arXiv:2303.08376v1 [cond-mat.supr-con] 15 Mar 2023

哈伯德模型中超导性与部分填充条纹的共存

Hao Xu,[1], ∗*Chia-Min Chung,*[2,3,4], ∗*Mingpu Qin,*[5] *Ulrich Schollw¨ock,*[6,7] *Steven R. White,*[8] 和 *Shiwei Zhang*[9]

[1] *Department of Physics, College of William and Mary, Williamsburg, Virginia 23187, USA* [2] *Department of Physics, National Sun Yat-sen University, Kaohsiung 80424, Taiwan* [3] *Center for Theoretical and Computational Physics, National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung 80424, Taiwan* [4] *Physics Division, National Center for Theoretical Sciences, Taipei 10617, Taiwan* [5] *Key Laboratory of Artificial Structures and Quantum Control,School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China* [6] *Arnold Sommerfeld Center for Theoretical Physics, Ludwig-Maximilians-Universität München, 80333 Munich, Germany*

[7] *Munich Center for Quantum Science and Technology (MCQST), 80799 Munich, Germany*

[8] *Department of Physics and Astronomy, University of California, Irvine, California 92697, USA*

[9] *Center for Computational Quantum Physics, Flatiron Institute, New York, NY 10010, USA*

结合两种最强大的现代计算方法各自互补的优势，我们发现二维哈伯德模型（含次近邻跃迁）在电子掺杂区和空穴掺杂区均存在超导性。在电子掺杂区，超导性较弱，并在低掺杂时伴有反铁磁 N´eel 关联。空穴掺杂侧的强超导性与条纹序共存；条纹序在过掺杂区域仍然存在，但空穴密度调制较弱。这些条纹序既不像纯哈伯德模型（无次近邻跃迁）中的条纹那样完全填充，也不像先前最先进计算所发现的那样半填充，其填充率介于 0.6 和 0.8 之间。要分辨竞争序之间极小的能量尺度，需要极高的计算精度，并结合对多种系统尺寸和边界条件的平均与外推。这些结果验证了这一经典模型在描述铜酸盐高温超导性方面的适用性。

I. 引言

哈伯德模型能否从定性上捕捉高温超导铜氧化物的本质物理？自这些材料被发现后不久，这个问题便一直备受争论 [1–10]。几十年来，越来越清楚的是，答案必须来自足够强大的模拟，能够对模型的性质给出确定性结果，从而判断这些性质是否与实验观测相符。事实证明，这尤其困难，因为研究表明，模型的基态对模型项和参数的微小变化异常敏感，不同电荷、自旋 [13], 和超导（SC）序之间可能相互竞争 [11] ，也可能相互协同 [12] [14–18]。相关模型参数处于最难处理的区域——中等强耦合区——大多数方法在此都难以奏效。基态中条纹的频繁出现，使得将结果外推至热力学极限所需的团簇尺寸不断增大。

一种强有力的方法应运而生，有助于克服这些困难：结合使用优势与不足互补的模拟方法[19]。密度矩阵重整化群（DMRG） [20–22] 应用于较窄的圆柱 [23]时，能够提供最准确、可靠的结果。其他方法则直接在热力学极限 [24, 25]下开展计算，或至少应用于宽得多的团簇 [26], ，但会受到与晶胞尺寸[24, 27, 28], 、耦合强度等 [25, 29, 30]相关的近似影响。约束路径（CP）辅助场量子蒙特卡洛（AFQMC）方法[26, 31, 32]与DMRG尤其互补：它可用于宽得多的系统；用于控制符号问题的CP误差始终较小 [19]；而且CP的基本近似与DMRG的低纠缠近似并无关联。AFQMC以斯莱特行列式叠加的波动图像为基础，而DMRG则植根于强耦合下的粒子图像。正如下文所述，两者在定量上的相互印证对于揭示条纹关联的微妙本质至关重要。此前，我们结合使用这两种方法，并外推至二维热力学极限，发现纯哈伯德模型（即没有次近邻跃迁）中不存在超导性 [11]。在这种情况下，超导性的缺失与填充条纹态的出现有关 [33]。

在这里，我们采用这一方法并加以改进，以研究具有非零次近邻跃迁 t' 的哈伯德模型。结合铜氧化物的典型相图来看，非零的 t' 对于解释粒子-空穴不对称性和能带结构是必要的。 $t' \neq 0$ 模型在计算上要困难得多，密度矩阵重整化群和辅助场量子蒙特卡罗都面临挑战。在两种方法均适用的情况下，密度矩阵重整化群证实了本文所用辅助场量子蒙特卡罗方法的高精度和可靠性。如下文所述，在存在歧义的情况下（例如在一些宽度为6的圆柱中），解决这些分歧

*这两位作者对本研究的贡献相同。

往往能在这两种方法之间催生新的协同效应，并带来新的认识。含有 t' 的相图也显得复杂得多：在空穴掺杂侧，部分填充条纹与超导性共存；而在电子侧，均匀反铁磁序与超导性共存。将超导性的最终结果外推至热力学极限后，其性质与铜氧化物惊人地相似：电子掺杂和空穴掺杂两侧均出现超导“穹顶”，但空穴掺杂侧的超导性明显更强。

哈伯德模型的哈密顿量为

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma} - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \tag{1}$$

其中，i 或 j 表示正方晶格上的一个格点，$\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}$ 是电子产生算符，$\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ 表示自旋，$\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma}$ 是粒子数算符，而 $\langle ij \rangle$和 $\langle\langle ij \rangle\rangle$ 分别表示最近邻和次近邻。我们设 t 为能量单位。在铜氧化物中$t' < 0$ [34]；然而，通过使用粒子-空穴变换将填充数映射为 $1+\delta \to 1-\delta$，我们可以通过改变 t'的符号来研究电子掺杂。对于空穴掺杂，我们采用 $t' = -0.2$ ；对于电子掺杂，则采用 $t' = +0.2$ ，这些值依据能带结构计算[35, 36]，适用于铜氧化物。格点内排斥 U 固定为 $U = 8$，这同样是铜氧化物的代表性取值。我们通过改变 μ扫描一系列掺杂量（记为 δ）。

我们的研究聚焦于基态，并在圆柱系统或完全周期性系统中求得该状态。使用圆柱有两个目的。首先，圆柱使我们能够直接比较辅助场量子蒙特卡罗（AFQMC）与密度矩阵重整化群（DMRG）；后者在窄圆柱中具有很高的精度。其次，圆柱便于研究自旋与电荷序：我们在圆柱边缘施加自旋对称性破缺钉扎场，以帮助根据由此产生的局域自旋与电荷密度探测序。完全周期性的模拟晶胞则使 AFQMC 能够更好地逼近热力学极限（TDL）。如下文所示，对不同边界条件进行系统平均至关重要。为计算配对序参量，我们在含有多达 500 个晶格位点的系统中，对大量随机扭曲采用扭曲平均边界条件（TABC）。只有通过两种方法中的新算法发展，本文所报告的计算才成为可能；这些发展提升了计算能力并提高了精度，详情将在方法部分进一步讨论。

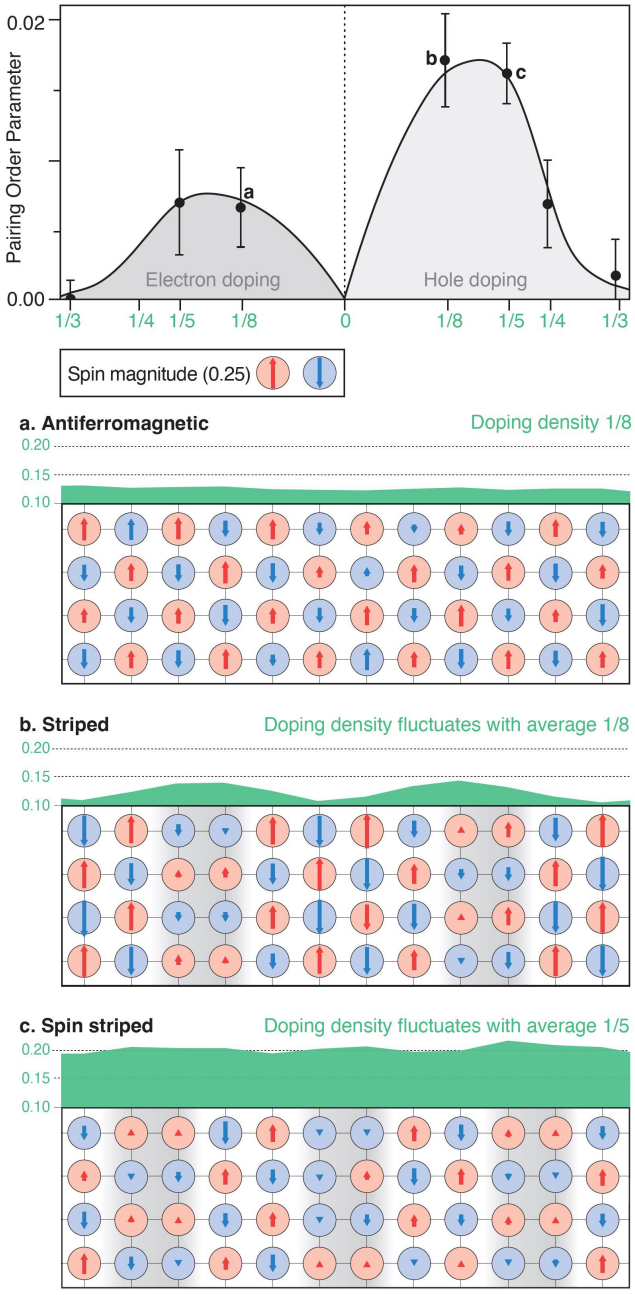

图1：基态中 d-波配对序参量随掺杂 δ 的变化，分别对应空穴掺杂（$t' = -0.2$）和电子掺杂（$t' = +0.2$）区域。图中还展示了参数组 a、b 和 c 的代表性自旋与电荷关联。 Δ_d 表示热力学极限下的自发配对序，而自旋与电荷（空穴）图样则取自施加反铁磁自旋钉扎场的圆柱中部，分别对应 28×8（a）、24×8（b）和 40×8（c）。注意，空穴密度从 0.1 开始。自旋的灰色阴影仅用于辅助观察。

