

特邀综述

重整化平均场理论及其在铜氧化物 高温超导材料中的应用

易伟柱, 奚文杰, 陈伟强

南方科技大学物理系, 广东深圳, 518055

收稿日期: 2019-06-12; 接收日期: 2019-10-18

【摘要】 对铜氧化物高温超导体的研究是凝聚态物理中最重要的问题之一. 理论研究上的困难在于铜氧化物高温超导材料中单占据条件所导致的强关联效应. 铜氧化物高温超导材料可以用 t - J 模型进行描述, 而上述的单占据条件则体现于 t - J 模型中的 Gutzwiller 投影算符. 重整化平均场理论(RMFT)是一种处理这类由 Gutzwiller 投影算符所导致的强关联效应比较有效的方法. 本文首先对铜氧化物高温超导材料进行简单的介绍. 然后我们将重点介绍 Gutzwiller 近似. 最后我们会介绍重整化平均场理论, 以及其在铜氧化物高温超导材料和其他一些强关联材料中的应用.

PACS: 7460, 7490, 0290

DOI: 10.13380/j.ltpl.2020.02.001

Renormalized Meanfield Theory and its Application in High Temperature Cuprate Superconductors

YI Weizhu, XI Wenjie, CHEN Weiqiang

*Institute for Quantum Science and Engineering and Department of Physics,
Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China*

Received date: 2019-06-12; accepted date: 2019-10-18

【Abstract】 The high temperature cuprate superconductors are one of the most important field in condensed matter physics. The main theoretical difficulty in the study is the strongly correlation effect originated from the single occupation condition, which is tracked by the Gutzwiller projection in the t - J model. The renormalized mean field theory can be used to deal with the Gutzwiller projection in such kinds of situations. In this paper, we will briefly introduce the cuprate superconductor first. Then, we will focus on the Gutzwiller approximation, which is crucial for the subsequent renormalized mean-field processing. Finally, we will introduce the RMFT theory, and its application in cuprate superconductors and other strongly correlated systems.

PACS: 7460, 7490, 0290

DOI: 10.13380/j.ltpl.2020.02.001

Reference method: YI Weizhu, XI Wenjie, CHEN Weiqiang, Low. Temp. Phys. Lett. **41**, 0059 (2020)

1 引言

1986 年 Muller 和 Bednorz 发现了第一个铜氧化物高温超导体 $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ ^[1], 其超导转变温度为 30K. 由于该材料在常温下的导电性能很差, 所以这一发现格外令人吃惊. 另一个铜氧化物高温超导材料 $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ 也很快在次年被发现^[2]. 它的超导转变温度达到了 93K 之高, 远远高于当时其他的所有超导材料, 并成为当时唯一超过了液氮温度(77K)的超导材料. 这一系列的发现引起了人们的广泛兴趣. 而进一步的研究发现铜氧化物高温超导体还表现出了很多奇异的性质, 比如其超导相具有 d-波配对对称性, 这与常规超导体的 s-波对称性不同; 再如其母体材料具有反铁磁 Mott 绝缘相, 而在欠掺杂区域存在赝能隙以及费米弧等现象. 由此, 铜氧化物高温超导体的研究成为了凝聚态物理中最重要的方向之一.

直至目前, 人们已经发现了很多铜氧化物高温超导材料, 常压下的超导转变温度的记录达到了 133K^[3]. 针对铜氧化物高温超导材料尽管已经有了大量的研究, 但是其超导形成机制仍然存在争议. 目前的主流观点认为铜氧化物高温超导体的超导配对并非源于传统的 BCS 电声耦合, 而是源于电子间的强关联效应. 为了处理在这类体系中的强关联效应, 人们在理论上提出了多种处理方法. 本文将回顾其中一种较为常用的理论处理方法, 重整化平均场

(RMFT)方法.

本文的结构如下: 在第 2 节中, 我们将对铜氧化物高温超导材料进行简要地介绍. 在第 3 节中, 我们讨论与 RMFT 密切相关的近似, Gutzwiller 近似. 在第 4 节中, 我们简要地介绍 RMFT 的基本处理方法以及一些主要结果.

2 铜氧化物高温超导材料简介

铜氧化物高温超导材料具有如图 1 所示的层状结构, 其低能物理主要由其中的 CuO_2 平面决定. 在 CuO_2 面上, 铜原子形成了正方晶格, 而两个最近邻铜原子间有一个氧原子. 从电子结构上看, 其中涉及到的电子轨道主要是铜的 3d 轨道和氧的 2p 轨道. 如图 1(a) 所示, 由于铜氧八面体晶体场的作用, 五重简并的铜 3d 轨道会劈裂为两重简并的 e_g 轨道和三重简并的 t_{2g} 轨道. 而由于铜氧八面体沿 c 轴方向被拉长, e_g 轨道进一步劈裂为 $3d_{x^2-y^2}$ 和 $3d_{3z^2-r^2}$ 轨道. 在未掺杂的母体材料中铜是 +2 价, 其最外层的 3d 轨道上有 9 个电子. 因此除铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道为半填满外, 其余四个轨道都全部填满了. 而在母体材料中氧为 -2 价, 其最外层的 2p 轨道全部被填满. 由于氧的 $2p_x$ 轨道或 $2p_y$ 轨道与铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道之间存在耦合 (见图 1), 因此在讨论铜氧化物高温超导体的电子结构时, 可以只关注铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道和相应的氧 $2p_x$ 与 $2p_y$ 轨道.

