维蜂巢晶格并采用约束路径量子蒙特卡罗方法[12] [13] [14] [15] [16] 探究了非均匀性对  $d + id$  超导态的物理影响。我们的计算结果表明在弱电子关联区域, 适当的非均匀有助于增强  $d + id$  超导态, 而随着电子关联的增强, 非均匀对超导难以产生增强作用。我

们的研究工作一方面可以扩展对二维蜂巢晶格中关联电子物理特性的理解，另一方面为探寻更强的非常规超导态提供了重要的理论思路。

## 2. 模型结构和哈密顿量

参照棋盘状非均匀四方晶格[8] [9]，我们构造了非均匀二维蜂巢晶格，如图 1 所示。

图 1(a)表示尺寸为  $2 \times 48$  的晶格结构示意图，它由两套相互嵌套的三角晶格组成。图中黑色实心表示 A 类子格点，黑色空心表示 B 类子格点。我们将碳原子由黑色实线连接形成六边形的蜂巢，然后用红色点线将蜂巢连接起来。通过定义蜂巢内近邻碳原子之间电子的跃迁积分为  $t_1$ ，蜂巢间近邻碳原子之间电子的跃迁积分为  $t_2$ ，我们可以改变  $t_1$  和  $t_2$  的比值来调控二维蜂巢晶格的非均匀性。图 1(a)中以  $\mathbf{a}_1$  和  $\mathbf{a}_2$  为基矢构成的平行四边形代表非均匀情况下的晶格原胞，内含六个碳原子。当只考虑在位库仑相互作用时，系统的哈密顿量表示为下面的形式：

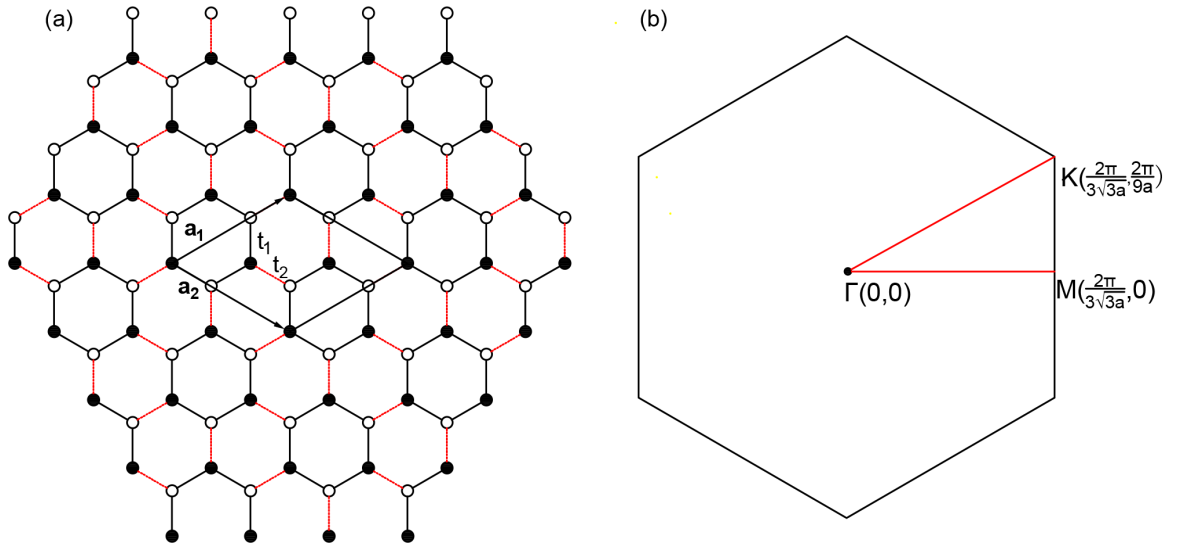
$$H = \sum_{\langle i\alpha, j\beta \rangle \sigma} (-t_{i\alpha, j\beta} a_{i\alpha\sigma}^+ b_{j\beta\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

上式中三角括号表示二维系统中的近邻格点， $\langle \alpha, \beta \rangle \in (1, 2, 3)$  分别表示原胞中 A 类子格点和 B 类子格点。 $t_{i\alpha, j\beta}$  表示近邻格点间的跃迁积分， $a_{j\beta\sigma}^+$  ( $a_{j\beta\sigma}$ ) 分别表示原胞中 A 类子格点上的产生(湮灭)算符， $b_{j\beta\sigma}^+$  ( $b_{j\beta\sigma}$ ) 分别表示原胞中 B 类子格点上的产生(湮灭)算符， $\sigma \in (\uparrow, \downarrow)$  表示自旋， $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$  表示自旋为  $\sigma$  的电子密度算符， $U$  表示在位库仑相互作用。本文中我们取近邻格点之间的距离为  $a$ ，在结果部分所给出的  $t_1$ ， $t_2$ ， $U$  等均均以近邻格点间的最大跃迁积分作为能量单位，原胞中的基矢可以写为：

$$\mathbf{a}_1 = \frac{3a}{2}(\sqrt{3}, 1) \quad \mathbf{a}_2 = \frac{3a}{2}(\sqrt{3}, -1) \quad (2)$$

由(2)式可以方便地得到倒格子基矢为：

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right) \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, -1 \right) \quad (3)$$



**Figure 1.** (a) Schematic diagram of the inhomogeneous honeycomb lattice with double-48 sites; (b) Sketch of the first Brillouin zone. In the left panel, filled and open circles represent the A and B sub-lattice sites,  $\mathbf{a}_1$  and  $\mathbf{a}_2$  denote the basis vectors of the unit cell, and  $t_1$  and  $t_2$  stand for the hopping integrals within and between honeycombs