II. 结果

A. 配对与自旋/电荷序共存概述

图 1 概述了我们的结果：计算得到的配对序参量“相图”，以及具有代表性的自旋与电荷关联。配对序参量是在大型模拟晶胞中采用完整 TABC 外推至热力学极限的（见方法部分和补充材料）。我们预计，这一零温性质与转变温度 T_c 存在较为松散的联系；实验上最容易观测到的是后者（不过，见 [37, 38]）。在电子掺杂侧和空穴掺杂侧，我们都发现了穹顶状的 d-波配对序，与铜氧化物典型相图中的 T_c 穹顶相似。空穴掺杂区域的配对序显著强于电子掺杂区域，这也与铜氧化物的相图一致 [39]。图中展示了标记为 a、b、c 的三个代表性系统的自旋与空穴密度。这些计算采用了施加于圆柱模拟晶胞边缘的反铁磁钉扎场（详见补充材料）。因此，自旋与空穴密度提供了一种简单、方便的方式来直观呈现自旋与电荷关联。我们确保结果来自极大的系统，并且自旋与电荷图样能够代表不同边界条件下的情况。在电子掺杂区域，自旋呈现单畴反铁磁性，体相中的空穴密度则几乎均匀。在空穴掺杂区域，我们观察到条纹和自旋密度波（SDW）关联，其中经调制的反铁磁畴由相位翻转线分隔，空穴在这些线上更为集中。与纯哈伯德模型不同，我们发现调制波长并非 $1/\delta$ 的整数倍（填充条纹）。条纹也不像以往最先进的计算所发现的那样是半填充的 [40]。相反，将其描述为部分填充最为恰当，其分数填充率随 δ 、系统尺寸及边界条件而变化。这些自旋与电荷行为同样与铜氧化物的相图一致 [39],：在电子掺杂侧，即使掺杂显著，均匀的反铁磁关联仍然存在；而在空穴掺杂侧，从低掺杂开始便可观察到短程或长程非公度磁性以及条纹[41, 42]。

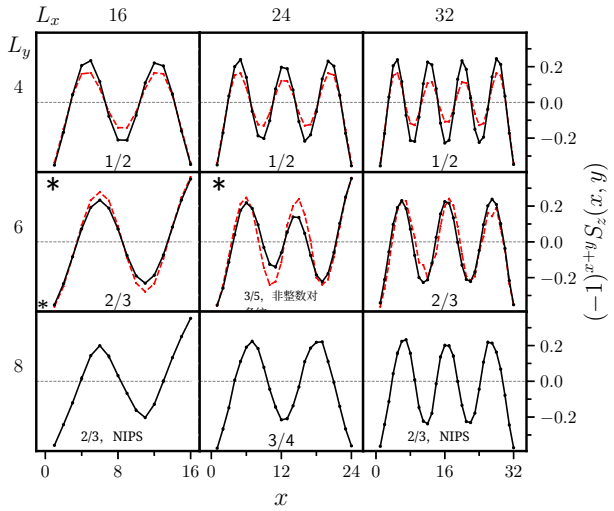

图2：条纹图样随系统尺寸的演变（$\delta = 1/8$，空穴掺杂）。周期性圆柱中的交错自旋密度以线切图形式展示。圆柱长度（L_x）在三列中变化，宽度（L_y）在各行中变化。在圆柱的两个边缘（$x = 1$ 和 $x = L_x$）施加反铁磁钉扎场；这些场可以同相，也可以具有 π 相移（以星号标记）；图中展示能量较低的情况。每种条纹图样的填充分数 f 均已标出，其中 NIPS 表示非整数对条纹。宽度为4和6的系统采用密度矩阵重整化群计算结果（红色），辅助场量子蒙特卡罗计算结果（黑色）与之高度吻合。

该相图与t-t'-J 模型[43, 44], 的相图形成鲜明对比；后者可作为近似——
强耦合哈伯德模型在低掺杂下的近似。在 t-t'-J 模型中，近期的密度矩阵重整化群研究均表明，在电子掺杂侧存在强烈的d波超导性 [43–45]，，且随着 t' 增加，超导性与反铁磁关联共存的程度不断增强；关于是否存在长程反铁磁序[46]，仍有一些分歧。在空穴掺杂侧，人们只发现了条纹，未发现超导性。 t-t'-J 模型无法从定性上解释铜氧化物，这究竟是由于该模型采用了强耦合近似，还是由于其他缺陷或缺失项同时影响了哈伯德模型和 t-t'-J （单带）模型，一直是个悬而未决的问题。这里，两种模型的相图存在显著差异，这表明前者才是原因。此前对较窄圆柱的研究未能揭示这些差异，因为这类研究受到强烈的有限尺寸效应影响 [47, 48]。

B. 欠掺杂区域： $1/8$ 空穴掺杂 ng

如图1所示，此处发现了较大的配对序参量，并与条纹关联共存。为更好地理解自旋与电荷关联的性质，我们在图2中系统研究了它们随系统尺寸的演变。计算在 $L_x \times L_y$ 个格点的系统中进行，沿^y方向采用周期性边界条件（PBC）或反周期性边界条件（APBC），沿^x方向采用开放边界条件（即圆柱）。在 $x = 1$ 和 L_x处施加沿^z方向的反铁磁钉扎场，以打破 SU(2)对称性并诱导局域自旋序，使得局域自旋密度 S_z（x， y）可作为远离圆柱边缘处自旋-自旋关联的表征。

所有系统中都清晰可见调制反铁磁图样。相应地，自旋调制节点处的空穴密度有所增加，如图1所示

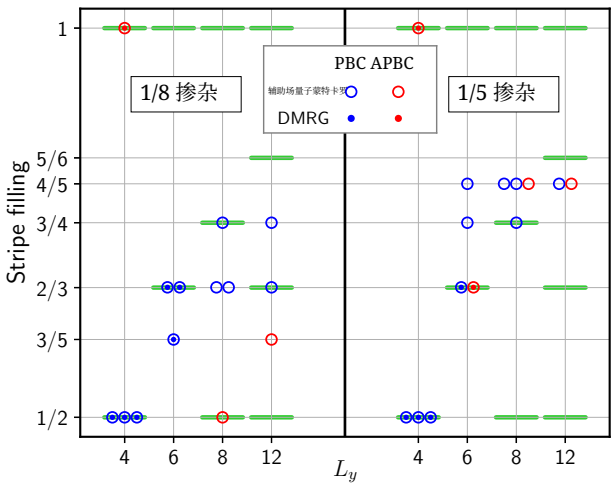

图3：空穴掺杂侧在 $\delta = 1/8$ 和 $1/5$处的部分填充条纹图样。图中展示了不同系统尺寸下的条纹填充率，所用圆柱形晶胞的宽度为 $L_y = 4$至12，长度为16至48（固定 L_y时以相邻符号表示）。图中展示了PBC和APBC的结果。较窄的圆柱体更倾向于形成整数对条纹（IPS，以绿色条形表示）。即使在较大的系统中，涨落也很强。

（图2对应的空穴密度结果见补充材料）。调制的特征波长 λ_{SDW} 随系统尺寸而变化。我们定义条纹的填充分数：$f \equiv \delta\,\lambda_{\mathrm{SDW}}/2$，即沿条纹每个晶格间距所含的空穴数。在纯哈伯德模型中，$f = 1$，因为 $\lambda_{\mathrm{SDW}} = 2/\delta$ [49, 50]。那么，名义上 每条条纹上的电子对数为 $n_p \equiv f\,L_y/2$。如果 n_p 是整数，我们将该状态称为整数对条纹（IPS）；否则称为非整数对条纹（NIPS）。

此前对宽度为4的圆柱体的研究发现，该系统的基态具有半填充条纹[40, 43, 44]。我们的结果证实了这一图景，辅助场量子蒙特卡罗与密度矩阵重整化群的结果吻合良好，但也表明半填充条纹是宽度为4时特有的。随着系统尺寸增大，条纹填充率在 3/5 和 3/4之间涨落。NIPS态频繁出现，此前尚未观测到。此前的计算 [11, 51] 表明，具有IPS的状态更受青睐，这被视为条纹态中存在电子局域配对的证据。在这里，纳入 t'后，电子的活动性增强，电子对变得相干，从而呈现长程配对序。下一节将进一步讨论这一点，并与过掺杂区域进行对比。

C. 过掺杂区域： $1/5$ 空穴掺杂

在 $\delta = 1/5$ 的空穴过掺杂区域基态中发现了较强的超导序参量，其强度与 $\delta = 1/8$ 相当（见图1）。自旋与电荷关联的行为呈现出一些共同特征，但两个区域之间也存在显著差异。图3并列总结了它们的条纹填充率，依据的是约30个系统中的计算结果。可以看出若干趋势。在窄圆柱中，两种掺杂条件下都更倾向于形成IPS态。在两种掺杂条件下，对十多个不同的宽度为4和6的系统，辅助场量子蒙特卡罗与密度矩阵重整化群在每种情况下对条纹波长和填充分数都得出了相同结果。在这两种情形下，填充分数会随系统尺寸和边界条件大幅变化，而且这种涨落在格点数超过500的系统中仍持续存在。随着尺寸增大（圆柱变宽），IPS态不再占优，两种系统都趋向于形成分数条纹填充率。这些结果表明，对于 t'，条纹图样——但条纹本身的存在与否并非如此——比纯哈伯德模型中的情况脆弱得多。

在1/5掺杂时，自旋和电荷调制都比在 $1/8$时弱。尽管在热力学极限下 f 更大，但过掺杂区域的空穴流动性更强，分布也更分散。空穴密度几乎均匀，参与密度涨落的空穴不到5%。在 $1/8$ 掺杂时，条纹序更明显，如图1所示。尽管如此，在自旋关联节点处的空穴峰值密度也仅比平均值高$\sim$ 30%。条纹填充率这一概念源自粒子图像，最适用于类维格纳晶体分布中的空穴。这里的空穴具有很强的波动特性 [49], ，因而我们观察到的条纹分数填充率与之更为相容。