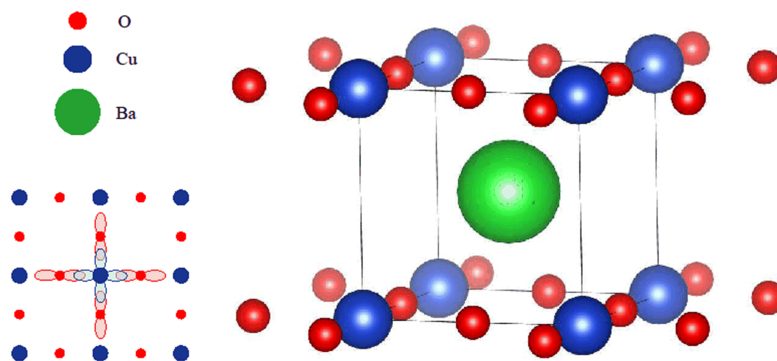


图 1 常见铜氧化物高温超导的层状结构与铜氧面轨道

在以上对母体材料的分析中, 除铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道是半填满的外, 其他轨道都是完全填满的. 根据传统的能带理论这种材料应为导体, 但实验结果却显示铜氧化物超导体的母体材料是非常好的绝缘体. 这一现象其实源于电子间的库仑相互作用. 当一个

铜原子的 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道上同时占据两个电子时, 它们之间会有很强的库仑排斥能 (通常记为 U). 这导致当铜原子的 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道上已占据一个电子时, 在此轨道上再加入一个电子所需的能量由 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道的能量 ϵ_d 变为 $\epsilon_d + U$ (如图 2(b) 所示). 在母

体材料中,平均每个铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道上占据了一个电子.当 U 足够大时,这些电子将无法在不同的铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道之间跃迁,从而导致其变成了一个绝缘体.这类绝缘体又被称为 Mott 绝缘体,而这一现象正是强关联效应的重要体现.

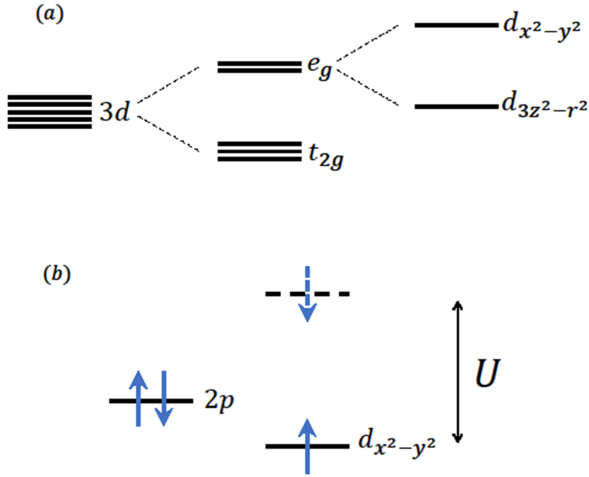


图 2 (a) 铜氧化物高温超导材料的铜 3d 轨道示意图.
(b) 在位库仑相互作用示意图

当对母体材料掺杂一定浓度的空穴后,其在低温下会进入超导相,如图 3 所示.实验上发现,这一超导相具有 d-波对称性从而属于非常规超导体.除了超导相外,掺杂后的铜氧化物超导材料还具有赝能隙,费米弧等非常丰富的物理现象.目前主流的观点认为,这样丰富的相图与母体材料中的强关联效应有密切的关系.而从电子结构上看,由于氧 $2p$ 轨道的能量要高于铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道(见图 2(b)),因此掺入的空穴并非直接进入铜的 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道,而是会先进入氧离子的 $2p_x$ 轨道和 $2p_y$ 轨道^[4].因此在考虑到在位库仑相互作用后,可以很自然的得到所谓的三带 Hubbard 模型:

$$\begin{aligned}
 H = & \mu_{d,\sigma} \sum_{i,\sigma} d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + \mu_{p,\sigma} \sum_{l,\sigma} p_{l,\sigma}^\dagger p_{l,\sigma} - \\
 & \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij}^{d,p} (d_{i,\sigma}^\dagger p_{j,\sigma} + h.c.) - \\
 & \sum_{\langle jk \rangle, \sigma} t_{jk}^{p,p} (p_{l,\sigma}^\dagger p_{j,\sigma} + h.c.) + \\
 & U_d \sum_i d_{i,\uparrow}^\dagger d_{i,\uparrow} d_{i,\downarrow}^\dagger d_{i,\downarrow} + \\
 & U_p \sum_l p_{l,\uparrow}^\dagger p_{l,\uparrow} p_{l,\downarrow}^\dagger p_{l,\downarrow}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

这里为了方便起见,我们采用了空穴图像,上式中的 $d^\dagger$ 和 d 分别是铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道上空穴的产生和湮灭算符, $p^\dagger$ 和 p 则分别是氧 $2p$ 轨道上空穴的

产生和湮灭算符. U_d 和 U_p 分别是铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道和氧 $2p$ 轨道的在位库仑排斥相互作用能. t^{dp} 和 t^{pp} 则分别是相应轨道间的跃迁积分.

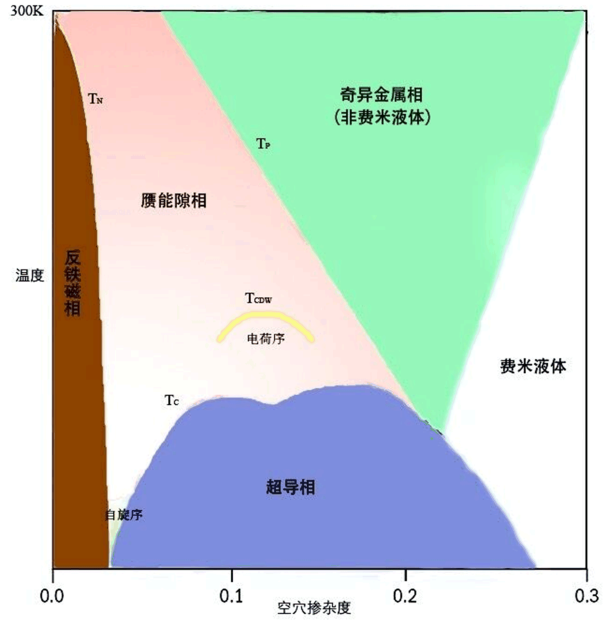


图 3 高温超导相图(示意图)