**图 1.** (a) 晶格大小为  $2 \times 48$  的非均匀二维蜂巢晶格结构示意图；(b) 第一布里渊区示意图。图(a)中黑色实心 and 空心圆圈代表 A 和 B 两套子格子， $\mathbf{a}_1$  和  $\mathbf{a}_2$  代表原胞基矢， $t_1$  和  $t_2$  代表蜂巢内和蜂巢间的跃迁积分

体系的第一布里渊区由图 1(b)表示。运用傅里叶变换我们将电子算符变换到波矢空间

$$\begin{aligned} a_{i\alpha\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp^{ik \cdot r_i} a_{k\alpha\sigma} \\ b_{i\beta\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \exp^{ik' \cdot r_j} b_{k'\beta\sigma} \end{aligned} \quad (4)$$

这里  $N$  为有限晶格上的原胞数。采用紧束缚近似系统的哈密顿量在波矢空间可以描述为:

$$H = - \sum_{k\alpha\beta\sigma} (\varepsilon_{\alpha\beta}(k) a_{k\alpha\sigma}^+ b_{k\alpha\sigma} + H.c.) + \frac{1}{N} \sum_{k,k',q} U (a_{k+q,\uparrow}^+ a_{k,\uparrow} a_{k'-q,\downarrow}^+ a_{k',\downarrow} + b_{k+q,\uparrow}^+ b_{k,\uparrow} b_{k'-q,\downarrow}^+ b_{k',\downarrow}) \quad (5)$$

上式中  $\varepsilon_{\alpha,\beta}(k)$  可以写成以下矩阵形式:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(k) = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^+ & A_{22} \end{bmatrix} \quad (6)$$

其中矩阵中的元素  $A_{11}$  与  $A_{22}$  为 0 矩阵,  $A_{12}$  可以描述为:

$$A_{12} = \begin{bmatrix} t_1 \exp^{-iak_y} & t_2 \exp^{i\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x + \frac{a}{2}k_y\right)} & t_1 \exp^{-i\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x - \frac{a}{2}k_y\right)} \\ t_2 \exp^{-i\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x - \frac{a}{2}k_y\right)} & t_1 \exp^{-iak_y} & t_1 \exp^{i\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x + \frac{a}{2}k_y\right)} \\ t_1 \exp^{i\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x + \frac{a}{2}k_y\right)} & t_1 \exp^{-i\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x - \frac{a}{2}k_y\right)} & t_2 \exp^{-iak_y} \end{bmatrix} \quad (7)$$

在本文的计算中, 我们采用了约束路径量子蒙特卡罗方法。它的总体思路是一个多粒子体系的基态波函数可以通过不断投影得到, 即  $|\psi_0\rangle \propto \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\tau H} |\psi_T\rangle$  其中  $|\psi_0\rangle$  表示体系的基态波函数,  $e^{-\tau H}$  为投影算符,  $|\psi_T\rangle$  为试探波函数。在以下计算中, 试探波函数选取为自由电子对应的波函数, 即  $U=0$  时哈密顿量给出的单个 Slater 行列式。为了克服费米子符号问题, 我们要求任意一个投影后的 Slater 行列式  $|\phi_n\rangle$  与试探波函数都有正的交叠积分, 即  $\langle \psi_T | \phi_n \rangle > 0$ 。

为了探究非均匀二维蜂巢晶格体中的手征性  $d+id$  超导特性和磁性特征, 我们计算了体系的电子配对关联函数和自旋关联函数  $S(q)$ 。前者由以下公式定义:

$$C_{d+id}(R) = \langle \Delta_{d+id}^+(i) \Delta_{d+id}(j) \rangle \quad (8)$$

其中  $C_{d+id}(R)$  表示相距  $R$  的格点  $i$  和格点  $j$  之间的电子配对关联函数。电子对算符  $\Delta_{d+id}(i)$  写为:

$$\Delta_{d+id}(i) = \sum_l f_{d+id}(\delta_l) (a_{i\uparrow} b_{i+\delta_l\downarrow} - a_{i\downarrow} b_{i+\delta_l\uparrow}) \quad (9)$$

式中  $\delta_l (l=1,2,3)$  表示近邻格点之间的连接,  $f_{d+id}(\delta_l)$  表示手征性  $d+id$  超导态的形状因子, 其表达式如下:

$$f_{d+id}(\delta_l) = \exp^{2\pi i(l-1)/3}, \quad l=1,2,3 \quad (10)$$

超导态的特征可由长程电子配对关联函数的平均值  $P_{d+id}$  来加以刻画, 其定义如下:

$$P_{d+id} = \frac{1}{N'} \sum_{R>2} C_{d+id}(R) \quad (11)$$

这里  $N'$  为距离大于 2 的  $R$  数目。系统的磁性可以根据动量空间的自旋关联函数来描述, 其计算公式如下:

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_{k,l} \sum_{i,j} \exp^{iq(i_k - j_l)} \langle m_{ik} m_{jl} \rangle \quad (12)$$

其中

$$m_{i,a} = a_{i,\uparrow}^+ a_{i,\uparrow} - a_{i,\downarrow}^+ a_{i,\downarrow} \quad m_{j,b} = b_{j,\uparrow}^+ b_{j,\uparrow} - b_{j,\downarrow}^+ b_{j,\downarrow} \quad (13)$$