D. 电子掺杂区域

实验上，电子掺杂侧的情况更简单，在铜氧化物中不存在相互竞争的条纹态 [41, 52]或赝能隙相 [39]。电子掺杂侧长程反铁磁序的临界掺杂高于空穴掺杂侧，超导穹顶更小，转变温度也更低。图1中的相图以及图4中的自旋和空穴密度与这些特征一致。

我们的结果揭示了电子掺杂侧的其他若干重要特征。自旋与电荷关联随系统尺寸和边界条件变化显著，尽管其敏感程度低于空穴掺杂侧。正如补充材料所示，宽度为4和宽度为6的圆柱得到的基态序截然不同；在每个模拟晶胞中，反周期性边界条件和周期性边界条件也会导向相反的结论。即使在图4中呈现稳健奈尔序的宽度为8的系统里，不同边界条件下的电荷关联仍有差异。超导性表现出的波动则更为剧烈。采用迄今最常见的周期性边界条件时，对宽度为4和宽度为6的圆柱所做的计算会得出结论：电子掺杂区存在强配对序。（请注意

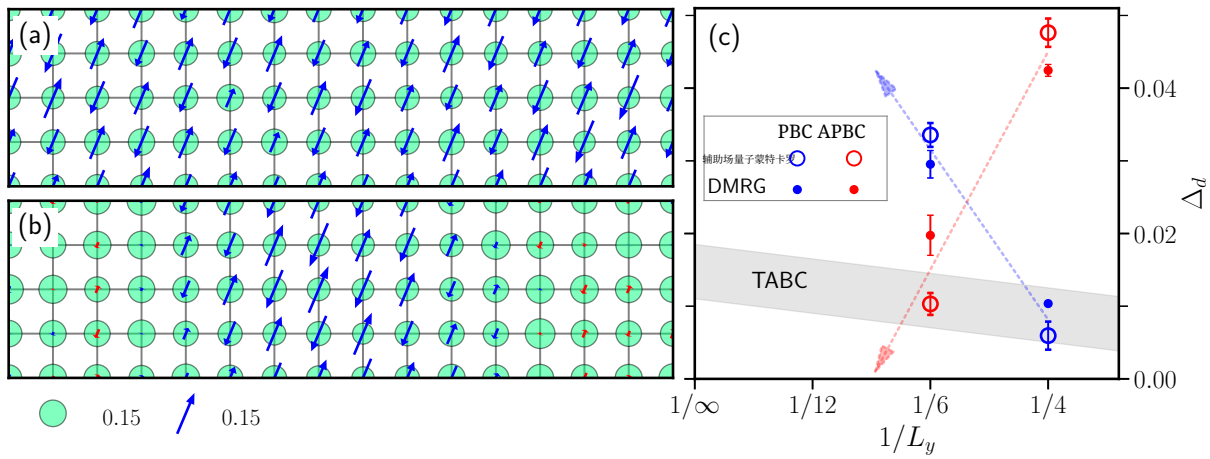

图 4：电子掺杂侧（$\delta = 1/8$）的自旋、电荷和配对性质，以及它们随边界条件的变化。(a) 在 28×8 圆柱的$\hat{y}$ 方向采用 APBC 时，产生近乎均匀的奈尔序（仅显示 16×4 中央区域）。(b) 采用 PBC 时，可见调制的反铁磁序，自旋大小的空间变化幅度更大。(c) 在 16×4 和 16×6 圆柱中计算得到的配对序（施加的全局 d 波配对场取固定值 $h_d = 0.021$ ）在 PBC 和 APBC 下呈现相反趋势。图中还显示了采用周期性超胞、通过扭曲平均边界条件计算得到的最终配对序；超胞的 L_y 逐渐增大，并同时给出了灰色带表示的热力学极限外推。

密度矩阵重整化群和辅助场量子蒙特卡罗给出的结果完全一致。）相比之下，在反周期性边界条件下，相同的计算预言不存在配对。有限尺寸和边界条件带来的不确定性远大于热力学极限下的最终信号。因此，如果不采用我们提出的新方法——扭曲平均边界条件、系统地外推至大尺寸，以及其他将在下文讨论的方法学进展——要对超导性作出哪怕定性的判断都很困难。

III. 方法

哈伯德模型的物理性质一直难以捉摸，也难以准确确定。非零 t' 使这一问题显著加剧。正如我们所展示的，这些困难包括对系统尺寸和边界条件更加敏感、依赖性更强。此外，t' 事实证明会显著影响低能态之间的相互作用。例如，在 $t' = 0$ 下，条纹与超导表现为竞争序。填充条纹态尤其稳定，其中嵌套起着关键作用。非零 t' 会影响嵌套条件（挫败奈尔序），并改变低能态的格局。这使得数值方法必须具备高得多的分辨率。

本研究采用的方法具有若干鲜明特点，从而能够实现更高水平的定性准确性与可靠性。我们协同运用了两种互补的先进计算方法。针对不同设置，我们分别实施了 U(1) [53] 和 SU(2) 对称性适配的 [54] 密度矩阵重整化群计算，并将其推进至大键维数极限。在辅助场量子蒙特卡罗中，我们提出了试探波函数优化方面的进一步改进；该波函数完全通过自洽方式确定 [32]，，无需任何输入参数。我们在宽度为4和宽度为6的圆柱上，在相同条件下对辅助场量子蒙特卡罗与密度矩阵重整化群进行了广泛而细致的比较。同一辅助场量子蒙特卡罗算法没有任何可调空间，并被应用于更大系统。为计算配对序参量而建立的系统性扭曲平均方案，为采样低能态提供了有效方法。

A. 扭曲平均是采样低能态的有效方法

在本研究中，扭曲平均 [55, 56] 有两个重要作用。首先，对扭曲角进行系统平均，再结合能够达到较大系统尺寸以及谨慎进行有限尺寸外推，使我们能够可靠地趋近热力学极限。其次，随机扭曲角为采样低能态提供了有效方法；对这些角度取平均可以减少偶然简并罕见事件的影响，并平滑外加配对场引起的能级交叉效应（见补充材料）。

如图 4 所示，不同的边界条件会导致配对序参量发生变化，其幅度甚至远远超过信号；即使是名义上相当大的系统（宽度为6的圆柱），也会如此。PBC 和 APBC 都是具有特殊对称性的扭曲角，尤其容易引起剧烈变化。我们采用带有准随机扭曲角 [56] 的 TABC。TBC 可以理解为电子穿越边界时获得一个相位。等价地，我们可以选择另一种规范，将相位均匀分配到每个跃迁项中。

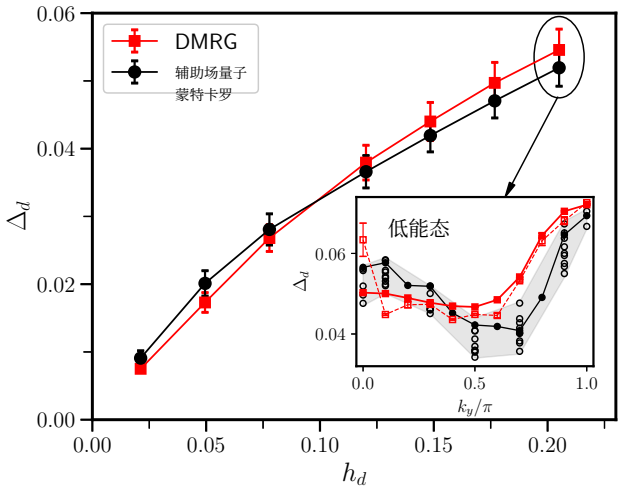

图 5：扭曲平均边界条件对准确确定配对序的重要性。主图展示了在 1/5 空穴掺杂下， 20×4 圆柱形晶胞中 d波配对序参量经 k_y完全扭曲平均后的结果。辅助场量子蒙特卡罗和密度矩阵重整化群的结果在整个 h_d范围内一致，其中 h_d为所施加配对场的强度。插图聚焦于 $h_d = 0.205$。图中展示了通过密度矩阵重整化群和辅助场量子蒙特卡罗计算得到的 Δ_d 随 k_y的变化，分别对应基态（由实线连接）和若干最低能激发态（空心符号）。对实心符号取平均，得到主图中的扭曲平均边界条件结果。

施加扭转时，必须谨慎定义配对序参量；其形式与规范相关，但其期望值应与规范无关。正如图 4 所示，TABC 减小了计算所得配对序参量的涨落，详情将在下文及 SM 中进一步讨论。（在文献 [57]，中，研究表明，TBC 和扭转平均能够加快基于圆柱进行计算时的外推。）

引入非零的 t' 后，半填充时费米面的完美嵌套便不复存在。有限尺寸和边界条件会使费米能级附近出现细微变化，而这些变化对集体自旋模的形成可能产生大得多的影响，因此低能态的性质也更为敏感。这些状态的能量可能非常接近，以至于任何微小的有限温度（例如实验条件下）都会使它们展宽，难以区分。扭曲平均边界条件（TABC）能有效地对这类低能态进行采样，从而平均掉涨落，更可靠地捕捉其内禀性质。图 5 展示了一个示例。如图中插图所示，对于 h_d 的一个取值，无论是基态还是低能激发态，配对序参量都会随扭转角发生显著变化。即使在高质量计算设置下（例如在密度矩阵重整化群（DMRG）计算中采用较大的键维数），计算结果仍可能因初始条件、收敛判据等因素，在一组低能态之间“跳转”。