但是三带 Hubbard 模型过于复杂,难以直接处理. Anderson 认为可以用只考虑铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道的单带 Hubbard 模型来描述铜氧化物高温超导材料^[5].而张富春和 Rice 也指出氧 $2p$ 轨道上掺入的空穴会与铜 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道上的空穴形成自旋单态的束缚态,即著名的 Zhang-Rice 单态(ZRS)^[6].在考虑了 ZRS 后,张富春和 Rice 提出铜氧化物超导材料的低能有效模型为 t - J 模型,其哈密顿量为

$$\begin{aligned}
 H_{t-J} = & - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} P_G (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) P_G + \\
 & J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j \quad (2)
 \end{aligned}$$

这与单带 Hubbard 模型在强耦合情况下的低能有效理论基本相同.在这一模型中,只考虑铜格点所形成的正方晶格, i, j 为铜格点的指标,在理论上通常将 $c_{i,\sigma}$ 看作是一般意义上的电子湮灭算符, $\vec{S} = c^\dagger \vec{\sigma} c$ 为电子的自旋算符. $P_G = (1 - n_\uparrow n_\downarrow)$ 被称为 Gutzwiller 投影算符,其作用是确保同一个格点上最多只能占据一个电子,它也是 t - J 模型中强关联效应的主要来源.综上所述, t - J 模型中的 t 项描述的是单占据电子的跃迁,而 J 项则描述最近邻电子间自旋的反铁磁耦合.另外需要注意的是,由于 Zhang-Rice 单态的存在,单带 Hubbard 模型中的在位库仑排斥相互作用能 U 应是双占据态与

Zhang-Rice 单态之间的能量差,而不是三带模型中的真正的 Cu 轨道的在位库仑能.因此,铜氧化物超导材料又被称为电荷转移型 Mott 绝缘体.

从 t - J 模型中的投影算符 P_G 可以看出,未掺杂时单占据的电子无法跃迁,因此系统只剩下了自旋自由度.此时 t - J 模型退化成反铁磁 Heisenberg 模型.由于 $J > 0$,因此在低温下自旋形成反铁磁长程序,这对应于相图 3 中的反铁磁相.但是,对于如何用 t - J 模型解释掺杂后的铜氧化物超导材料的超导配对机制以及其中丰富的物理现象,目前仍然众说纷纭.理论研究上的困难主要在于如何处理 t - J 模型中的 Gutzwiller 投影算符 P_G .在本文中,我们将介绍一个可用于 t - J 模型等类似模型的理论处理方法——重整化平均场方法.这一方法主要分为两步,第一步为 Gutzwiller 近似,即用一些因子来近似投影算符 P_G 的效果.这些近似的因子也被称为 Gutzwiller 因子,或重整化因子.第二步是在 Gutzwiller 近似的基础上,用标准的平均场方法进行进一步的处理.重整化平均场理论,能够在定性上解释铜氧化物高温超导体包括 d -波对称性在内的众多实验特征,甚至能够定量的解释铜氧化物高温超导的一些相的性质.此外,重整化平均场方法也可以被应用到除铜氧化物高温超导材料外,一些其他的强关联体系中.因此它是一个非常常用的处理强关联系统的方法.

3 Gutzwiller 近似

如前所述,处理 t - J 模型的主要困难在于其中的 Gutzwiller 投影算符 P_G .它导致了希尔伯特空间中的态在同一格点上不能同时占据两个电子.这种

态的波函数难以描述,因此很难利用各种常用手段如变分法等进行研究.一个解决方案是,构造一族允许双占据的试探波函数 $|\phi_0\rangle$,然后利用 P_G 构造相应的投影波函数 $|\psi\rangle = P_G |\phi_0\rangle$.在这种情况下,某个算符 $\hat{O}$ 的期望值可用 $\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \langle\phi_0|P_G\hat{O}P_G|\phi_0\rangle$ 计算.然而这种计算仍然非常困难,需要用到数值方法如变分蒙特卡罗方法.为了解决这一问题,人们引入了 Gutzwiller 近似.

当我们求算符 $\hat{O}$ 的期望值 $\langle\hat{O}\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$ 时,我们总可以将其表示为 $\hat{O}$ 在未投影波函数 $|\phi_0\rangle$ 下的期望值 $\langle\hat{O}\rangle_0$. 乘以一个因子 $g_O \equiv \langle\hat{O}\rangle_0 / \langle\hat{O}\rangle$. 这个因子 g_O 通常被称为 Gutzwiller 因子,或者重整化因子.但是 g_O 通常非常难以计算.而 Gutzwiller 近似就是用来计算 g_O 的近似方法.在做了 Gutzwiller 近似后,我们有

$$\langle\hat{O}\rangle \approx g_O \langle\hat{O}\rangle_0 \quad (3)$$

通过这种方法我们就可以移除投影算符 P_G . Gutzwiller 近似是处理由于强关联效应而受限的希尔伯特空间的比较成功的方法.其最早被 Gutzwiller 引入,用于计算 Hubbard 模型在投影自由费米气波函数下的变分能^[7,8].此后这一方法在重费米子体系中^[9,10],以及氦 3 的研究中^[11,12],都有很成功的应用.需要注意的是对于不同的未投影波函数 $|\phi_0\rangle$,不同的算符 $\hat{O}$,相应的 Gutzwiller 因子都可能不同.而计算 Gutzwiller 因子有多种不同的近似方法,可参考文献[13-17].表 1 列出了几个有代表性的结果.下面我们介绍一个比较简单的计算方法,即张富春等人在文献[18]中所采用的希尔伯特空间计数的方法.

