

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

t-J 類模型之基態性質數值研究(3/3)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC93-2112-M-029-001-

執行期間：93年08月01日至94年07月31日

執行單位：東海大學物理學系

計畫主持人：施奇廷

計畫參與人員：吳建政

報告類型：完整報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 94 年 10 月 27 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫  成果報告  
 期中進度報告

(計畫名稱)

## t-J 類模型之基態性質數值研究(3/3)

計畫類別： 個別型計畫  整合型計畫

計畫編號：NSC 93-2112-M-029-001-

執行期間：2004年8月1日至2005年7月31日

計畫主持人：施奇廷

共同主持人：

計畫參與人員：吳建政

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告  完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

- 赴國外出差或研習心得報告一份
- 赴大陸地區出差或研習心得報告一份
- 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
- 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、  
列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

執行單位：東海大學物理系

中華民國 94 年 10 月 28 日

## 摘要

本計畫主要目的為，以數值方法對高溫超導體理論之「t-J類模型」基態性質作一有系統的研究。在最佳摻雜（optimal doped）或是過度摻雜（overdoped）的狀態下，現有理論已經可以大致解釋實驗所觀察得的現象，然而低度摻雜（underdoped）的高溫超導體有許多特性，仍然難以解釋，例如：當載流子（可能為電子或是電洞）逐漸增加，銅氧平面由反鐵磁相之Mott insulator至超導相之間的變化；費米面之形狀；膺能隙（pseudogap）與超導長程序；以及條紋相（stripe phase）等問題。由於此類模型屬於「強關聯電子系統」，無法以傳統量子力學的微擾法逼近求解，因此有必要借助數值方法，才能得到可靠的結果。本計畫除利用現有的量子蒙地卡羅方法，計算此類系統之能量、自旋結構相關函數、電荷結構相關函數、配對相關函數、電流相關函數以及動量分佈函數等基態時的物理量，藉此進行在各參數範圍（指不同的電子密度 $N_e$ 以及耦合強度 $J/t$ ）的性質之外，也將開發更強力的數值方法，以期以有限的計算資源求得更精確的結果，並能將新的數值方法應用於其他凝態物理模型之上。

關鍵詞：高溫超導、強關聯電子系統、蒙地卡羅模擬

## Abstract

In the project, the ground state properties of the t-J type models for High- $T_c$  superconductivity will be studied by numerical methods in a systematical way. For optimal doped and overdoped cases, the theories can explain the experimental observations well. But for underdoped High- $T_c$  superconductors, several properties are still in puzzle. For example, it is still controversial for the mechanism of the transition from Mott insulator to superconductor as the doped hole density is increased. Other questions like the shape of the Fermi surface, the relation between pseudogap and superconducting long-range order, and stripe phase are still not fully resolved. The t-J type models are “strongly-correlated electron systems” and cannot be solved by the traditional perturbation method. Thus accurate numerical methods are necessary to resolve this kind of questions. In this project, the quantum Monte Carlo method will be used to calculate the energy, spin and charge correlation functions, pair-pair correlation function, current-current correlation function, and momentum distribution function of the ground state of the models. The phases of different parameter spaces will be determined by these measured properties. In the mean time, we will develop more powerful numerical methods in order to yield more accurate results. And the new methods will be tried to apply on other condensed-matter models.

Keywords: high temperature superconductivity, strongly-correlated electron system, Monte Carlo simulation

# 目錄

- 一、 前言
- 二、 研究目的
- 三、 文獻探討
- 四、 研究方法
- 五、 結果與討論
- 六、 成果自評
- 七、 參考文獻

## 一、 前言

自高溫超導現象發現以來 [1,2]，其作用機制一直是學術與工業界感興趣的課題。雖然在超導轉變溫度的提升上沒有更大的突破，然而越來越多的研究顯示，這類材料的性質，與我們所熟知的金屬或是半導體、絕緣體材料，有很大的不同，因而除了在實際應用的期待之外，對此類新材料之基礎研究，也歷經十餘年不衰，一直是凝體物理研究中的重要課題。目前高溫超導理論在國際物理學界仍屬熱門問題，有許多一流的研究群進行這方面的研究。雖然競爭十分激烈，由於尚未釐清的問題甚多，可發揮的空間仍大。本計畫在執行的三年中（2002/08~2005/07），以數值方法研究高溫超導體主要的理論模型「Extended t-J Model」的各種特性，獲得許多重要的成果，並發表於主要的國際期刊中。本報告將針對這些成果作一說明。