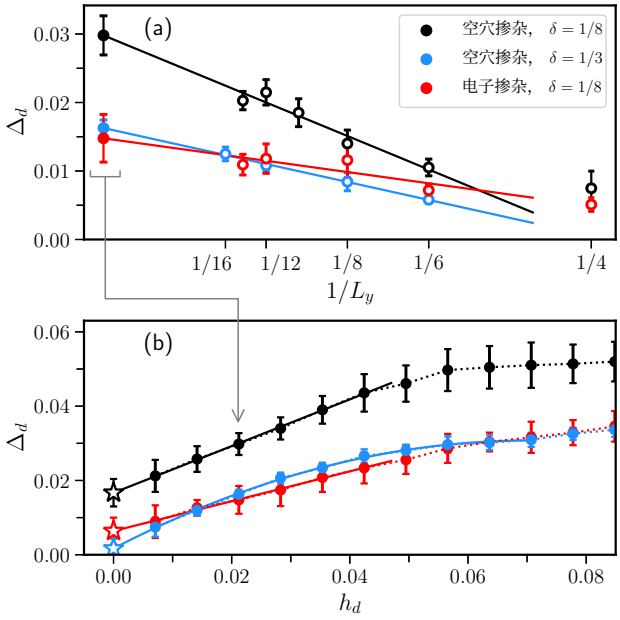

图 6：热力学极限下基态配对序参数的计算。(a) 展示在固定的 h_d（ d 波配对场的强度）下向热力学极限外推。(b) 展示将 (a) 中的热力学极限结果外推至 $h_d \to 0$。图中展示了三个具有代表性的系统。在 (a) 中，每个数据点均由超胞 $L_x \times L_y$ 上对 $(k_x,\ k_y)$ 进行扭曲平均边界条件计算得到，且仅纳入较大超胞的结果。在 (b) 中，对较小 h_d 值进行线性或二次拟合，外推值以星号标记。

这也反映在两种方法对每个特定状态的吻合程度并不高。然而，采用扭曲平均边界条件（TABC）后，在 h_d 的整个取值范围内（该范围跨越多个能级交叉，见补充材料（SM）），两种方法都高度吻合，并得出完全一致的结论。

B. 配对序的外推

热力学极限（TDL）下的自发配对序参量Δ_d，需要通过大量计算获得。对于每组参数（t' 和掺杂），我们会在数十个h_d 取值下，针对许多不同的模拟晶胞尺寸 N计算 Δ_d（N，h_d），并对每个取值下的数十个准随机扭转角取平均。随后，我们在每个 h_d下取极限 Δ_d（$N \to \infty$，h_d），再进行外推 Δ_d（∞，$h_d \to 0$）。这一过程如图 6 所示。图（a）展示了第一步：我们使用完全周期性边界条件的 $N = L_x \times L_y$系统，并在两个方向上施加准随机扭转角（k_x，k_y）。我们确认 L_x 足够大，使结果在统计精度范围内达到收敛。然后，我们对扭转平均边界条件（TABC）的结果关于 $1/L_y$进行外推，并排除较小尺寸。（从宽度为 4 的系统开始可以看到偏差；这类系统的配对对称性可能不同于常规 d-波 [48]。）图（b）中

随后使用较小的 h_d 取值进行外推（线性拟合取< 0.05，二次拟合则取最后约 10 个点），从而得到 $h_d \to 0$处最终的自发配对序参量 Δ_d。可以看出，拟合效果非常好；每种情况下，线性拟合和二次拟合所得的结果在统计误差范围内一致。

IV. 结论

单带哈伯德模型能否捕捉铜氧化物的定性物理特性，尤其是超导性？如今，距离首个铜氧化物超导体的发现已逾 35 年 [1],，我们得出结论：答案是肯定的。具有次近邻跃迁 t'、能够区分电子掺杂与空穴掺杂的哈伯德模型，捕捉到了电荷序、磁序和配对序的基本特征。

计算得到的基态配对序参量随掺杂呈现穹顶状结构，类似于铜氧化物的 T_c 穹顶。在空穴掺杂侧，我们发现超导性与部分填充的条纹关联共存；在足够大的系统中，名义条纹填充率处于 0.6–0.8 的范围内。在电子掺杂侧，较低掺杂时，均匀或弱调制的反铁磁性，以及均匀或弱调制的掺杂，与略弱一些的超导性共存。较大系统中普遍出现的条纹序，且配对数并非整数，这表明配对会在条纹之间涨落，从而促进长程相干性，进而产生超导性；相比之下，对于 $t' = 0$，条纹是满填充的，且不存在超导性 [11]。

这一图景与 t-t'-J 模型形成鲜明对比。人们曾认为该模型可与哈伯德模型互换，但它在空穴掺杂侧似乎并未表现出超导性 [43–45]。这些模型的基态并非普适；要捕捉各种相互交织的序之间微妙的相互作用，既需要非常谨慎地进行有限尺寸外推，也需要模拟方法具备极高的精度和可靠性。即使是在单带 t-t' 哈伯德模型中，已有大量研究，结果差异很大且往往相互矛盾。我们的结果也解释了为何会出现这种情况——该模型的性质对有限尺寸、边界条件以及近似方法中的任何偏差都极为敏感。

在这里，我们结合使用了 DMRG 和辅助场量子蒙特卡罗：由 DMRG 在较窄的系统上对辅助场量子蒙特卡罗中的约束路径近似进行基准测试和验证，再利用辅助场量子蒙特卡罗研究大得多的系统。通过采用扭曲平均边界条件，我们大幅改进了有限尺寸外推。这些方法进展，加上各方法内部的改进，为解决这一问题提供了强有力的工具，使我们能够以全新的能力和精度开展研究。

在空穴掺杂侧那些不存在超导性的模型或参数区域中，仍有明显迹象表明存在成对空穴。例如，如果条纹内部的空穴并未成对，那么预计约有一半的系统中会出现含奇数个空穴的单条纹；但实际发现，每条条纹中的空穴数都为偶数。是否存在超导性似乎与空穴对的性质有关，例如其有效质量；而有效质量会受到 t' 等模型参数的显著影响。质量较大的空穴对，或与其周围区域的磁自由度强烈相互作用的空穴对，更可能被束缚在条纹中，从而抑制相干性。这种模型特异性和非普适性引出了一个问题：能否像 BCS理论那样，为铜氧化物超导性建立简单的解析理论，还是我们始终只能依赖模拟?

我们的研究在定量地将模型与实验联系起来方面仍有许多工作要做。我们尚未预测相变温度，只确定了序参量。我们尚未研究这些模型的输运性质和动力学性质。单带哈伯德模型的许多其他性质仍有待确定和理解。哈伯德模型中未包含的其他项 [58, 59] 和效应，仍可能在定量上发挥重要作用。尽管如此，从定性的角度来看，t-t'-U 哈伯德模型似乎“具备了所需的一切”。

V. 致谢

我们感谢 A. Georges、S. Kivelson、A. J. Millis、M. Morales、H. Shi、E. Vitali 和 T. Xiang 的讨论。感谢 Lucy Reading-Ikkanda 在图形制作方面提供帮助。M.Q 感谢中国 MOST 国家重点研发计划（2022YFA1405400）、中国国家自然科学基金（项目编号：12274290）以及 Yangyang 发展基金的资助。SRW 感谢美国国家科学基金会通过 DMR-2110041 提供的支持。US 感谢德国研究基金会（DFG）在德国卓越战略 EXC-2111-390814868 项目下提供的资助。H.X. 感谢计算量子物理中心、Flatiron 研究所提供的支持与热情接待。Flatiron 研究所是西蒙斯基金会的一个部门。C.-M.C. 感谢科学技术部（MOST）项目（编号：111-2112-M-110-006-MY3）的支持，以及台湾教育部（MOE）玉山青年学者计划的资助。

[1] J. G. Bednorz 和 K. A. M¨uller，《Zeitschrift f¨ur Physik B Condensed Matter》64, 189（1986年），ISSN 1431-584X, 网址 https://doi.org/10.1007/BF01303701。

[2] J. Hubbard, 《英国皇家学会会刊》伦敦，A辑，数学与物理科学 **276**, 238 (1963), 网址：https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1963.0204。[3]P. W. Anderson, 《科学》**235**, 1196 (1987), 网址：https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science. 235.4793.1196。[4]V. J. Emery, 《物理评论快报》**58**, 2794 (1987), 网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58. 2794。[5]F. C. Zhang 和 T. M. Rice, 《物理评论B辑》**37**, 3759 (1988), 网址：https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.37.3759。[6] P. W. Anderson 和 R. Schrieffer, 《今日物理》**44**, 54 (1991), https://doi.org/10.1063/1.881261，网址：https://doi.org/10.1063/1.881261。[7] E. Dagotto, 《现代物理评论》**66**, 763 (1994), 网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66. 763。[8] B. Keimer、S. A. Kivelson、M. R. Norman、S. Uchida 和 J. Zaanen, 《自然》**518**, 179 (2015)。[9] M. Qin、T. Sch¨afer、S. Andergassen、P. Corboz 和 E. Gull, 《凝聚态物理年度评论》**13**, 275 (2022), https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-090921-033948，网址：https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-090921-033948。[10] D. P. Arovas、E. Berg、S. A. Kivelson 和 S. Raghu, 《凝聚态物理年度评论》**13**, 239 (2022), https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031620-102024，网址：https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031620-102024。[11] M. Qin、C.-M. Chung、H. Shi、E. Vitali、C. Hubig、U. Schollw¨ock、S. R. White 和 S. Zhang（西蒙斯多电子问题合作项目），《物理评论X》**10**, 031016 (2020), 网址：https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevX.10.031016。[12] H.-C. Jiang 和 S. A. Kivelson，美国国家科学院院刊**119**, e2109406119 (2022), https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2109406119

，网址 https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.2109406119.[13]S. R. White 和 D. J. Scalapino, 《物理评论快报》**91**, 136403（2003），网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.136403。[14] E. Gull、O. Parcollet 和 A. J. Millis, 《物理评论快报》**110**，216405（2013），网址 https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevLett.110.216405。[15] A. S. Darmawan、Y. Nomura、Y. Yamaji 和 M. Imada, 《物理评论B辑》**98**，205132（2018），网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.205132。[16] A. Himeda、T. Kato 和 M. Ogata, 《物理评论快报》**88**，117001（2002），网址 https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevLett.88.117001。[17] B. Ponsioen、S. S. Chung 和 P. Corboz, 《物理评论B辑》**100**, 195141（2019），网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.195141。[18] P. Corboz、T. M. Rice 和 M. Troyer, 《物理评论快报》**113**，046402（2014），网址 https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevLett.113.046402。[19] J. P. F. LeBlanc、A. E. Antipov、F. Becca、I. W. Bulik、G. K.-L. Chan、C.-M. Chung、Y. Deng、M. Ferrero、T. M. Henderson、C. A. Jim´enez-Hoyos 等（Simons 多电子问题合作组），《物理评论X》**5**