表 1 不同重整化方案下得到的重整化因子.需要注意的是这里我们预设了空间依赖,即含有位置指标 i, j . $x_{i,j}$ 为 i, j 位点的

掺杂度; χ_{ij} 及 δ_{ij} 为序参量.表中 $\lambda_{Fuk} = 1 - 4 \frac{\chi_{ij}^2 + \delta_{ij}^2}{(2-n_i)(2-n_j)}$,事实上此方案不能直接得到重整化因子,而是直接给出动能项和自旋交互作用项期望值,为了作横向比较,我们把它写成重整化因子的形式,这个结果我们取体系没有磁序及自旋单态配对;此外 $\lambda_{Sig} = \frac{8(1-x_i x_j)|\chi_{ij}|^2 + 16|\chi_{ij}|^4}{(1-x_i)(1-x_j)}$, $\gamma_{Sig} = \frac{8x_i x_j(|\delta_{ij}|^2 - |\chi_{ij}|^2) + 16(|\delta_{ij}|^4 + |\chi_{ij}|^4)}{(1-x_i)(1-x_j)}$.

重整化因子	基于 Gutzwiller 的结果	Fukushima 等人的结果 ^[16]	Sigrist 等人的结果 ^[15]
g_t^{ij}	$\sqrt{\frac{4x_i x_j}{(x_i+1)(x_j+1)}}$	$\lambda_{Fuk} \sqrt{\frac{4x_i x_j}{(x_i+1)(x_j+1)}}$	$\sqrt{\frac{4x_i x_j}{(x_i+1)(x_j+1) + \lambda_{Sig}}}$
$g_{t,XY}^{ij}$	$\frac{4}{(x_i+1)(x_j+1)}$	$\frac{4}{(x_i+1)(x_j+1)}$	$\frac{4}{(x_i+1)(x_j+1) + \gamma_{Sig}}$
$g_{s,Z}^{ij}$	$\frac{4}{(x_i+1)(x_j+1)}$	$\frac{4}{(x_i+1)(x_j+1)}$	$\frac{4}{(x_i+1)(x_j+1) + \gamma_{Sig}}$

这一方法主要是通过计算具体的物理过程在投影前以及投影后出现的概率来计算 Gutzwiller 因子 (可参考综述文章^[8]). 例如, 我们考虑算符 $c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}$ (即 t - J 模型中的动能项) 对应的 Gutzwiller 因子 $g_{t,i\uparrow}$, 这个算符描述的是一个自旋向上的电子从格点 j 跳跃到格点 i 的过程. 在投影前的希尔伯特空间中, 其要求电子分布的初始构型在格点 j 上占据一个自旋向上的电子而格点 i 上没有自旋向上的电子, 而最终构型为格点 j 上没有自旋向上的电子格点 i 上占据一个自旋向上的电子, 这对应图 4 中的所有物理过程. 如果忽略电子密度之间的关联, 那么这类构型出现的概率可以近似为

$$P_0 = [(1 - n_{i\uparrow}^0) n_{j\uparrow}^0 n_{i\uparrow}^0 (1 - n_{j\uparrow}^0)]^{1/2},$$

其中 $n_{i\sigma}^0$ 为投影前格点 i 上自旋为 σ 电子的占据数, 可以看作是自旋为 σ 的电子出现在这一格点上的概率. 上式中的 $1/2$ 源于波函数对应的是几率幅而非几率.

相应的, 在投影后的希尔伯特空间中, 由于不允许双占据构型的存在, 这一算符对应的物理过程只有图 4(a) 中的过程, 即初始构型在格点 j 上只有一个自旋向上的电子格点 i 上没有电子, 而最终构型为格点 j 上没有电子格点 i 上只有一个自旋向上的

电子. 那么这类构型出现的概率为

$$P = [n_{j\uparrow} (1 - n_i) n_{i\uparrow} (1 - n_j)]^{1/2}, \quad (4)$$

这里的 $n_{i\sigma}$ 为投影后格点 i 上自旋为 σ 电子的占据数, $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ 为格点 i 上电子的占据数. 以上两个概率的比值就给出了相应的 Gutzwiller 因子 $g_{t,i\uparrow}$ 的近似值, 即

$$g_{t,i\uparrow} \approx \frac{P}{P_0} = \left[\frac{n_{j\uparrow} (1 - n_i) n_{i\uparrow} (1 - n_j)}{(1 - n_{i\uparrow}^0) n_{j\uparrow}^0 n_{i\uparrow}^0 (1 - n_{j\uparrow}^0)} \right]^{1/2} \quad (5)$$

为了推导 $n_{i\sigma}$ 与 $n_{i\sigma}^0$ 的关系, 我们假设 $|\psi_0\rangle$ 具有确定的粒子数. 显然, 投影波函数 $|\psi\rangle$ 必然具有相同的粒子数. 如果我们考虑的波函数对应于一个均匀系统, 这意味着 $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} = n_i^0 = n_{i\uparrow}^0 + n_{i\downarrow}^0 = 1 - \delta$, 这里的 δ 是铜氧面内掺杂的空穴浓度. 注意到, $n_{i\sigma} \propto n_{i\sigma}^0 (1 - n_{i-\sigma}^0)$, 我们可以得到^[8]

$$n_{i\sigma} = n_{i\sigma}^0 (1 - n_{i-\sigma}^0) \frac{n}{n - 2n_{i\uparrow}^0 n_{i\downarrow}^0} \quad (6)$$

如果格点上不存在净磁矩, 我们有 $n_{i\uparrow} = n_{i\downarrow} = n_{i\uparrow}^0 = n_{i\downarrow}^0 = (1 - \delta)/2$, 由此可以得到 Gutzwiller 因子 g_t

$$g_{t,i\uparrow} = g_{t,i\downarrow} = g_t = \frac{2\delta}{1 + \delta} \quad (7)$$

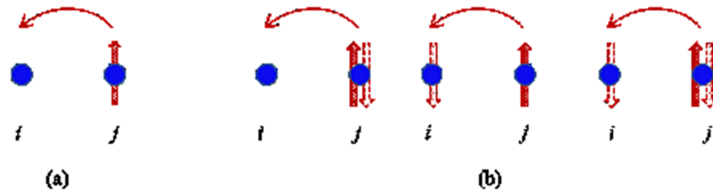


图 4 (a) 自旋向上电子从位点 j 跳跃到点 i 的过程, 此时只允许单占据, 对应于投影后的波函数.