## 二、 研究目的

在本計畫中，我們預計解決的問題為：

1. 確定二維 t-J 模型基態時在不同參數條件下的相圖。在計畫主持人過去的研究中，已有相當多相關的成果 [3-11]，不過許多問題物理學界仍然沒有共識，需要以更精確的數值模擬，提出更強力、清晰的數據。
2. 各個相之間如何轉變，這是更複雜的問題，特別是在低摻雜範圍，仍有許多模糊地帶。例如由無摻雜的反鐵磁相，在逐漸加入電流載子（可能為電子或電洞）時，系統如何由反鐵磁態變為超導態？為一相轉變過程或是漸變過程？費米面的變化如何[12,13]？是否有反鐵磁與超導共存的現象？與「stagger flux phase」[14]之間的關係為何？又如低摻雜時的膺能隙與超導能隙之間的關係為何？這些都是亟待解決的問題。
3. 二維 t-J 模型能解釋許多高溫超導材料的特殊性質，然而也有一些結果與實驗不吻合。我們除了徹底理解二維 t-J 模型的特性外，也應考慮，如何修正原來的模型，才能更完整地解釋實驗結果？此即為本計畫研究「t-J 類模型」之目的。以二維 t-J 模型為基礎作各種修正，如加上次近鄰或再次近鄰修正項 ( $t'$ ,  $t''$ ,  $J'$ ,  $J''$ )，庫侖排斥力，加入雜質，或改變晶格的幾何結構等，並研究這些修正後的模型的特性，以期能更完整地解釋甚至預測實驗結果。可以預見的是，次近鄰躍遷項  $t'$  是很重要的特性，因為根據對稱性，在單純的二維 t-J 模型中，摻雜電子或電洞兩種材料的特性是完全相同的，加入  $t'$  修正項可以區分這兩種材料。
4. 由於費米子系統有「負號問題」，在量子蒙地卡羅模擬中，會嚴重影響數據的精確度，由於 t-J 類模型的基態性質十分複雜，往往小小的數據誤差就能造成結論完全不同。如在相分離態的爭議中，數個研究群之間的數據差異在千分之五以下，卻得到相反的結論 [5-7, 15-17]。雖然本組所得數據較佳也較具說服力，但是其差別太小，亦有可能來自於各種有限尺度效應。這些困擾來自於數據精確度不足，因此必須開發更好的數值方法，才能得到更具說服力的結果。近年來數值方法已有不少進展 [18-20]，然而仍有改善空間，若能研發出高效率、高精確度的新方法，將可取得極大的競爭優勢。

## 三、 文獻探討

自高溫超導現象發現以來[1,2]，其作用機制至今仍缺乏一個公認確信的解釋。雖然在超導轉變溫度的提升上沒有更大的突破，然而越來越多的研究顯示，這類材料的性質，與我們所熟知的金屬或是半導體、絕緣體材料，有很大的不同，因而對此類新材料之基礎研究，

一直是凝體物理研究中的重要課題。近幾年實驗技術的發展，如高精度的 ARPES[22]以及電子顯微鏡技術[22]，讓我們對這類材料的電子結構有更進一步的瞭解。

過去在高溫超導現象的微觀理論研究方面，大多集中於二維 Hubbard 模型與 t-J 模型，這類模型有一個特點是只牽涉到最近鄰之間的電子躍遷 ( $t$ ) 以及自旋-自旋交互作用 ( $J$ ) 或是當一個晶格點有兩個電子佔據時的庫倫排斥力 ( $U$ )；次近鄰 ( $t'$ ) 與再次近鄰 ( $t''$ ) 的電子躍遷因為其能量尺度較小，在過去的研究中往往被認為不重要而遭忽略。然而由最近的實驗結果看來， $t'$  與  $t''$  其實扮演了非常重要的角色，要正確地解釋高溫超導體的機制，這兩項的效應是不可以忽略的，因此廣義 t-J 模型 (extended t-J model, 或 t-t'-t''-J model)，應比傳統的 t-J 模型更能正確描述高溫超導材料的各種物理性質[23]。