，041041（2015），网址 https://link ·aps· org/doi/10 · 1103/《物理评论快报》**69**, 2863 (1992), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69. 2863.[21] S. R. White, 《物理评论B辑》**48**, 10345 (1993), URL https: // link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.10345. [22] U. Schollw¨ock, 《现代物理评论》**77**, 259 (2005), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.77. 259.[23] Y.-F. Jiang, J. Zaanen, T. P. Devereaux, and H.-C. Jiang, Phys. Rev. Res. **2**, 033073 (2020), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.033073. [24] J. Jordan, R. Or´us, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac, 《物理评论快报》**101**, 250602 (2008), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett. 101.250602.[25] N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov, 《物理评论快报》**81**, 2514 (1998), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.2514. [26] S. Zhang, J. Carlson, and J. E. Gubernatis, 《物理评论B辑》**55**, 7464 (1997), URL https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.55.7464. [27] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, 《现代物理评论》**68**, 13 (1996), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.68.13. [28] G. Knizia and G. K.-L. Chan, 《物理评论快报》**109**, 186404 (2012), URL https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.109.186404. [29] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, 《现代物理评论》**77**, 1027 (2005), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.77.1027. [30] W. Metzner, M. Salmhofer, C. Honerkamp, V. Meden, and K. Sch¨onhammer, 《现代物理评论》**84**, 299 (2012), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/ RevModPhys.84.299. [31]C.-C. Chang and S. Zhang, 《物理评论B辑》**78**, 165101 (2008), URL https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.78.165101. [32]M. Qin, H. Shi, and S. Zhang, 《物理评论B辑》**94**, 235119 (2016), URL https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.94.235119. [33] B.-X. Zheng, C.-M. Chung, P. Corboz, G. Ehlers, M.-P. Qin, R. M. Noack, H. Shi, S. R. White, S. Zhang, and G. K.-L. Chan, 《科学》**358**, 1155 (2017), ISSN 0036-8075, http://science.sciencemag.org/content/358/6367/1155.full.p

df,

网址 http://science.sciencemag.org/content/358/6367/1155.[34] A. Damascelli、Z. Hussain 和 Z.-X. Shen, 《现代物理评论》**75**, 473 (2003)，网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.473. [35] O. Andersen、A. Liechtenstein、O. Jepsen 和 F. Paulsen, 《固体物理与化学杂志》**56**, 1573 (1995)，ISSN 0022-3697，新型超导体光谱学会议论文集，网址 http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369795002693. [36]M. Hirayama、Y. Yamaji、T. Misawa 和 M. Imada, 《物理评论B辑》**98**, 134501 (2018)，网址 https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.134501.[37] T_c 更好的替代指标可能是超导能隙的大小。这更难计算，而且它与 T_c 也只有粗略的关联。[38] V. J. Emery 和 S. A. Kivelson, 《自然》**374**, 434 (1995)。

[39] D. J. Scalapino，《现代物理评论》**84**, 1383 (2012)，网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.84. 1383.[40] E. W. Huang、C. B. Mendl、H.-C. Jiang、B. Moritz 和 T. P. Devereaux，npj《量子材料》**3** (2018)，网址 https://doi.org/10.1038%2Fs41535-018-0097-0. [41] J. M. Tranquada、B. J. Sternlieb、J. D. Axe、Y. Nakamura 和 S. Uchida，《自然》**375**, 561 (1995)。[42] J. M. Tranquada，《物理学进展》**69**, 437 (2020)，https://doi.org/10.1080/00018732.2021.1935698，网址 https://doi.org/10.1080/00018732.2021.1935698. [43] S. Jiang、D. J. Scalapino 和 S. R. White，美国国家科学院院刊**118**, e2109978118 (2021)，https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2109978118，网址 https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas. 2109978118.[44] S. Gong、W. Zhu 和 D. N. Sheng，《物理评论快报》**127**, 097003 (2021)，网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.097003. [45] H.-C. Jiang 和 S. A. Kivelson，《物理评论快报》**127**, 097002 (2021)，网址 https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.127.097002. [46] H.-C. Jiang、S. A. Kivelson 和 D.-H. Lee，*Superconducting valence bond fluid in lightly doped 8-leg t-j cylinders* (2023)，网址 https://arxiv.org/abs/2302.11633. [47] H.-C. Jiang 和 T. P. Devereaux，《科学》**365**, 1424 (2019)，1806.01465. [48] C.-M. Chung、M. Qin、S. Zhang、U. Schollw¨ock 和 S. R. White（西蒙斯多电子问题合作组织），《物理评论B辑》**102**, 041106 (2020)，网址 https: //link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.041106. [49] C.-C. Chang 和 S. Zhang，《物理评论快报》**104**, 116402 (2010)，网址 https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevLett.104.116402. [50] H. Xu、H. Shi、E. Vitali、M. Qin 和 S. Zhang，《物理评论研究》**4**，013239（2022），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.4.013239。[51] S. R. White 和 D. J. Scalapino，《物理评论B辑》**60**，R753（1999），网址：https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.60.R753。[52] E. Fradkin、S. A. Kivelson 和 J. M. Tranquada，《现代物理评论》**87**，457（2015），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.87.457。[53] M. Fishman、S. R. White 和 E. M. Stoudenmire，SciPost物理代码库，第 4 页（2022），网址：https:// scipost.org/10.21468/SciPostPhysCodeb.4。[54] C. Hubig、F. Lachenmaier、N.-O. Linden、T. Reinhard、L. Stenzel、A. Swoboda、M. Grundner，以及 S. M. 在此处添加其他贡献者，*The* SyTen *toolkit*，网址：https: //syten.eu。[55] C. Lin、F. H. Zong 和 D. M. Ceperley，《物理评论E》**64**，016702（2001），网址：https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevE.64.016702。[56] M. Qin、H. Shi 和 S. Zhang，《物理评论B辑》**94**，085103（2016），网址：https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.94.085103。[57] Y. Gannot 和 S. A. Kivelson，《物理评论B辑》**107**，075127（2023），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.107.075127。[58] Z. Chen、Y. Wang、S. N. Rebec、T. Jia、M. Hashimoto、D. Lu、B. Moritz、R. G. Moore、T. P. Dev- ereaux 和 Z.-X. Shen，《科学》**373**，1235（2021），https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.abf5174

，

网址 https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.abf5174.[59] S. Jiang、D. J. Scalapino 和 S. R. White，arXiv预印本 arXiv:2303.00756（2023），2303.00756。

《哈伯德模型中超导性与部分填充条纹的共存》补充材料

Hao Xu, [1], *Chia-Min Chung, [2, 3, 4], *Mingpu Qin, [5]Ulrich Schollw¨ock, [6,7]Steven R. White, [8]和 Shiwei Zhan g[9]

[1]*Department of Physics, College of William and Mary, Williamsburg, Virginia 23187, USA*
[2]*Department of Physics, National Sun Yat-sen University, Kaohsiung 80424, Taiwan*
[3]*Center for Theoretical and Computational Physics,National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung 80424, Taiwan*[4]*Physics Division, National Center for Theoretical Sciences, Taipei 10617, Taiwan*
[5]*Key Laboratory of Artificial Structures and Quantum Control,School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China*
[6]*Arnold Sommerfeld Center for Theoretical Physics,Ludwig-Maximilians-Universität München, 80333 Munich, Germany*[7]*Munich Center for Quantum Science and Technology (MCQST), 80799 Munich, Germany*[8]*Department of Physics and Astronomy, University of California, Irvine, California 92697, USA*
[9]*Center for Computational Quantum Physics, Flatiron Institute, New York, NY 10010, USA*

arXiv:2303.08376v1 [cond-mat.supr-con] 15 Mar 2023

I. 哈伯德模型的部分粒子-空穴变换

在哈伯德模型中施加配对场时，总粒子数不守恒。通常的基态 AFQMC是在电子数固定的斯莱特行列式空间中构建的。虽然更一般的做法是在 Hartree-Fock-Bogoliubov（HFB）空间中重新构建 AFQMC [1], ，但此处的问题无需修改 AFQMC 代码即可解决，只需应用部分粒子-空穴变换 [2]

$$\begin{aligned}\hat{c}_{i\uparrow} &\rightarrow \hat{d}_{i\uparrow}, \quad \hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow} \rightarrow \hat{d}^{\dagger}_{i\uparrow} \\ \hat{c}_{i\downarrow} &\rightarrow \hat{d}^{\dagger}_{i\downarrow}(-1)^i, \quad \hat{c}^{\dagger}_{i\downarrow} \rightarrow \hat{d}_{i\downarrow}(-1)^i,\end{aligned} \tag{1}$$

其中 i 表示二分晶格中的格点。经过这一变换，正文中式（1）的 t' 哈伯德哈密顿量变为

$$\begin{aligned}\hat{H} = &-t\sum_{\langle i,j\rangle\sigma}\hat{d}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{d}_{j\sigma} - t'\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle\sigma} s(\sigma)\hat{d}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{d}_{j\sigma} \\ &+U\sum_i(\hat{m}_{i\uparrow}-\hat{m}_{i\downarrow}\hat{m}_{i\uparrow}) - \mu\sum_i(\hat{m}_{i\uparrow}+1-\hat{m}_{i\downarrow}),\end{aligned} \tag{2}$$

其中 $s(\uparrow) = +1$ 和 $s(\downarrow) = -1$，且 $\hat{m}_{i,\sigma} = \hat{d}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{d}_{i,\sigma}$。注意，变换后自旋向下的次近邻跃迁会改变符号。配对算符 $\hat{\Delta}_{ij} = (\hat{c}_{i\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow} - \hat{c}_{i\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow})/\sqrt{2}$ 变换为：

$$\hat{\Delta}_{ij} = ((-1)^{j+1}\hat{d}^{\dagger}_{j\downarrow}\hat{d}_{i\uparrow} - (-1)^i\hat{d}^{\dagger}_{i\downarrow}\hat{d}_{j\uparrow}))/\sqrt{2} \tag{3}$$