(b) 投影前的波函数中, 除(a)外其他的自旋向上电子从位点 j 跳跃到点 i 的过程.

对于自旋算符 $S_i \cdot S_j$ 来说, 其对应的物理过程要求初始构型和最终构型在格点 i 和格点 j 上都能占据一个电子. 因此, 用以上方法可以很容易得到在格点上没有净磁矩时, 这一算符对应的重整化因子为

$$g_s = \frac{4}{(1 + \delta)^2} \quad (8)$$

当掺杂浓度很小时, 系统具有反铁磁长程序. 我们假设在 A 子格上有磁矩 m , 而在 B 子格上有磁矩 $-m$, 于是我们有 $n_{A\uparrow}^0 = n_{B\downarrow}^0 = \frac{n}{2} + m$, $n_{A\downarrow}^0 = n_{B\uparrow}^0 = \frac{n}{2} - m$. 于是我们可以得到如下重整化因子

$$g_t = \frac{2\delta(1 - \delta)}{1 - \delta^2 + 4m^2}, \quad g_s = \frac{4(1 - \delta)^2}{(1 - \delta^2 + 4m^2)^2}. \quad (9)$$

但是上述因子所对应的平均场结果无法给出正确的反铁磁相. Masao Ogata 等人在考虑了更多的细节, 并经过较为繁琐的计算后, 得到了更为复杂的 Gutzwiller 因子的形式^[19,20]

$$g_s^{xy} = \left(\frac{2(1 - \delta)}{1 - \delta^2 + 4m^2} \right)^2 a^{-7}$$

$$g_s^z = g_s^{xy} \frac{1}{4m^2 + X_2} [X_2 + 4m^2 \{1 + \frac{6X_2(1 - \delta)^2}{1 - \delta^2 + 4m^2} a^{-3}\}^2]$$

$$g_t = \frac{2\delta(1 - \delta)}{1 - \delta^2 + 4m^2} \frac{(1 + \delta)^2 - 4m^2 - 2X_2}{(1 + \delta)^2 - 4m^2} a \quad (10)$$

其中,

$$a = 1 + \frac{4X}{(1 - \delta^2 + 4m^2)^2}$$

$$X = 2\delta^2(\delta_0^2 - \chi_0^2) + 8m^2(\chi_0^2 + \delta_0^2) + 4(\chi_0^2 + \delta_0^2)^2$$

$$X_2 = 2(\chi_0^2 + \delta_0^2)$$

χ_0 与 δ_0 为平均场 (见下一节). 基于这个形式的重整化平均场理论的结果与变分蒙特卡洛模拟的结果吻合的非常好^[19]. 在针对其他具体的材料计算时, 还可以考虑引入更多的细节. 例如, 对于局域粒子数不守恒, 我们需要引入粒子逃逸率; 通过引入参数 α 来控制双占据的比例等等. 这些处理原则上并没有偏离上文介绍的思想, 在此就不详细讨论了, 有兴趣的读者可以参考文献[17, 21].

4 重整化平均场理论

t - J 模型的重整化平均场理论最早是由张富春等人于 1988 年给出的^[18]. 这一理论本质上是一个变分方法. 考虑一族投影波函数 $|\psi\rangle = P_G |\phi_0\rangle$, 利用 Gutzwiller 近似我们可以得到这族波函数的变分能量

$$H_{eff} = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (g_{it} + \frac{3g_s J \chi_0}{8}) (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) -$$

$$\frac{3g_s J \delta_0}{8} \sum_i (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+x\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+x\uparrow} - c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+y\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+y\uparrow} + h.c.) - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (15)$$

其中引入参数 μ 是为了确保正确的粒子数. 由此可以得到投影前的波函数为 BCS 波函数

$$|\phi_0\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \quad (16)$$

其中 $|0\rangle$ 表示真空. 参数 u_k 和 v_k 满足

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\zeta_k}{E_k}\right), \quad |v_k|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\zeta_k}{E_k}\right), \quad u_k v_k^* = \frac{\delta_k}{2E_k}, \quad (17)$$

这里 $E_k = \sqrt{\zeta_k^2 + \delta_k^2}$, $\delta_k = \frac{3g_s J \delta_0}{4} (\cos k_x - \cos k_y)$, $\zeta_k = -(2g_t t + \frac{3g_s J}{4} \chi_0) (\cos k_x + \cos k_y) - \mu$. 将以上波函数带入平均场的定义 (式(12)), 可以得到自治方程

$$\begin{aligned} \Delta_0 &= \frac{1}{L} \sum_k (\cos k_x - \cos k_y) \frac{\delta_k}{2E_k} \\ \chi_0 &= -\frac{1}{L} \sum_k (\cos k_x + \cos k_y) \frac{\zeta_k}{2E_k} \end{aligned} \quad (18)$$

以及粒子数约束条件

$$\delta = \frac{1}{L} \sum_k \frac{\zeta_k}{E_k} \quad (19)$$

$$E = \langle \psi | H_{tJ} | \psi \rangle \simeq$$

$$-g_t t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \rangle_0 + g_s J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S_i \cdot S_j \rangle_0 \quad (11)$$