### 3. 计算结果与讨论

在以下的讨论中，我们固定  $t_1$  和  $t_2$  其中一个跃迁积分为 1.0，并通过改变另一个跃迁积分来调节体系的非均匀性。

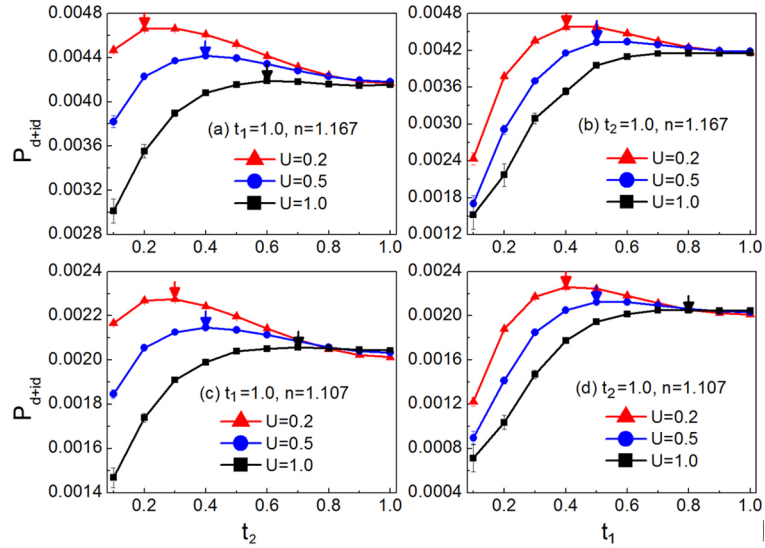
图 2(a)和图 2(c)、图 2(b)和图 2(d)分别表示在  $U = 0.2, 0.5,$  和  $1.0$  时对于固定  $t_1 = 1.0$  或者固定  $t_2 = 1.0$ ， $P_{d+id}$  随跃迁积分  $t_2$  或者  $t_1$  变化的曲线。图 2(a)和图 2(b)对应的是晶格大小为  $2 \times 48$ ，电子填充浓度  $n = 1.167$  时得到的计算结果。图 2(c)和 2(d)对应的是晶格大小为  $2 \times 75$ ，电子填充浓度  $n = 1.107$  时得到的计算结果。从图中可以发现，随着跃迁积分  $t_2$  或  $t_1$  的减小， $P_{d+id}$  均表现出先增大后减小的规律，图中箭头表示  $P_{d+id}$  取得最大值的位置。同时从图 2 中还可以发现在位库仑相互作用  $U$  的大小对  $P_{d+id}$  随  $t_2$  或者  $t_1$  的变化有很大影响。随着在位库仑相互作用  $U$  的增大，非均匀性对  $d+id$  超导态的增强效应被显著抑制。比较图 2(a)和图 2(b)以及图 2(c)和图 2(d)，可以发现  $P_{d+id}$  取得最大值对应的  $t_2$  值均小于相同  $U$  值条件下  $P_{d+id}$  取得最大值对应的  $t_1$  值。这说明  $t_1$  和  $t_2$  引起的非均匀性具有不对称性，而且  $t_2$  对  $d+id$  超导态具有更大的可控范围。

我们的计算结果说明通过调节二维蜂巢晶格的非均匀性可以增强手征性  $d+id$  超导态，并且弱的在位库仑相互作用更有利于增强手征性  $d+id$  超导态。在图 2 中，随着在位库仑相互作用的增加最优化的  $t_2$  或者  $t_1$  在逐渐增加，这与 T. Ying 等人采用有限温度行列式蒙特卡罗方法研究四方晶格得到的计算结果一致[11]。同时在不同尺寸的晶格上， $P_{d+id}$  随跃迁积分的变化以及在位库仑相互作用对它的影响都存在相同的规律。该结果说明了我们的计算结果反映了非均匀性引起的内在物理效应。

为了进一步考察晶格大小引起的有限尺寸效应，我们将晶格尺度进一步扩大，计算了晶格大小为  $2 \times 108$ ，电子填充浓度  $n = 1.130$  时  $d+id$  电子配对关联函数  $C_{d+id}(R)$  与格点距离  $R$  之间的函数关系。图 3(a)、图 3(c)、图 3(e)对应固定  $t_1 = 1.0$ ， $U$  分别取 0.2, 0.5, 以及 1.0 时， $C_{d+id}(R)$  随跃迁积分  $t_2$  的变化情况。在较小的在位库仑相互作用下，即  $U = 0.2$  和  $U = 0.5$  时不同格点距离处手征性  $d+id$  电子配对关联函数随  $t_2$  的减小而增加。当在位库仑相互作用增加到  $U = 1.0$  时，电子配对关联函数在较远的格点距离  $R$  上的数值随跃迁积分  $t_2$  的减小而减小。这与图 2 中观察到的不同  $U$  值时  $P_{d+id}$  随跃迁积分  $t_2$  的变化特征相一致。图 3(b)、图 3(d)、图 3(f)对应固定跃迁积分  $t_2 = 1.0$ ， $U$  分别取 0.2, 0.5, 以及 1.0 时，不同格点距离  $R$  处手征性  $d+id$  超导态的电子配对关联函数值随  $t_1$  的变化情况。同样我们发现  $t_1$  引起的改变与图 2 所得到的结果相一致。