此时它变成了一个自旋翻转跃迁项。U 的符号反转，意味着相互作用变为吸引性。自旋向上和自旋向下的电子现在分别获得有效化学势 $\mu - U$和 $-\mu$，这意味着 $\langle\sum_i(\hat{m}_{i\uparrow}\rangle \neq \langle\sum_i(\hat{m}_{i\downarrow}\rangle$。经过变换后，我们得到

$$\sum_i(\hat{m}_{i\uparrow}+\hat{m}_{i\downarrow}) = \sum_i(\hat{n}_{i\uparrow}+1-\hat{n}_{i\downarrow}) = N_s, \tag{4}$$

使电子总数等于格点数，即系统处于半填充状态，但存在自旋不平衡。现在，辅助场量子蒙特卡罗计算中的随机行走者（斯莱特行列式）表示为 $2N\times N_e$ 矩阵 [3]，且斯莱特行列式中的每个轨道现在都是由自旋向上和自旋向下分量混合而成的自旋轨道。

II. 扭曲边界条件

x方向的扭曲边界条件（TBC）意味着波函数满足：

$$\psi(\mathbf{r}_1 + L\hat{e}_x, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N) = e^{i\theta_x}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N). \tag{5}$$

为方便起见，我们用 L 表示 L_x，即周期性胞元在 x方向上的线性尺寸。（其他方向上的扭曲边界条件定义类似。）对于本研究所考察的二维系统，两个方向上的相位彼此独立，来自 x方向和 y方向的相位因子相乘。因此，不失一般性，下面我们只明确写出一个维度（x）。假设晶格位点的标号从1到 L。

可以采用不同的规范来实现扭曲边界条件。这里讨论两种常见的选择。在规范 A 中，电子仅在穿过边界时获得一个相位；而在规范 B 中，相位则均匀分布在所有键上。

A. 规范 A

在规范 A 中，如果我们对排斥型哈伯德模型中的 ↑ 和 ↓-自旋施加相同的扭转，则有

$$\begin{aligned}c^{\dagger}_{L+1,\sigma} &= \exp(i\theta)c^{\dagger}_{1,\sigma} \\ c_{L+1,\sigma} &= \exp(-i\theta)c_{1,\sigma}\end{aligned} \tag{6}$$

*这两位作者对本研究的贡献相同。

因此，最后一个格点与第一个格点之间的跃迁被修改为

$$-t\hat{c}^{\dagger}_{1\sigma}\hat{c}_{L\sigma}+h.c\rightarrow -t\exp(i\theta)\hat{c}^{\dagger}_{1\sigma}\hat{c}_{L\sigma}+h.c \quad (7)$$

而其他跃迁项保持不变。经过式（1）中的部分粒子-空穴变换后，自旋向上项保持不变，但自旋向下的相位变为 $-\theta$，如下所示

$$-t\exp(-i\theta)\hat{d}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{d}_{L\downarrow}+h.c \quad (8)$$

t' 项也是如此。

采用扭曲边界条件时，我们还需要修改配对算符的定义（对于连接最近邻格点的键，$\hat{\Delta}_{kj}=(\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}-\hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow})/\sqrt{2}$，$\langle jk\rangle$），以适用于连接首末格点的键，定义如下：

$$\hat{\Delta}_{1L}=\exp(-i\theta)(\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}_{L\downarrow}-\hat{c}_{1\downarrow}\hat{c}_{L\uparrow})/\sqrt{2}\,. \quad (9)$$

施加配对场以计算配对序时，若采用扭曲边界条件，则需要包含式（9）中的相位。在辅助场量子蒙特卡罗计算中，按照式（1），式（9）中的配对算符可变换为

$$\hat{\Delta}_{1L}=\exp(-i\theta)(\hat{d}^{\dagger}_{1\downarrow}\hat{d}_{L\uparrow}-(-1)^{L}\hat{d}^{\dagger}_{L\downarrow}\hat{d}_{1\uparrow})/\sqrt{2} \quad (10)$$

按照式（3），其他配对项变换为 $-U$ 情形

B. 规范 B

接下来，我们以与规范 A 类似的设置考察规范 B。现在，相位均匀分布在每条键上，对于排斥模型，我们有

$$\begin{aligned} c^{\dagger}_{j\sigma} &\rightarrow c^{\dagger}_{j\sigma}\exp(i(j-1)\frac{\theta}{L}) \\ c_{j\sigma} &\rightarrow c_{j\sigma}\exp(-i(j-1)\frac{\theta}{L}) \end{aligned} \quad (11)$$

and

$$\begin{aligned} c^{\dagger}_{L+1,\sigma} &= \exp(i\theta)c^{\dagger}_{1,\sigma} \\ c_{L+1,\sigma} &= \exp(-i\theta)c_{1,\sigma} \end{aligned} \quad (12)$$

此时，最近邻跃迁项修改为

$$-t\sum_{j}\exp(i\theta/L)\hat{c}^{\dagger}_{j+1\sigma}\hat{c}_{j\sigma}+h.c. \quad (13)$$

t' 项的形式类似。

配对算符 $\hat{\Delta}_{kj}=(\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}-\hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow})/\sqrt{2}$ 修改为

$$\hat{\Delta}_{kj}=(\hat{c}_{k\uparrow}\hat{c}_{j\downarrow}-\hat{c}_{k\downarrow}\hat{c}_{j\uparrow})\exp(-i(k+j-2)\theta/L)/\sqrt{2} \quad (14)$$

对于连接第一个和最后一个格点的键，我们有

$$\hat{\Delta}_{L,1}=(\hat{c}_{L\uparrow}\hat{c}_{1\downarrow}-\hat{c}_{1\downarrow}\hat{c}_{L\uparrow})\exp(-i(2L-1)\theta/L)/\sqrt{2} \quad (15)$$

随后，我们可以按照式（1）中的粒子-空穴变换，将配对序的定义转换到负 U 模型中，该模型用于辅助场量子蒙特卡罗计算。

C. 两种规范的等价性

上述两种规范等价，在这两种规范下物理量应具有相同的数值，这一点我们已明确验证。由于相互作用项与扭转角无关，因此在非相互作用系统中测试扭曲边界条件实现更为方便。例如，对于一个含有 $t'=-0.2t$ 个格点、$\mu=0.8$ 的 20×4 晶格，扭转角为 $\theta_x=1.2994\pi$，$\theta_y=0.6026\pi$，我们在所有代码中都很容易验证，物理量（例如每格点能量（-1.15861112）、每键平均配对序（0.01108939）和电子密度（0.82422077））在两种规范下完全相同。

III. 辅助场量子蒙特卡罗中的自洽约束

我们施加磁性钉扎场和配对钉扎场，以探测所研究系统中的相应响应。辅助场量子蒙特卡罗中的自洽过程使我们能够施加约束来消除符号问题。下面介绍钉扎场计算和自洽过程。

磁钉扎场通常施加在圆柱形单元中，作用于圆柱的一端或两端，而不施加在单元的其余部分。我们尝试不同的磁钉扎场构型，以探测可能存在的磁序或关联。场强固定为 $h_m=0.25$，且仅作用于圆柱的边缘。对于大多数系统，我们在所研究圆柱的开放边缘施加反铁磁钉扎场（$(-1)^{(i_x+i_y)}h_m$，适用于 $i_x=1$ 和 L_x）。在某些情况下，我们还测试一种钉扎场构型：右侧边缘的磁钉扎场具有 π 相位，如（$(-1)^{(i_x+i_y)}h_m$，适用于 $i_x=1$，以及 $(-1)^{(i_x+i_y+1)}h_m$，适用于$i_x=L_x$），并比较能量以确定真正的基态，即能量较低的状态。请注意，在此方案中，逐步考察更大（更长）的系统十分重要，这样才能消除局域钉扎场的影响。文献 [4] 详细介绍了我们的分析方法以及如何提取热力学极限中的信息。

为计算配对序参量，我们在整个模拟单元中施加全局配对场，方法与参考文献 [2] 类似。为探测 d-波配对响应，在竖直键和水平键上施加的诱导配对场强度相同（h_d），但符号相反。含配对场的哈密顿量为

$$\hat{H}'(h_d)=\hat{H}+\hat{H}_d(h_d) \quad (16)$$

其中

$$\hat{H}_d(h_d)=-h_d\sum_{\langle i,j\rangle}b_{ij}\frac{\hat{\Delta}_{ij}+\hat{\Delta}^{\dagger}_{ij}}{2}\,, \quad (17)$$

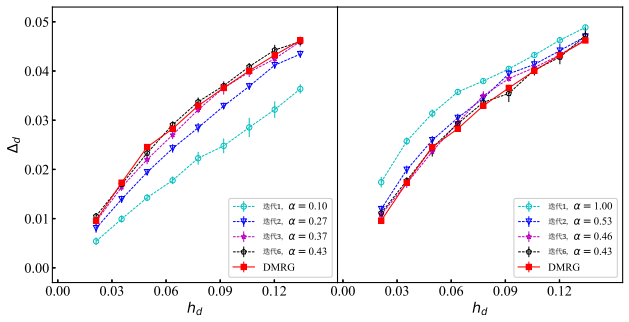

图1：辅助场量子蒙特卡罗中自洽约束的稳健性。这里以 1/4 空穴掺杂哈伯德模型在 16×4 圆柱上的配对序参数为例。左图中，自洽计算从初始值 $\alpha = 0.1$ 开始。在该系统中，经过少数几次迭代，计算便收敛到精确结果（密度矩阵重整化群，红色），收敛值为 $\alpha = 0.43$。右图中，计算以 $\alpha = 1.0$ 初始化，并从相反方向收敛到相同结果。

其中，对于连接两个最近邻点的键，若沿 x 方向，则为 $b_{ij} = +1$；若 $\langle ij\rangle$ 沿 y 方向，则为 $b_{ij} = -1$，而 i 和 j。