在我們過去的研究中，探討了  $t'$  與條紋相 (stripe phase) 的關係，發現在低電洞摻雜區域， $t'$  能夠降低條紋相的能量[11]；而第一原理計算的結果顯示，適當的  $t'$  與  $t''$  值能增加超導配對關聯函數的強度 [24]。

過去以 t-J 模型研究低摻雜濃度時發現，反鐵磁長程序要到電洞濃度  $\sigma_h$  約達 10% 左右才會消失[25]，然而實驗結果顯示，當電洞摻雜濃度達到將近 5% 時反鐵磁長程序就會消失。同時 t-J 模型預測，在摻雜濃度  $0 < \sigma_h < 10\%$  時，超導性與反鐵磁性共存，但是實驗並沒有觀察到這個現象。這兩點顯示在極低摻雜濃度下，過去的理论無法正確地解釋高溫超導體性質。

由以上回顧可知，到目前為止高溫超導的理論與實驗結果尚有許多現有的理論無法解釋之處，這也吸引了許多凝體物理學家持續投入這個領域的研究。本計畫這三年來，陸續回答了部分問題，將於第五節「結果與討論」中詳述。

## 四、 研究方法

本計畫採用之研究方法為解析與數值方法並行。在解析研究方面，主要以平均場理論為主，在弱耦合近似 (weak-coupling approximation) 找出在不同參數條件下較有可能之近似基態波函數。由於弱耦合近似解並不滿足 t-J 類模型必須滿足之限制條件 (每個晶格點最多只允許一個電子存在)，所得之波函數未必為真正的基態波函數，所得之序參量亦不一定反映基態的真正性質，甚至也難以估計其與真正基態波函數到底相差多遠，因此必須作更精確的計算。然而由於 t-J 類模型屬於強關聯電子系統，解析方法常用的「微擾法」並無法有系統地逼近真正的解，因此在本計畫中將不採用進一步的解析方法，而是以此平均場理論所得之近似基態波函數為起始點，稱為「嘗試波函數」(TWF, trial wave function)，在強制波函數滿足上述限制條件的情況下，有系統地逼近真正的基態波函數。

由於所求為系統之基態性質，在經由平均場理論得到嘗試波函數之後，第一步就是利用「變分蒙地卡羅模擬」(VMC, variational Monte Carlo) 方法求得在滿足限制條件下時之最佳序參量，得到最佳嘗試波函數 (optimal TWF) 之後，利用 power-Lanczos 方法，將波函數逐步逼近真正的基態，所量得的物理量也將逐漸逼近真正的基態物理量，再藉此訂出 t-J 類模型在不同參數空間之相圖，並比較與實驗及其他理論之結果。

由於高溫超導材料相當複雜，現有的模型未必能夠準確地描述此類材料，由過去的研究結果顯示，t-J 類模型可以解釋高溫超導體相當多的特性，然而有些性質 (如超導長程序的大小) 卻與實驗並不吻合，由上述所得之理論計算結果，除了有助於更加瞭解此類模型之特性外，其與實驗結果抵觸的部分，亦十分重要，可以作為修正模型之依據。

由於強關聯電子系統之計算所需之計算量十分龐大，為了有效地運用有限的計算資源，在合理的時間內得到夠精確的結果，將採取以下方法：

1. 尋找較佳的平均場理論，解出叫接近真正基態的嘗試波函數，如此可以節省計算所需時間，並減少因「費米子負號問題」所引起的統計誤差。
2. 利用大規模的平行計算主機，以高效能計算減少計算所需等待時間，如國家高速電腦中心之 IBM SP2 主機。
3. 建置個人電腦叢集 (PC Cluster)：由於蒙地卡羅模擬所需之各處理器間的資料交換較少，使用個人電腦叢集亦可得到相當好的效率。
4. 研發更新更快，可處理強關聯電子系統的數值方法。