其中 $g_t = 2\delta/(1+\delta)$, $g_s = 4/(1+\delta)^2$, $\langle \rangle_0$ 表示未投影波函数 $|\phi_0\rangle$ 下的期望值. 接下来引入平均场

$$\Delta_r^0 \equiv \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+r\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+r\uparrow} \rangle_0, \quad \chi_r^0 \equiv \sum_\sigma \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i+r\sigma} \rangle_0, \quad (12)$$

这里 $r = x, y$ 分别对应于 x 方向和 y 方向的键. 我们只关心均匀的 d -波超导情况, 因此可以进一步将平均场简化为

$$\Delta_x^0 = -\Delta_y^0 = \Delta_0, \quad \chi_x^0 = \chi_y^0 = \chi_0 \quad (13)$$

在选择合适的规范后, Δ_0 和 χ_0 可以都表示成实数, 于是我们有

$$\frac{E}{N} \simeq -4g_t t \chi_0 - \frac{3g_s J}{4} \chi_0^2 - \frac{3g_s J}{4} \Delta_0^2 \quad (14)$$

接下来采用标准的平均场方法, 我们可以得到有效哈密顿量

其中 δ 为给定的掺杂浓度. 另外需要注意的是以上讨论的平均场都是在未投影波函数下的期望值. 真正的超导相的序参量 δ_{SC} 应是投影波函数下的期望值. 根据 Gutzwiller 近似, 我们有

$$\Delta_{SC} \simeq g_t \delta_0. \quad (20)$$

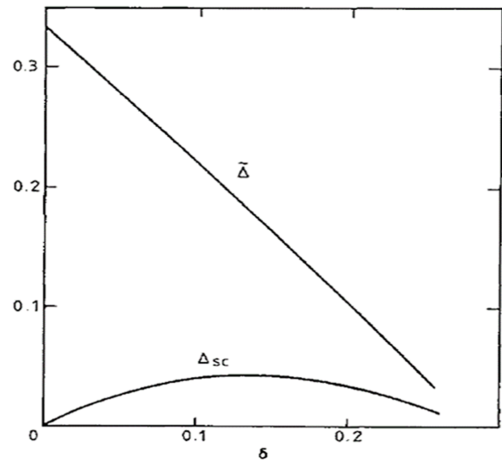


图 5 RMFT 计算得到的不同掺杂浓度时平均场 Δ_0 (图中的 Δ) 以及超导序参量 Δ_{SC} 的结果. 这里取了 $t/J = 5$. 图取自文献[18]

图 5 中所示的是张富春等人计算的 $t/J = 5$ 的结

果. 这一结果与式(16)这类波函数的变分蒙特卡洛的结果吻合得很好. 此外, 从图 5 中可以看出, 虽然平均场 Δ_0 随着掺杂浓度 δ 的增加单调下降, 但是超导序参量有一个先升后降的过程, 这与相图 3 中 T_c 的行为在定性上非常类似. 而超导序参量最大的位置所对应的掺杂浓度 (与 t/J 的参数相关) 也与最佳掺杂的掺杂浓度相差不大. 因此, RMFT 的结果能够在定性上对铜氧化物超导体的超导相有一个比较好的描述.

上述我们讨论的是最简单的情况, 不存在磁性长程序, 空间均匀, 而且只考虑了最近邻格点间的跃迁. 而在更复杂的情况下, 需要对以上的计算进行推广. 例如, 很多时候需要考虑次近邻跃迁项, 即所谓的 $t-t'-J$ 模型, 为此需要引入对应 t' 项的 Gutzwiller 因子. 另外在小掺杂情况中, 系统中存在反铁磁长程序, 需要对以上的 Gutzwiller 因子进行修改. 在介绍 Gutzwiller 近似时我们给出了相应的重整化因子 (见式 9). 但是按照 RMFT 的标准流程, 从这一组因子中我们无法得到正确地反铁磁相. 而 Ogata 与 Himeda 在考虑了更大的团簇中的物理过程后, 得到了更为复杂的 Gutzwiller 因子 (见式 10), 并成功的得到了与变分蒙特卡洛结果基本一致的 RMFT 结果^[19,20]. 此外, RMFT 也可以用于研究空间非均匀的情况, 如条纹相, 电荷密度波, 多层材料, 杂质态等等. 此时在做 Gutzwiller 近似时需要考虑 Gutzwiller 投影算符的空间依赖^[22,23]. 利用这种方法研究的条纹相^[23], 多层铜氧化物材料^[24], 磁性和非磁性杂质^[25,26], 非公度电荷序^[27,28], 无序^[29], 以及涡旋的演化^[30] 等都与实验符合的较好.

RMFT 还可以应用到其他一些模型上. 例如从单带 Hubbard 模型出发, 在强耦合情况下, 利用二阶微扰理论可以得到如下有效哈密顿量

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Hub} = & - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} P_G (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) P_G + \\ & J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j - \frac{1}{4} n_i n_j) - \\ & \frac{J}{4} \sum_{j, r \neq r', \sigma} P_G (c_{j,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{j+\tau,\sigma}^\dagger c_{j+\tau',\sigma} + c_{j+\tau,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}) P_G. \end{aligned} \quad (21)$$

通常来说, 人们都会忽视第二项中的 $n_i n_j / 4$ 项以及最后的三点跳跃项, 从而得到 $t-J$ 模型. 但是, Edegger 等人利用重整化平均场的方法考虑了这两项的影响. 他们推导了三点跳跃项的 Gutzwiller 因

子^[17], 然后计算了多个物理量并与实验结果进行了比较^[31]. 从图 6 中可以看到, 在动量空间 $k = (\pi, 0)$ 处的超导能隙的 RMFT 结果与 Bi2212 实验结果在两倍缩放的情况下相符较好. 偏差的原因来源于 RMFT 忽略了长程关联和空穴移动的影响. 此外他们还计算了费米速度 v_F , 并分别与 LSCO^[32], YBCO^[33], Bi2212^[34] 等材料的实验结果进行了对比, 发现符合的很好 (见图 7).