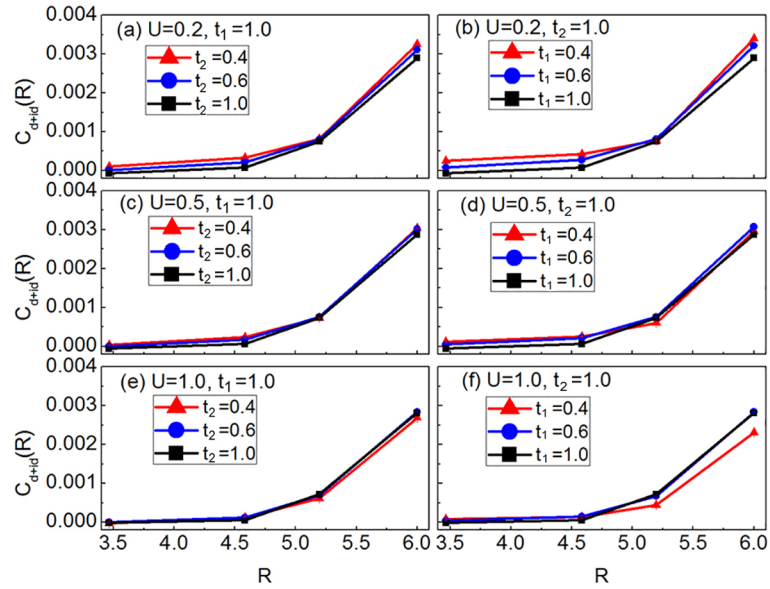
综合图 2 和图 3 的计算结果表明在弱的在位库仑相互作用下，调节跃迁积分引起的非均匀性可以增强手征性  $d+id$  超导态。为了能够清楚地理解在非均匀二维蜂巢晶格中手征性  $d+id$  超导态随跃迁积分的变化所表现出的行为，我们将从磁性、态密度以及费米能附近的带宽三个方面进行详细的理论分析。

在关联电子体系中，磁性对超导配对往往具有重要的影响。我们计算了晶格大小为  $2 \times 48$ ，电子填充浓度  $n = 1.167$ ，在位库仑相互作用  $U = 0.2$  时非均匀蜂巢晶格中的自旋关联函数  $S(q)$ 。图 4(a)和图 4(b)分别为固定跃迁积分  $t_1 = 1.0$  或者  $t_2 = 1.0$  时自旋关联函数  $S(q)$  随  $t_2$  或者  $t_1$  的变化情况。我们可以发现，自旋关联函数在不同的跃迁积分  $t_2$  或者  $t_1$  下沿着第一布里渊区中高对称线的数值几乎没有变化。为了便于对比分析，图 4 中 M' 和 K' 分别对应均匀蜂巢晶格中第一布里渊区的边界点  $\left(\frac{2\pi}{3a}, 0\right)$  和  $\left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right)$ 。图 4 的



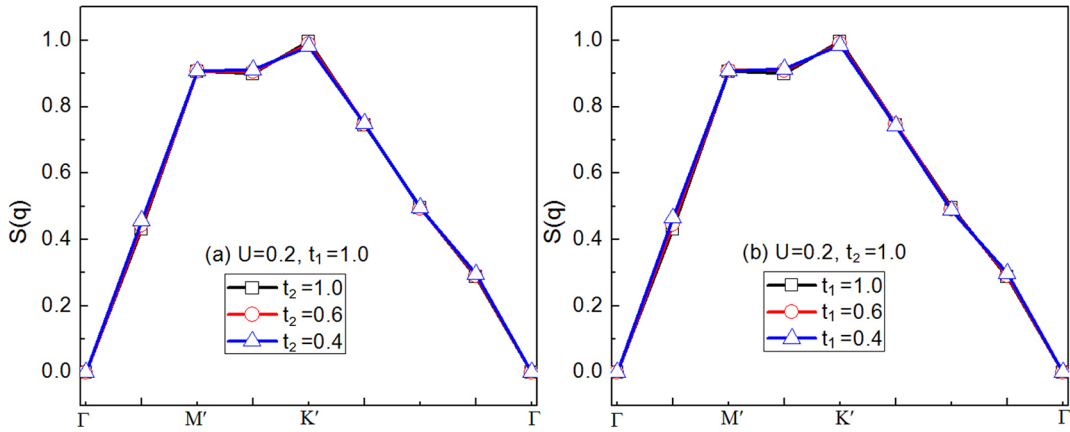
**Figure 2.**  $P_{d+id}$  as a function of the inhomogeneity for different lattice sites and on-site Hubbard interactions. (a) The size of lattice is  $2 \times 48$ ,  $n = 1.167$  and  $t_1 = 1.0$ ; (b) The size of lattice is  $2 \times 48$ ,  $n = 1.167$  and  $t_2 = 1.0$ ; (c) The size of lattice is  $2 \times 75$ ,  $n = 1.107$  and  $t_1 = 1.0$ ; (d) The size of lattice is  $2 \times 75$ ,  $n = 1.107$  and  $t_2 = 1.0$

**图 2.** 不同晶格尺度和不同在位库仑相互作用下  $P_{d+id}$  随非均匀度的变化关系。(a) 晶格大小为  $2 \times 48$ ,  $n = 1.167$  以及  $t_1 = 1.0$ ; (b) 晶格大小为  $2 \times 48$ ,  $n = 1.167$  以及  $t_2 = 1.0$ ; (c) 晶格大小为  $2 \times 75$ ,  $n = 1.107$  以及  $t_1 = 1.0$ ; (d) 晶格大小为  $2 \times 75$ ,  $n = 1.107$  以及  $t_2 = 1.0$



**Figure 3.** Pairing correlation function  $C_{d+id}(R)$  of the chiral  $d+id$  superconducting state as a function of distance for different hopping integral  $t_2$  or  $t_1$  on the  $2 \times 108$  lattice and  $n = 1.130$ . (a)  $t_1 = 1.0$ ,  $U = 0.2$ ; (b)  $t_2 = 1.0$ ,  $U = 0.2$ ; (c)  $t_1 = 1.0$ ,  $U = 0.5$ ; (d)  $t_2 = 1.0$ ,  $U = 0.5$ ; (e)  $t_1 = 1.0$ ,  $U = 1.0$ ; (f)  $t_2 = 1.0$ ,  $U = 1.0$