## 五、 結果與討論

1. 針對 t-J 模型是否能得到足夠大的超導長程序來解釋高溫超導現象，在我們過去的研究中指出，雖然由平均場理論以及變分法的研究結果看來，似乎是可以解釋高溫超導，然而若利用 Power Lanczos 方法作更精確的探討時發現，超導長程序隨著波函數逼近基態而迅速衰減，故結論是 t-J 模型的基態並無法得到足夠大的超導長程序[8]。之後義大利的研究者 S. Sorella 對同一問題利用外插法所得到的結果卻是 t-J 模型足以得到夠大的超導長程序，與我們的結果矛盾[26]。我們針對這個問題作了更進一步的探討，結論是以 t-J 模型這類強關聯系統的特性而言，用外插法來預測其關聯函數（特別是超導）在基態時之特性是不可靠的。相關論文發表於文獻[27]。
2. 我們持續過去對次近鄰與再次近鄰躍遷項  $t'$  及  $t''$  的研究[11]，探討這兩項對超導長程序的影響。結果發現在最佳摻雜以及過度摻雜時，適當的  $t'$  與  $t''$  ( $0 > t' > -0.4$ ,  $t'' \sim -0.5t'$ ) 值能增加超導配對關聯函數的強度，當  $t'$  之絕對值繼續增加到  $t' < -0.4$  時，超導配對關聯函數又會迅速下降，這個結果與第一原理計算的結果吻合[24]。相關論文發表於文獻[28]。
3. 在極低摻雜濃度下，過去的理论 (t-J 以及 Hubbard 模型) 無法正確地解釋高溫超導體性質。其中的一個問題是當摻雜濃度逐漸增加時，材料如何由反鐵磁絕緣體轉變為超導態；以及這兩種狀態是否可能在同一個系統中共存。當我們將  $t'$  與  $t''$  項引入模型後，我們發現了一個新的波函數在這個區域可以得到較 t-J 模型的超導—反鐵磁共存的波函數更低的能量，這個波函數由一個小的費米面（或稱「費米包」，Fermi pocket）所定義，與傳統 t-J 模型的大費米面不同，它具有反鐵磁性但不具超導性，同時在這個廣義 t-J 模型中反鐵磁相大約在 6% 的摻雜濃度就會消失，這些結果與實驗十分吻合，也解決了這個困擾已久的問題。相關論文發表於文獻[29]。
4. 我們利用 Power Lanczos 方法，研究二維 Hubbard 模型之超導長程序發現，Hubbard 模型之基態亦無法得到足夠大的超導長程序，相關論文發表於[30]。
5. 延續文獻[28]的研究，我們針對電洞摻雜系統探討了 t-t'-t''-J 模型在各個  $t'$  與  $t''$  值之下、以及不同的波函數的超導長程序。得到沿著  $-t'+t'' \sim 0.5$  這條直線可得到較大的超導長程序，相關論文發表於[31]。
6. 延續文獻[28,29,31]之研究，我們針對電洞摻雜系統探討了在不同的  $t'$  值 ( $t'' = -0.5t'$ ) 之下，反鐵磁與超導長程序之間的轉變過程。我們發現，當  $|t'|$  較小 ( $0 > t' > -0.3t$ ) 時，超導與反鐵磁之間可以共存，當  $t' \sim -0.3t$  時，超導與反鐵磁不共存，為一階相變。因此在低摻雜區域可能存有非均勻相，相關論文發表於[32]。
7. 上述各成果，亦陸續發表於各國際會議，包括：(1) March Meeting of American Physical

Society –Austin, United States, March 2003 (2) Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides (TMO2003) – Sendai, Japan, November 2003 (3) Asia-Pacific Workshop on Strongly Correlated Systems – Hong Kong, China, June 2004 (4) Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides (TMO2004) – Sendai, Japan, November 2004。