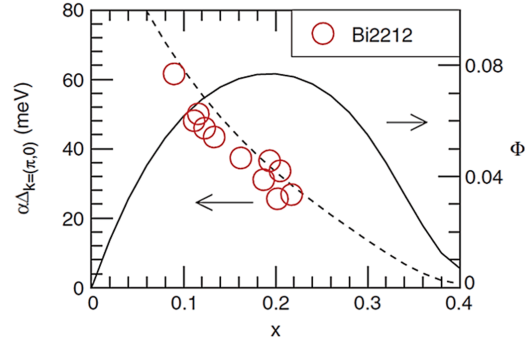


图 6 超导能隙 Δ (虚线表示, 左边刻度) 及序参量 Φ (实线表示, 右边刻度) 的掺杂依赖 ($k = (\pi, 0)$, $t = 300$ meV) 与 Bi2212 实验^[35] 的对照 (刻度缩小 1/2), 图取自文献^[31]

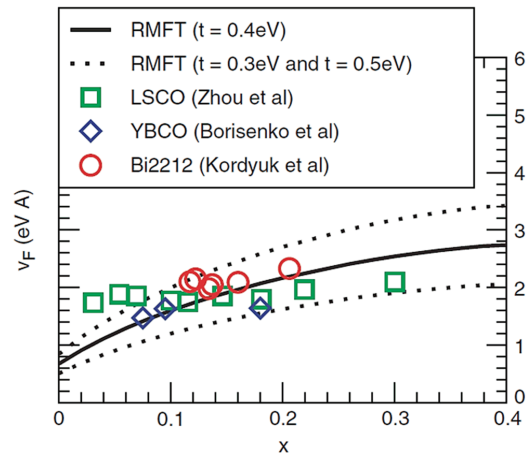


图 7 费米速度对掺杂依赖图, RMFT 与实验的对比. 图取自文献^[31]

除了铜氧化物超导材料外, 重整化平均场理论还可以用于其他的强关联体系. 例如张富春等人用 RMFT 对 Gossamer 超导体进行了研究^[36]. 与铜氧化物超导材料不同, Gossamer 超导体中的 U 要小一些, 因此允许存在部分的双占据情况. 这种体系可以用 $t-J-U$ 模型进行描述. 由于允许部分的双占据情况, 因此与常规处理办法不同, 在进行 Gutzwiller 投影时, 对双占据态仅进行部分投影, 相应的投影算符写为 $P_G = (1 - \alpha n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})$. 用与前面类似的方

法,就可以求得部分投影下的 Gutzwiller 因子. 相应的 RMFT 理论预测了在半填充的极限下随着 U 的增大,体系会经历一个从 Gossamer 超导体到莫特绝缘体的一级相变. 而在掺杂后,他们的结果表明 Gossamer 超导相可以连续的变化到 RVB 超导相^[36,37]. 若再引入次近邻的跃迁项(即 t - t' - J - U 模型),RMFT 的结果变化不大,这作为一个定性模型能够较好描述层状有机超导材料的实验^[38]. 相同的方法也被应用到了其他的高温超导体系^[39-41].

在 t - J - U 模型基础上再加入最近邻格点间的库仑相互作用项 V ,则变为 t - J - U - V 模型, M. Abram 等用 RMFT 计算得到,随着 V 的增大,该体系更倾向于电荷密度波的相,超导相受到压制^[42]. H. X. Huang 等人用 RMFT 研究了 Shastry-Sutherland 格点和 checkerboard 格点的 t - t' - J - J' 模型,即计入了次近邻的 hopping 和自旋相互作用的 t - J 模型. 这是有阻挫的体系,会阻碍某些配对序的形成. 通过定义 $\eta=t'/t$,作者得到了在体系的各种配对序与 η 的依赖关系^[43,44]. 如果在层状有机超导化合物中引入各向异性,该体系则应该用 t - t' - J - J' - U 模型描述,随着 U 的增大,该体系同样会有从超导到莫特绝缘体的转变,各向异性则影响了超导配对的对称性^[45].

以上的研究都是针对正方晶格的. 随着石墨烯的发现,人们对六角晶格体系产生了浓厚的兴趣. Shih-Jye Sun 等人研究了 Kane-Mele t - J 模型,作为一个掺杂的量子自旋霍尔绝缘体,RMFT 的结果

显示,当时间反演对称性保护时,会有无能隙的双手性 Majorana 边界态,而打破时间反演对称性,则变到一个手征边界态^[46]. 此外,还有人基于 RMFT 类似的方法研究了最近热门的双层转角石墨烯^[47,48].

5 总 结

在本文中,我们简要地介绍了 Gutzwiller 近似和重整化平均场理论,以及它们在铜氧化物高温超导体等强关联材料中的应用. 这一方法的基本思想是用一些 Gutzwiller 重整化因子来替代难以处理的 Gutzwiller 投影,然后采用标准的平均场方法对模型进行进一步的处理. 这一方法本质上是一种变分方法,其优势在于可以通过选择合适的变分态抓住相当一部分重要的物理,特别是有序相的物理. 而且,这一方法具有比较清晰的物理图像. 但是,此方法也有一些缺点. 由于本质上是变分方法,因此,对于激发态以及不存在长程有序的态,重整化平均场的处理效果较差. 而且在计算重整化因子时,我们通常会忽略一部分关联效应,这也导致这一方法对某些实验现象的描述并不理想. 相较于 RMFT 来说,同样基于变分原理的张量网络数值计算方法可以获得更为准确的结果. 在张量网络方法中,人们考虑了更为复杂也更为一般的变分波函数. 为了处理这样的波函数,人们发展了很多具体的手段. 由于张量网络方法超过了本文的范围,在此便不再赘述.