**图 3.** 晶格尺度为  $2 \times 108$ , 电子填充浓度  $n = 1.130$  时不同的跃迁积分  $t_2$  或者  $t_1$  下手征性  $d+id$  超导态的配对关联函数随格点距离的变化关系。(a)  $t_1 = 1.0$ ,  $U = 0.2$ ; (b)  $t_2 = 1.0$ ,  $U = 0.2$ ; (c)  $t_1 = 1.0$ ,  $U = 0.5$ ; (d)  $t_2 = 1.0$ ,  $U = 0.5$ ; (e)  $t_1 = 1.0$ ,  $U = 1.0$ ; (f)  $t_2 = 1.0$ ,  $U = 1.0$



**Figure 4.** Spin correlation  $S(q)$  on the  $2 \times 48$  lattice along the high symmetric lines in the first Brillouin zone at  $n = 1.167$  and  $U = 0.2$ . (a)  $t_1 = 1.0$ ; (b)  $t_2 = 1.0$

**图 4.** 晶格大小为  $2 \times 48$ , 电子填充浓度  $n = 1.167$  以及在位库仑相互作用  $U = 0.2$  时自旋关联函数在第一布里渊区高对称线上随  $t_2$  或者  $t_1$  的数值变化。(a)  $t_1 = 1.0$ ; (b)  $t_2 = 1.0$

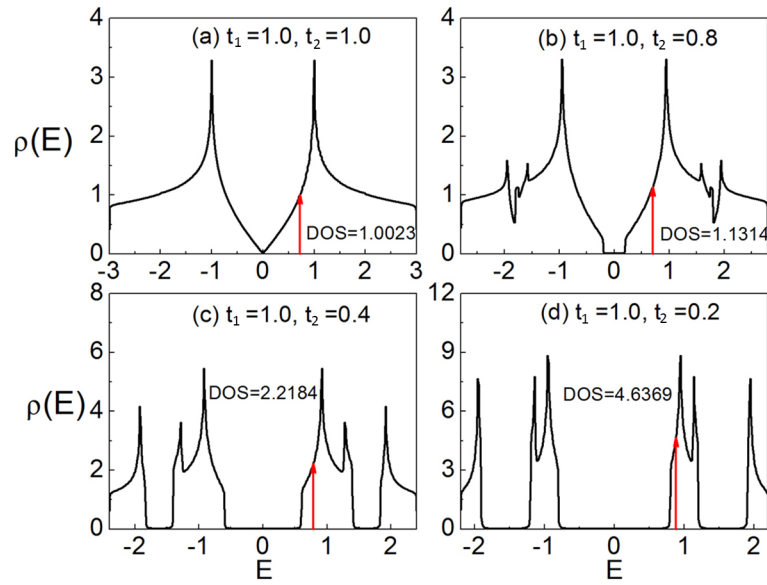
结果说明了跃迁积分的改变几乎不会影响体系的磁性，因而在非均匀蜂巢晶格中磁性并不是影响手征性  $d + id$  超导态的主要因素。其它参数情况下的磁性变化特征与图 4 的情况完全一致。

鉴于费米能附近的电子状态数对超导态的强弱有着重要的影响，我们计算了非均匀蜂巢晶格体系的态密度。图 5(a)~图 5(d)表示固定跃迁积分  $t_1 = 1.0$ ,  $t_2$  分别为 1.0、0.8、0.4、以及 0.2 时的电子态密度分布图。图中箭头表示电子填充浓度  $n = 1.107$  时相应费米能的位置，DOS 代表费米能处的电子状态数。我们从图 5 中可以发现随着跃迁积分  $t_2$  的减小，费米能附近的电子状态数不断增加， $t_2 = 0.2$  时对应的电子状态数比  $t_2 = 1.0$  时的值增加了 4.6 倍。这一变化趋势与图 2 和图 3 中观察到的  $d + id$  电子配对关联函数随  $t_2$  的减小而增加这一行为相一致。这个结果说明，费米能附近电子状态数的增加有利于增强手征性  $d + id$  超导态。

同样，我们也计算了固定  $t_2 = 1.0$ ,  $t_1$  分别为 1.0、0.8、0.4、以及 0.2 时的电子态密度分布图，如图 6 所示。我们同样发现，随着跃迁积分  $t_1$  的减小，费米能附近的电子状态数不断增加。在  $t_1 = 0.2$  时对应的电子状态数比  $t_1 = 1.0$  时的值增加了 15 倍。对比图 5 中的计算结果，理论上减小跃迁积分  $t_1$  更有利于增强手征性  $d + id$  超导态，因为减小  $t_1$  时费米能附近的电子状态数相比于减小  $t_2$  时费米能附近的电子状态数增加更快。然而这与我们在图 2 中观察到的结果并不一致，说明还有其它因素对  $d + id$  超导态具有重要的影响。从图 5 和图 6 中可以发现在费米能处的带宽随跃迁积分的减小表现出逐渐减小的趋势。这说明电子的有效在位库仑相互作用  $U_{eff}$  (由  $U$  和带宽之间的比值来表征)在逐渐增大，从而会抑制手征性  $d + id$  超导态。在位库仑相互作用对  $d + id$  超导的抑制效应已经在我们的前期工作[16]中明显表现出来。为了说明我们的结果，下面我们对带宽进行了更详细的定量分析。