根据 Hellmann-Feynman 定理，配对序由基态能量 $E'(h_d)$ 对 h_d 的导数计算得出。请注意，这些计算是在式（2）中的粒子-空穴变换后的吸引型哈伯德哈密顿量中进行的。我们取非相互作用哈密顿量（式（2）中的 $U = 0$）在配对场 αh_d 下的基态作为试探波函数，其中 α 是一个待在自洽迭代中确定的参数。第一步，我们任意选取一个 α，并使用相应的试探波函数作为约束，通过辅助场量子蒙特卡罗计算配对序的平均值。随后，我们通过最小化非相互作用波函数给出的配对序与上一次辅助场量子蒙特卡罗迭代结果之间的差异，来调整 α 的值。然后，我们使用新的试探波函数进行下一轮辅助场量子蒙特卡罗计算。重复这一过程，直到 α 收敛。在每个平均场解中，我们都会调整化学势，以达到目标自旋不平衡（即排斥模型中的电子密度）。进行扭曲平均边界条件计算时，我们通过对不同扭曲角取平均来确定 α 的最终值。该值很快就能收敛，因此可以先进行少量试算，以获得较好的估计。若需要更高精度，还可以增加计算量。

图1展示了在自洽过程中计算得到的 1/4 空穴掺杂 t' 哈伯德模型在 16×4 圆柱上的配对序。我们也展示了密度矩阵重整化群的结果，因为对于这个狭窄系统，它提供了本质上精确的参考结果。在图1中，我们以初始值 $\alpha = 0.1$开始自洽计算（左图）。经过6次迭代后，配对序收敛至密度矩阵重整化群的结果。收敛值为 $\alpha = 0.43$。以 $\alpha = 1.0$ 开始自洽过程（右图），我们也得到了相同的收敛配对序和 α 值，这表明自洽计算与初始值 α无关。

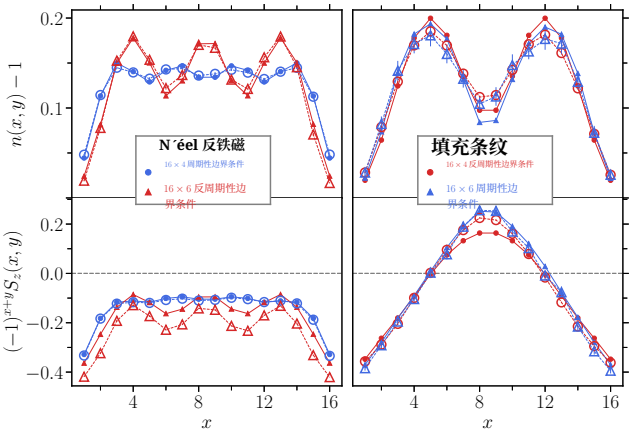

图2：自旋与电荷序对系统尺寸和边界条件高度敏感。这里展示了四种不同系统的结果，它们的体相参数相同（$\delta = 1/8$，电子掺杂），但系统尺寸和边界条件不同。图中给出了掺杂电子密度（上排）和交错自旋密度（下排）的线剖面，涵盖两种系统尺寸（16×4 和 16×6）以及周期性（PBC）和反周期性（APBC）边界条件的组合。开口圆柱的左右边缘施加了反铁磁钉扎场。出现了两种不同类型的状态：电子密度相当均匀的 N´eel 反铁磁态（左图）和填充条纹态（右图）。密度矩阵重整化群（实心符号）与辅助场量子蒙特卡罗（空心符号）的结果吻合良好；两者的差异与系统尺寸和边界条件有关。

IV. 序对系统尺寸和边界条件的敏感性

图2展示了一个例子，说明基态对系统尺寸和边界条件（BC）的敏感性很强。对于相同的物理参数，采用四种不同的尺寸/边界条件组合会得到两个截然不同的基态；尺寸与边界条件的影响交替出现。两种方法得到的结果一致。在空穴掺杂侧也观察到了这种敏感性（见图4）。因此，要确定这些系统在热力学极限下的有序状态，需要进行远大于以往研究规模的计算。下文还将展示存在许多低能态，其能量排序可能受到系统尺寸和边界条件的影响。在许多情况下，这些低能态可以与不同的条纹构型联系起来。对于图2所示的情况，系统可能接近两种状态之间的相边界[5]。此处采用的扭转平均方法

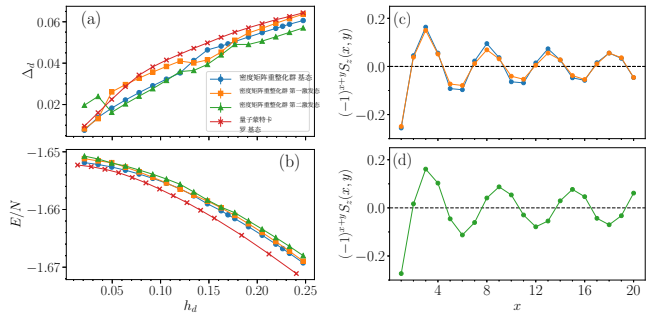

图3：低能态与能级交叉示意图。图中展示了配对序 Δ_d (a) 和每格点能量 (b) 随全局配对场强度 h_d 的变化，这对应于圆柱形 20×4 空穴掺杂系统， $1/5$ 。误差棒小于符号的尺寸。(c) 和 (d) 展示了在 x 方向上，针对 DMRG 得到的三个低能态的交错自旋密度；这里 $h_d \approx 0.0075$，是我们考察的最小 h_d 。反铁磁钉扎场施加在左侧开放边缘。

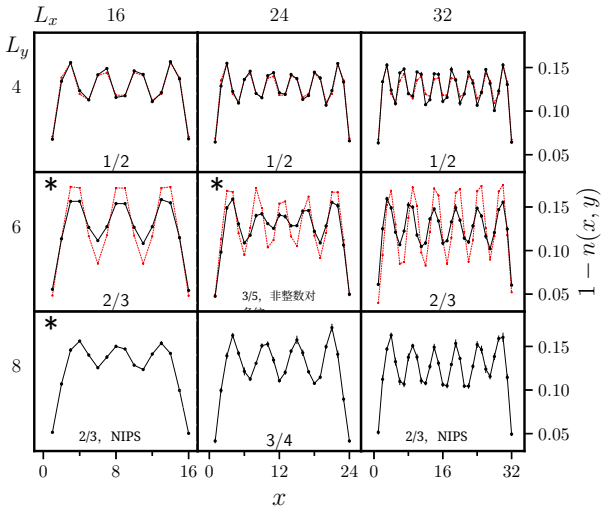

FIG. 4. 本文图2中各系统的空穴密度

本文图2中各系统的条纹图样随系统尺寸的演变。空穴密度以沿圆柱长度方向的线切片表示。三列中圆柱的长度（L_x）各不相同，各行中圆柱的宽度（L_y）各不相同。在圆柱的两个边缘（$x = 1$ 和 $x = L_x$）施加反铁磁钉扎场，钉扎场可以同相，也可以存在 π相移（以星号标记）；图中展示能量较低的情况。每种条纹图样的填充分数 f 均有标示，其中 NIPS 表示非整数对条纹。宽度为 4 和 6 的系统采用 DMRG（红色）结果，辅助场量子蒙特卡罗（黑色）结果与之吻合良好。

倾向于对各种状态进行平均，与早期方法相比，这有助于更好地外推至热力学极限[6]。

V. 施加配对场时的能级交叉

除了在t' 哈伯德模型中，基态对边界条件和系统尺寸的敏感性增强之外，基态随所施加配对场强度的演化也颇为微妙，并带来了另一项计算挑战。作为示例，我们在图3(a)和(b)中展示了一个 20×4 系统在$1/5$ 空穴掺杂下，若干低能态随 h_d变化的演化。随着 h_d 减小，这些彼此之间能量差极小的低能态（注意图 b 中较小的能量尺度）会在若干分支之间发生交叉。这些不同分支的特征在于各状态中的条纹数目不同，如图3(c)和(d)所示。该 d波配对场会诱发强烈的能级交叉，这进一步表明系统中条纹态的涨落与超导性密切相关。如前所述，这种能级交叉使 DMRG 与辅助场量子蒙特卡罗之间的比较更具挑战性，因为每次计算往往都对计算参数的细微变化十分敏感。不过，采用扭曲平均可以减弱这一影响；在扭曲平均中，所有低能态都会被采样。正如正文图 5 所示，扭曲平均边界条件有效地处理了随 h_d变化的交叉，从而得到平滑曲线，且 DMRG 与辅助场量子蒙特卡罗的结果非常吻合。

VI. 补充数据

A. $1/8$ 空穴掺杂系统的空穴密度

图4展示了正文图2中各系统的空穴密度。对于可使用 DMRG 计算的宽度为 4 和 6 的系统，我们发现辅助场量子蒙特卡罗与 DMRG 结果吻合良好。对于宽度为 6 的系统，与正文图2中的自旋结果相比，这里的密度结果差异略大。这可能是以下两个因素共同作用的结果。首先，辅助场量子蒙特卡罗在 $t' = 0$ 哈伯德模型中表现出轻微低估条纹中密度涨落幅度的倾向 [4, 7]。其次，在某些情况下，我们发现，即使使用了极大的键维数，宽度为 6 的系统中 DMRG 也可能尚未完全收敛。

B. 配对序参数的补充数据

在本小节中，我们列出配对序的有限尺寸数据，以及用于获得热力学极限下自发配对序的外推过程；该结果绘于正文中的图1。

1. *Electron doped region*

图5、图6和图7分别展示了电子掺杂区域中配对序的数据，对应 $\delta = 1/8,\ 1/5$ 和 $1/3$。如正文所述，我们采用完全周期性系统（即环面模拟单元 $L_x \times L_y$），并使用拟随机扭转实施扭曲平均边界条件。我们已验证，关于L_x 的结果已收敛至统计误差范围内。对系统宽度进行配对序外推时，我们舍弃宽度为4的系统。对热力学极限下的数值随 h_d 的变化进行外推时，我们同时进行线性拟合和二次拟合。在线性拟合中，当数据明显处于线性响应区间时，我们使用 $h_d < 0.05$。在二次拟合中，我们纳入更多数据点，即 h_d的10至12个取值。我们发现，外推得到的 Δ_d（$h_d \to 0$）值为通常难以区分。出现差异时，采用拟合效果更好（ χ^2更小）的结果。如正文图1所示， $\delta = 1/8, 1/5$和 $1/3$在TDL下的最终配对序分别为0.007(3)、0.007(4)和0.000(2)。