致谢 我们感谢与张富春教授的讨论以及肖荣对绘图提供的建议和帮助.

参 考 文 献

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter 64, 189 (1986).
- [2] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, Phys. Rev. Lett. 58, 908 (1987).
- [3] A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo, and H. R. Ott, Nature 363, 56.
- [4] V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. 58, 2794 (1987).
- [5] P. W. Anderson, Science 235, 1196 (1987).
- [6] F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B 37, 3759 (1988).
- [7] M. C. Gutzwiller, Physical Review Letters 10, 159 (1963).
- [8] B. Edegger, V. N. Muthukumar, and C. Gros, Advances in Physics 56, 927 (2007).
- [9] T. Rice and K. Ueda, Physical review letters 55, 995 (1985).
- [10] T. Rice and K. Ueda, Physical Review B 34, 6420 (1986).
- [11] D. Vollhardt, P. W. Little, and P. Anderson, Physical Review B 35, 6703 (1987).
- [12] D. Vollhardt, Reviews of Modern Physics 56, 99 (1984).
- [13] M. Ogata, Journal of the Physical Society of Japan 72, 1839 (2003).
- [14] F. Gebhard, Physical Review B 41, 9452 (1990).
- [15] M. Sigrist, T. Rice, and F. Zhang, Physical Review B 49, 12058 (1994).
- [16] N. Fukushima, Physical Review B 78, 115105 (2008).
- [17] B. Edegger, N. Fukushima, C. Gros, and V. Muthukumar,

- Physical Review B 72, 134504 (2005).
- [18] F. —C. Zhang, C. Gros, T. M. Rice, and H. Shiba, Superconductor Science and Technology 1, 36 (1988).
- [19] A. Himeda and M. Ogata, Phys. Rev. B 60, R9935 (1999).
- [20] M. Ogata and A. Himeda, Journal of the Physical Society of Japan 72, 374 (2003).
- [21] M. Ogata and H. Fukuyama, Reports on Progress in Physics 71, 036501 (2008).
- [22] Q. —H. Wang, Z. Wang, Y. Chen, and F. —C. Zhang, Physical Review B 73, 092507 (2006).
- [23] K. —Y. Yang, W. Q. Chen, T. M. Rice, M. Sigrist, and F. —C. Zhang, New Journal of Physics 11, 055053 (2009).
- [24] W. —Q. Chen, J. Y. Gan, T. M. Rice, and F. C. Zhang, EPL (Europhysics Letters) 98, 57005 (2012).
- [25] H. Tsuchiura, Y. Tanaka, M. Ogata, and S. Kashiwaya, Physical review letters 84, 3165 (2000).
- [26] H. Tsuchiura, Y. Tanaka, M. Ogata, and S. Kashiwaya, Physical Review B 64, 140501 (2001).
- [27] J. Hou, T. —K. Lee, J. Lou, and Y. Chen, Physical Review B 100, 144516 (2019).
- [28] P. Choubey, W. —L. Tu, T. —K. Lee, and P. Hirschfeld, New Journal of Physics 19, 013028 (2017).
- [29] A. Ghosal, D. Chakraborty, and N. Kaushal, Physica B: Condensed Matter 536, 867 (2018).
- [30] P. Anderson, Physical review letters 96, 017001 (2006).
- [31] B. Edegger, V. Muthukumar, C. Gros, and P. Anderson, Physical review letters 96, 207002 (2006).
- [32] X. . J. Zhou, T. Yoshida, A. Lanzara, P. Bogdanov, S. Kellar, K. Shen, W. Yang, F. Ronning, T. Sasagawa, T. Kakeshita, et al. , Nature 423, 398 (2003).
- [33] S. Borisenko, A. Kordyuk, V. Zabolotnyy, J. Geck, D. Inosov, A. Koitzsch, J. Fink, M. Knupfer, B. Büchner, V. Hinkov, et al. , Physical review letters 96, 117004 (2006).
- [34] A. Kordyuk, S. Borisenko, A. Koitzsch, J. Fink, M. Knupfer, and H. Berger, Physical Review B 71, 214513 (2005).
- [35] J. Campuzano, M. Norman, and M. Randeria, in The Physics of Superconductors (Springer, 2004) pp. 167 – 273.
- [36] F. Zhang, Physical review letters 90, 207002 (2003).
- [37] J. Gan, F. Zhang, and Z. Su, Physical Review B 71, 014508 (2005).12
- [38] J. Gan, Y. Chen, Z. Su, and F. Zhang, Physical review letters 94, 067005 (2005).
- [39] T. Kope , Physical Review B 70, 054518 (2004).
- [40] F. Yuan, Q. Yuan, and C. Ting, Physical Review B 71, 104505 (2005).
- [41] B. Powell and R. H. McKenzie, Physical review letters 94, 047004 (2005).
- [42] M. Abram, M. Zegrodnik, and J. Spaček, Journal of Physics: Condensed Matter 29, 365602 (2017).
- [43] H. —X. Huang, Y. Chen, Y. Gao, and G. Yang, Physica C: Superconductivity and its Applications 525, 1 (2016).
- [44] H. —X. Huang, Y. —Q. Li, J. —Y. Gan, Y. Chen, and F. —C. Zhang, Phys. Rev. B 75, 184523 (2007).
- [45] J. Y. Gan, Y. Chen, and F. C. Zhang, Phys. Rev. B 74, 094515 (2006).
- [46] S. —J. Sun, C. —H. Chung, Y. —Y. Chang, W. —F. Tsai, and F. —C. Zhang, Scientific reports 6, 24102 (2016).
- [47] M. Fidrysiak, M. Zegrodnik, and J. Spaček, Physical Review B 98, 085436 (2018).
- [48] X. Gu, C. Chen, J. N. Leaw, E. Laksono, V. M. Pereira, G. Vignale, and S. Adam, Phys. Rev. B 101, 180506 (2020).