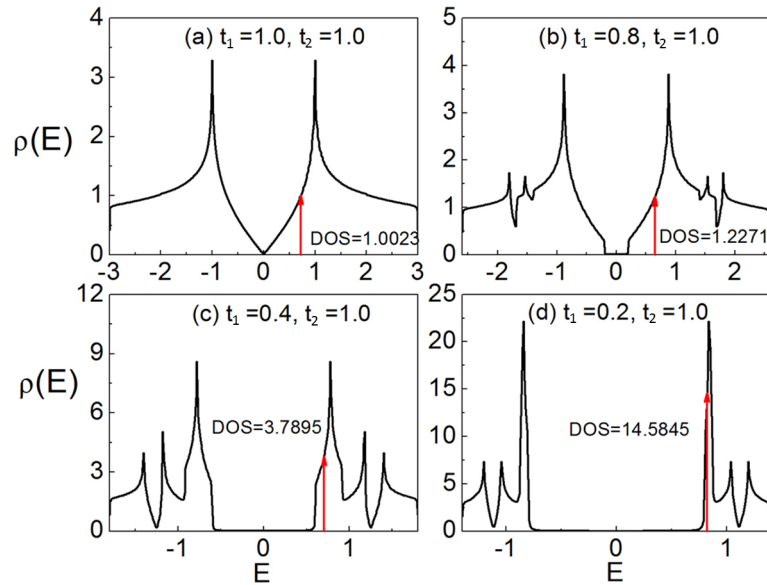
图 7(a)~图 7(d)表示是  $t_1 = 1.0$ ,  $t_2$  分别为 1.0, 0.8, 0.4, 0.2 时，蜂巢晶格体系的电子能带结构图。图中绿色线对应  $n = 1.107$  的费米能所在位置。费米能处的带宽可以通过计算靠近费米能附近的能带底和能带顶之间的距离获得，其值由图中  $W$  给出。可以看到，随着跃迁积分  $t_2$  的减小费米能位置的带宽不断减小。相似的结果也在固定  $t_2 = 1.0$  而改变  $t_1$  时被观察到，如图 8 所示。对比图 7 和图 8，我们发现图 8(d) 中带宽降低为 0.3135，它小于图 7(d) 中的带宽 0.4，说明改变跃迁积分  $t_1$  对带宽的影响更为剧烈。窄的带宽将使得体系有效在位库仑相互作用  $U_{eff}$  大幅度增加，从而强烈抑制了手征性  $d + id$  超导态。这个结果为解释图 2 中观察到的电子配对关联函数  $P_{d+id}$  在非均匀度较大时反而降低的行为提供了理论依据。

考虑到费米能位置的电子状态数和带宽对手征性  $d + id$  超导态的影响随蜂巢晶格非均匀度变化时的



**Figure 5.** Density of states for different  $t_2$  at the fixed  $t_1 = 1.0$ . (a)-(d) correspond to  $t_2 = 1.0, 0.8, 0.4$ , and  $0.2$ , respectively

**图 5.** 固定  $t_1 = 1.0$  时不同的跃迁积分  $t_2$  下的态密度。(a)~(d) 分别对应  $t_2 = 1.0, 0.8, 0.4$ , 以及  $0.2$

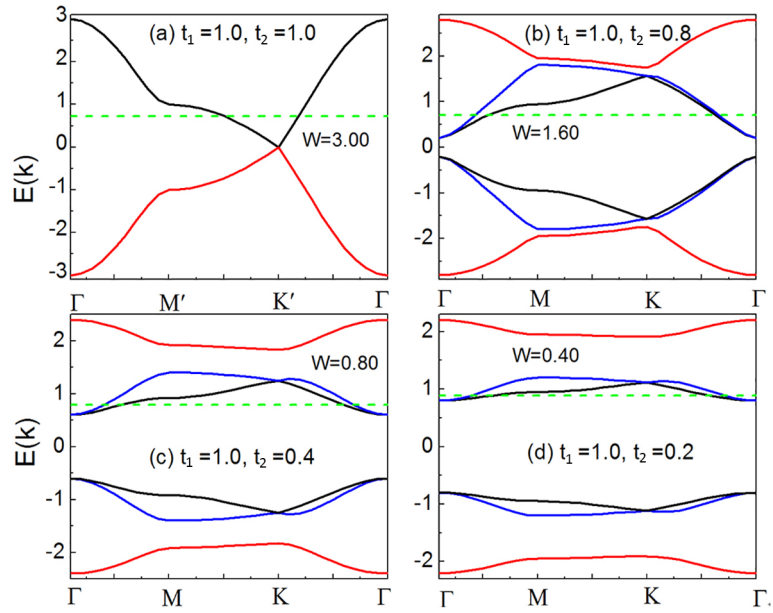


**Figure 6.** Density of states for different  $t_1$  at the fixed  $t_2 = 1.0$ . (a)-(d) correspond to  $t_1 = 1.0, 0.8, 0.4$ , and  $0.2$ , respectively