## 六、 成果自評

本次三年計畫共發表六篇 SCI 期刊論文，其中[27]與[28]發表於 Physical Review Letters, [29]發表於 Physical Review B 中的 Rapid Communication，其 Impact Factor 分別為 7.218 以及 3.075，至今分別被引用 9, 10, 1 次。這些數據顯示本次三年計畫之研究成果除「量」方面達到預期目標之外，「質」的方面亦已受到國際同領域研究者的肯定。因此主持人自評本次計畫的研究成果是令人滿意的。

## 七、 參考文獻

- [1] J. G. Bednorz, and K. A. Muller, Z. Phys. **B64**, 189 (1986).
- [2] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Geo, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, Phys. Rev. Lett. **58**, 908 (1987).
- [3] T. K. Lee and C. T. Shih, Phys. Rev. **B55**, 5893 (1997).
- [4] R. Eder, Y. C. Chen, H. Q. Lin, Y. Ohta, C. T. Shih, and T. K. Lee, Phys. Rev. **B55**, 12313 (1997).
- [5] C. T. Shih, Y. C. Chen, and T. K. Lee, Phys. Rev. **B57**, 627 (1998).
- [6] C. T. Shih, Y. C. Chen, and T. K. Lee, Physica **C364-365**, 178 (2001).
- [7] C. T. Shih, Y. C. Chen, and T. K. Lee, J. Phys. Chem. Solid. **62**, 1797 (2001).
- [8] C. T. Shih, Y. C. Chen, H. Q. Lin, and T. K. Lee, Phys. Rev. Lett. **81**, 1294 (1998).
- [9] C. T. Shih, Y. C. Chen, and T. K. Lee, Chin. J. Phys. **38**, 300 (2000).
- [10] C. T. Shih, Y. C. Chen, and T. K. Lee, Physica **C341-348**, 113 (2000).
- [11] T. Tohyama, C. Gazza, C. T. Shih, Y. C. Chen, T. K. Lee, S. Maekawa, and E. Dagotto, Phys. Rev. **B59**, 11649 (1999).
- [12] X. G. Wen, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **76**, 503 (1996).
- [13] S. C. Zhang, Science **275**, 1089 (1997).
- [14] X. G. Wen, and P. A. Lee, Phys. Rev. **B 65**, 064526 (2002).
- [15] C. S. Hellberg, and E. Manousakis, Phys. Rev. Lett. **78**, 4609 (1997); and Phys. Rev. B **61**, 11787 (2000).
- [16] M. Calandra, F. Becca, and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **81**, 5185 (1998).
- [17] W. O. Putikka, and M. U. Luichini, Phys. Rev. B **62**, 1684 (2000).
- [18] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, and G. Rajagopal, Rev. Mod. Phys. **73**, 33 (2001).
- [19] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **77**, 3633 (1996).
- [20] S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **80**, 4558 (1998).
- [21] A. Damascelli, Z. Hussain, and Z. X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).

- [22] T. Hanaguri, C. Lupien, Y. Kohsaka, D.-H. Lee, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, and J. C. Davis, *Nature (London)*, **430**, 1001 (2004).
- [23] P. A. Lee, N. Nagaosa, X. G. Wen, cond-mat/0410445.
- [24] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 047003 (2001).
- [25] A. Himeda and M. Ogata, *Phys. Rev. B* **60**, R9935 (1999).
- [26] S. Sorella, G. B. Martin, F. Becca, C. Gazza, L. Capriotti, A. Parola, and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 117002 (2002).
- [27] T. K. Lee, C. T. Shih, H. Q. Lin, and Y. C. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 279702 (2002).
- [28] C. T. Shih, T. K. Lee, R. Eder, C. Y. Mou, and Y. C. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 227002 (2004).
- [29] C. T. Shih, Y. C. Chen, C. P. Chou, and T. K. Lee, *Phys. Rev. B* **70**, 220502(R), (2004).
- [30] H. C. Chien, Y. C. Chen and C. T. Shih, *Chin. J. Phys.* **43**, 523 (2005).
- [31] C. T. Shih, Y. C. Chen, and T. K. Lee, *Chin. J. Phys.* **43**, 543 (2005).
- [32] C. T. Shih, J. J. Wu, Y. C. Chen, C. Y. Mou, C. P. Chou, R. Eder, and T. K. Lee, *Low Temp. Phys.* **31**, 995 (2005).