**图 6.** 固定  $t_2 = 1.0$  时不同的跃迁积分  $t_1$  下的态密度。(a)~(d) 分别对应  $t_1 = 1.0, 0.8, 0.4$ , 以及  $0.2$

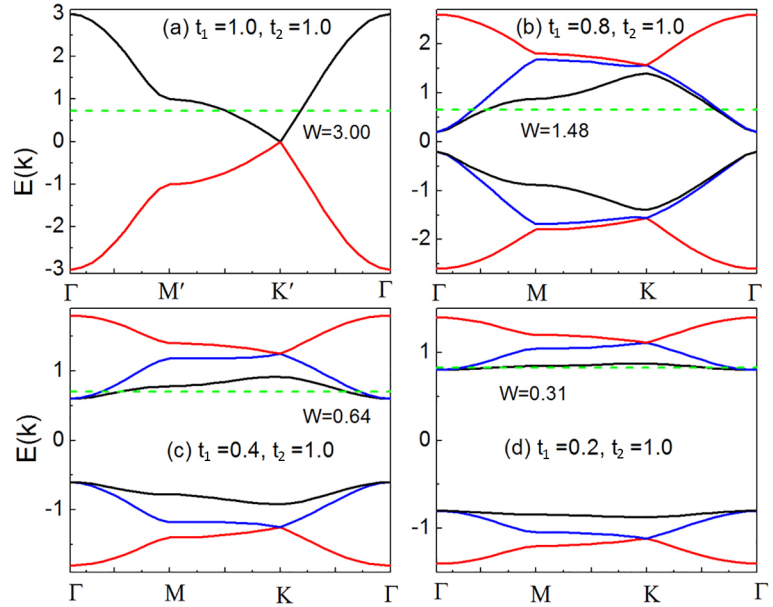
相互竞争关系，我们在图 9 中详细比较了费米能位置的电子状态数与有效在位库仑相互作用随跃迁积分的变化趋势。图 9(a)和图 9(b)表示电子填充浓度  $n = 1.107$  时，分别固定  $t_1 = 1.0$  或  $t_2 = 1.0$  得到的费米能位置的电子状态数和有效在位库仑相互作用  $U_{eff}$  随跃迁积分  $t_2$  或  $t_1$  的变化行为。黑色点线代表  $U_{eff} = 0.5$ ，对应于中等关联强度；黑色虚线表示  $U_{eff} = 1.0$ ，反映体系处进入强关联状态。图 9 显示随着跃迁积分  $t_2$  或  $t_1$  的减小，费米能位置的电子状态数不断增加，从而有利于增强手征性  $d + id$  超导体。另一方面，有





**Figure 7.** Energy dispersion along the high symmetric lines for different  $t_2$  at the fixed  $t_1 = 1.0$ . (a)-(d)  $t_2 = 1.0, 0.8, 0.4$ , and  $0.2$ , respectively

**图7.** 固定  $t_1 = 1.0$  时不同的跃迁积分  $t_2$  下沿着高对称性线的能量色散关系。(a)~(d) 分别对应  $t_2 = 1.0, 0.8, 0.4$ , 以及  $0.2$

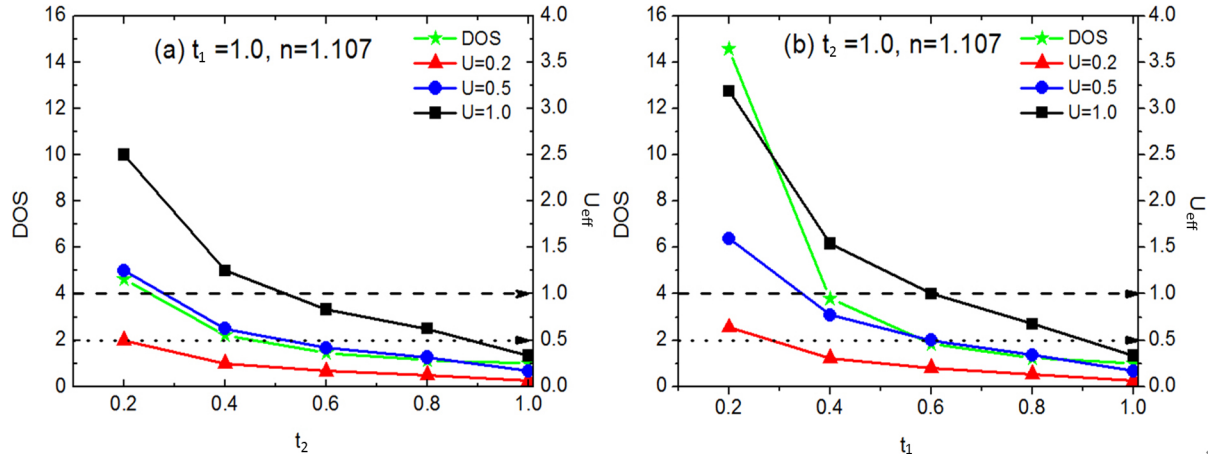


**Figure 8.** Energy dispersion along the high symmetric lines for different  $t_1$  at the fixed  $t_2 = 1.0$ . (a)-(d)  $t_1 = 1.0, 0.8, 0.4$ , and  $0.2$ , respectively

**图8.** 固定  $t_2 = 1.0$  时不同的跃迁积分  $t_1$  下沿着高对称性线的能量色散关系。(a)~(d) 分别对应  $t_1 = 1.0, 0.8, 0.4$ , 以及  $0.2$

效在位库仑相互作用也在逐渐增加，表现为抑制手征性  $d + id$  超导态的增强效应。两者之间的相互竞争对手征性  $d + id$  超导态随非均匀度的演化行为起着关键作用。

由图9中还可以看出，在较小的在位库仑相互作用下  $U = 0.2$  下随着跃迁积分的减小体系存在从弱关联过渡到中等关联的转变，在较大的在位库仑相互作用  $U = 0.5$  以及  $U = 1.0$  下随着跃迁积分的减小体系



**Figure 9.** Density of states at the Fermi level and effective on site Hubbard interaction  $U_{\text{eff}}$  as a function of  $t_1$  or  $t_2$  at  $n = 1.107$ . (a) and (b) correspond to  $t_1 = 1.0$  and  $t_2 = 1.0$ , respectively

**图 9.** 电子填充浓度  $n = 1.107$  时费米能位置的电子状态数与有效库仑相互作用  $U_{\text{eff}}$  随跃迁积分的变化关系。(a)和(b)分别对应  $t_1 = 1.0$  和  $t_2 = 1.0$

存在从弱关联过渡到中等关联再过渡到强关联的转变。对比图 9(a)和图 9(b)，我们发现费米能位置的电子状态数以及有效在位库仑相互作用的数值随跃迁积分  $t_1$  (固定  $t_2 = 1.0$ ) 的减小而增加的幅度比随跃迁积分  $t_2$  (固定  $t_1 = 1.0$ ) 的减小而增加的幅度更加显著，然而相应的手征性  $d + id$  超导态的增强效应却并不显著。这个结果说明了有效在位库仑相互作用对手征性  $d + id$  超导态的抑制行为比费米能位置电子状态数的增加引起的增强行为更加显著。结合图 2 和图 9 的结果可以发现，当  $U_{\text{eff}}$  处于弱关联和中等关联区时，手征性  $d + id$  超导态受非均匀性的增强，而当接近或进入强关联区，手征性  $d + id$  超导态反而被抑制。

#### 4. 结论

在本文中，基于哈伯德模型并采用约束路径量子蒙特卡罗方法，我们系统地研究了手征性  $d + id$  超导态随二维蜂巢晶格中非均匀度的变化特性。非均匀度由蜂巢内和蜂巢间的跃迁积分来加以调控。我们的研究表明当在位库仑相互作用  $U$  很小时， $d + id$  电子配对关联函数随着非均匀度的增加先明显增大而后逐渐减弱。即当取合适的  $t_1/t_2$  (或者  $t_2/t_1$ ) 比值时， $d + id$  电子配对关联函数存在最大值，该结果表明在较小  $U$  的情况下存在一个最佳的非均匀度，使得体系具有最强的手征性  $d + id$  超导态。我们还发现在非均匀的蜂巢晶格中，电子状态数与有效在位库仑相互作用均随非均匀度的增加而逐渐增大，但两者对  $d + id$  超导的影响却存在竞争关系：费米能位置电子状态数的增加将会有利于增强  $d + id$  超导态，而有效在位库仑相互作用的增加将会抑制  $d + id$  超导态。具体表现在费米面位置电子状态数的增加有利于准粒子浓度的增加，有效在位库仑相互作用的增加抑制了准粒子浓度的增加。因此两者之间的竞争关系合理地解释了  $d + id$  超导态随非均匀度的演化特征。本文的研究结果对量子调控二维蜂巢晶格中的超导态提供了重要的理论思路。

#### 致 谢

感谢湖北大学物理与电子科学院杨辉博士的深入交流与讨论。

#### 基金项目

国家自然科学基金(批准号：11674087，11574076)资助的课题。

## 参考文献 (References)

- [1] Nandkishore, R., Levitov, L.S. and Chubukov, A.V. (2012) Chiral Superconductivity from Repulsive Interaction in Doped Graphene. *Nature Physics*, **8**, 158-163. <https://doi.org/10.1038/nphys2208>
- [2] Pathak, S., Shenoy, V.B. and Baskaran, G. (2010) Possible High-Temperature Superconducting State with a  $d+id$  Pairing Symmetry in Doped Graphene. *Physical Review B*, **81**, Article ID: 085431. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.085431>
- [3] Black-Schaffer, A.M., Wu, W. and Hur, K.L. (2014) Chiral D-Wave Superconductivity on the Honeycomb Lattice Close to the Mott State. *Physical Review B*, **90**, Article ID: 054521. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.054521>
- [4] 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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.227002>
- [5] Prelovsek, P. and Ramsak, A. (2005) Spin-Fluctuation Mechanism of Superconductivity in Cuprates. *Physical Review B*, **72**, Article ID: 012510. <https://doi.org/10.1103/physrevb.72.012510>
- [6] 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. <https://doi.org/10.1103/physrevb.52.16255>
- [7] 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. <https://doi.org/10.1103/physrevb.88.245110>
- [8] Tsai, W.F., and Kivelson, S.A. (2006) Superconductivity in Inhomogeneous Hubbard Model. *Physical Review B*, **73**, Article ID: 214510. <https://doi.org/10.1103/physrevb.73.214510>
- [9] Tsai, W.F., *et al.* (2008) Optimal Inhomogeneity for Superconductivity: Finite-Size Studies. *Physical Review B*, **77**, Article ID: 214502. <https://doi.org/10.1103/physrevb.77.214502>
- [10] Baruch, S., and Orgad, D. (2010) Contractor-Renormalization Study of Hubbard Plaquette Clusters. *Physical Review B*, **82**, Article ID: 134537. <https://doi.org/10.1103/physrevb.82.134537>
- [11] Ying, T. *et al.* (2014) Determinant Quantum Monte Carlo Study of D-Wave Pairing in the Plaquette Hubbard Hamiltonian. *Physical Review B*, **90**, Article ID: 075121.
- [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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.205101>
- [13] 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. <https://doi.org/10.1103/physrevb.63.115112>
- [14] 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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.7464>
- [15] 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. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.78.4486>
- [16] Ma, T.X., Huang, Z.B., Hu, F.M. and Lin, H.Q. (2011) Pairing in Graphene: A Quantum Monte Carlo Study. *Physical Review B*, **84**, Article ID: 121410(R). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.121410>

**期刊投稿者将享受如下服务：**

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击：<http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱：[cmp@hanspub.org](mailto:cmp@hanspub.org)