2. *Hole doped region*

图8、图9、图10和图11分别给出了空穴掺杂区域中 δ =$1/8, 1/5, 1/4$和 $1/3$ 的配对序数据。正文图1显示，$\delta = 1/8, 1/5, 1/4$和 $1/3$ 在TDL下的最终配对序分别为0.017(3)、0.016(2)、0.007(3)和0.002(3)。

[1]H. Shi 和 S. Zhang, 《物理评论B辑》**95**, 045144 (2017), 网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB. 95.045144.[2] M. Qin、C.-M. Chung、H. Shi、E. Vitali、C. Hubig、U. Schollw¨ock、S. R. White 和 S. Zhang（Simons 多电子问题合作组）, 《物理评论X》**10**, 031016 (2020), 网址：https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevX.10.031016. [3] M. Qin、H. Shi 和 S. Zhang, 《物理评论B辑》**94**, 085103 (2016), 网址：https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.94.085103. [4] H. Xu、H. Shi、E. Vitali、M. Qin 和 S. Zhang, 《物理评论研究》**4**, 013239 (2022), 网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.4.013239. [5]S. Jiang、D. J. Scalapino 和 S. R. White，美国国家科学院院刊 **118**，e2109978118（2021），https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2109978118, URL https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas. 2109978118。[6] H.-C. Jiang 和 T. P. Devereaux, 《科学》**365**，1424（2019），1806.01465。[7] M. Qin、H. Shi 和 S. Zhang, 《物理评论B辑》**94**，235119（2016），URL https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.94.235119。

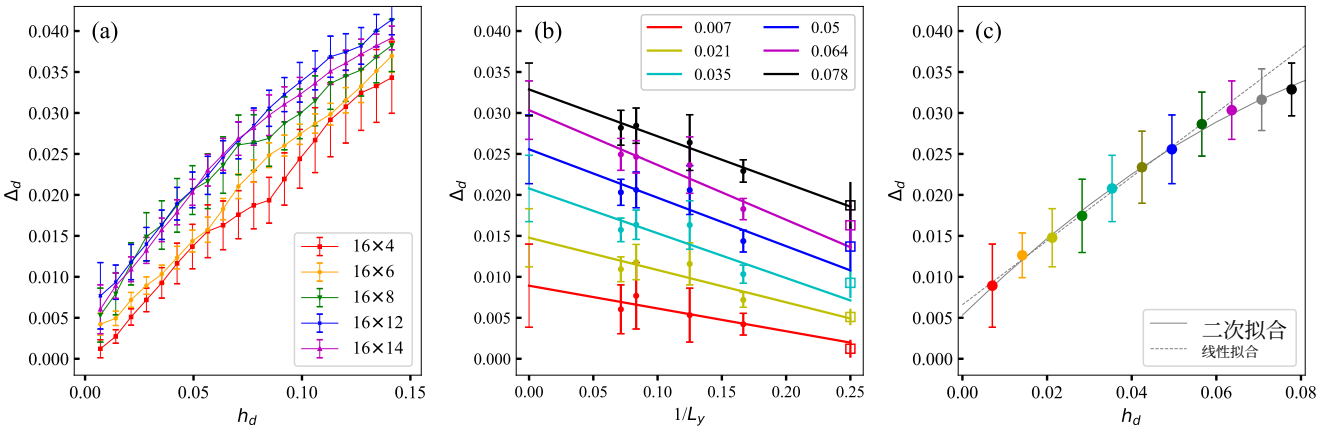

图 5：1/8电子掺杂时配对序的外推。(a) 展示了不同系统尺寸下，配对序参量随配对场的变化。每个 $L_x \times L_y$ 环面的数据均通过采用拟随机扭转的扭曲平均边界条件 (TABC) 得到（k_x，k_y）。较小系统的扭转数为几十个，较大系统的扭转数约为十几个。(b) 展示了固定配对场下，配对序随系统宽度的外推。(c) 将 (b) 中的外推值绘制为配对场的函数，再将配对场外推至 $h_d \to 0$，即可得到热力学极限下的自发配对序。线性拟合和二次拟合得到的结果一致。

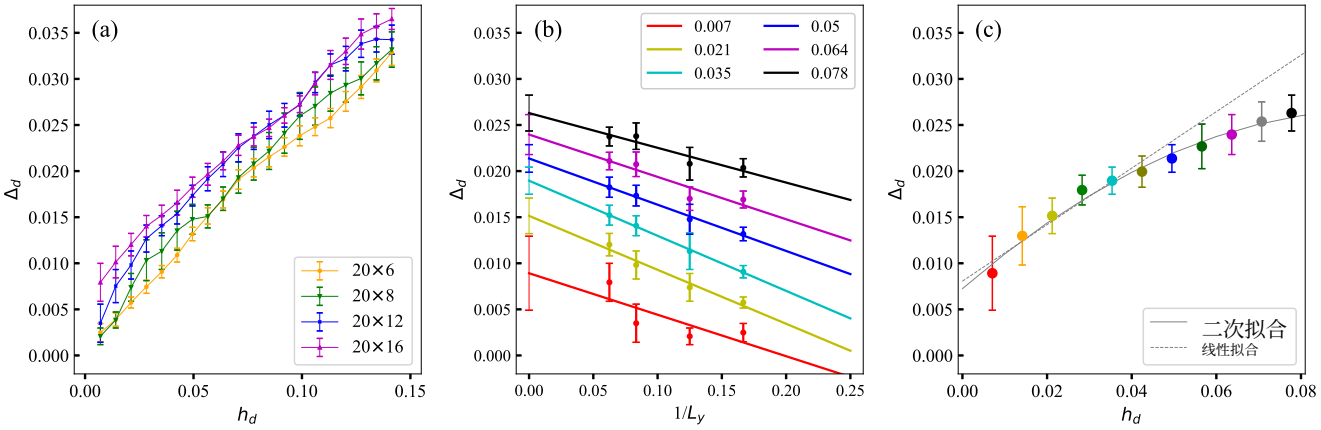

图 6：与图 5 类似，但对应 $1/5$ 电子掺杂。

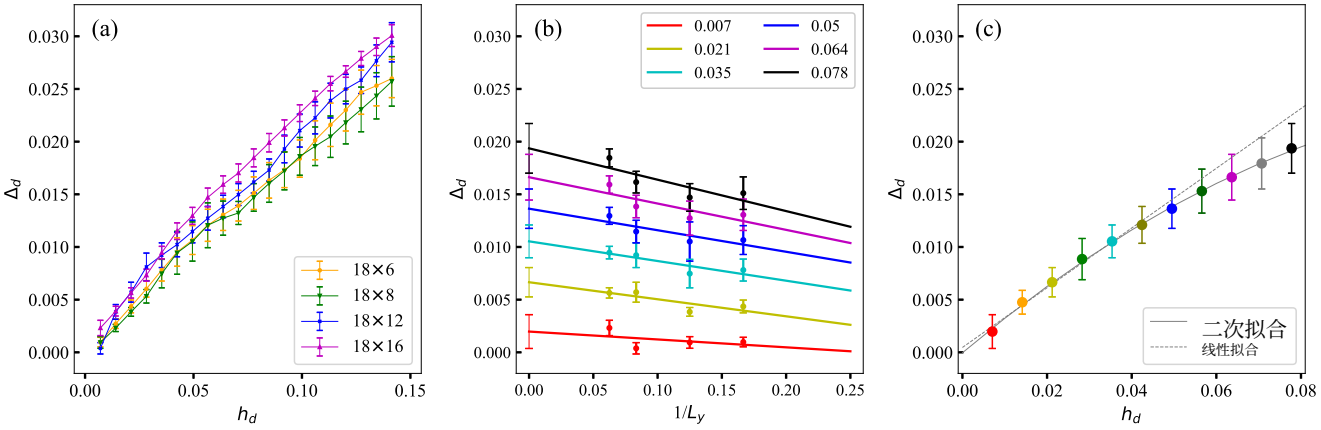

图7：与图 5 类似，但对应 $1/3$ 电子掺杂。

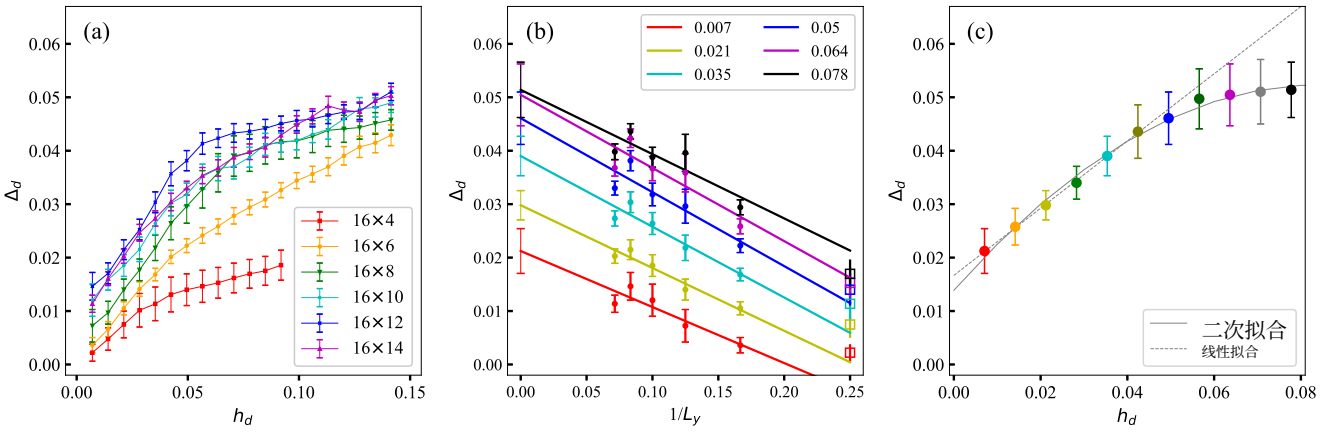

图 8：与图 5 类似，但对应于 1/8 空穴掺杂。

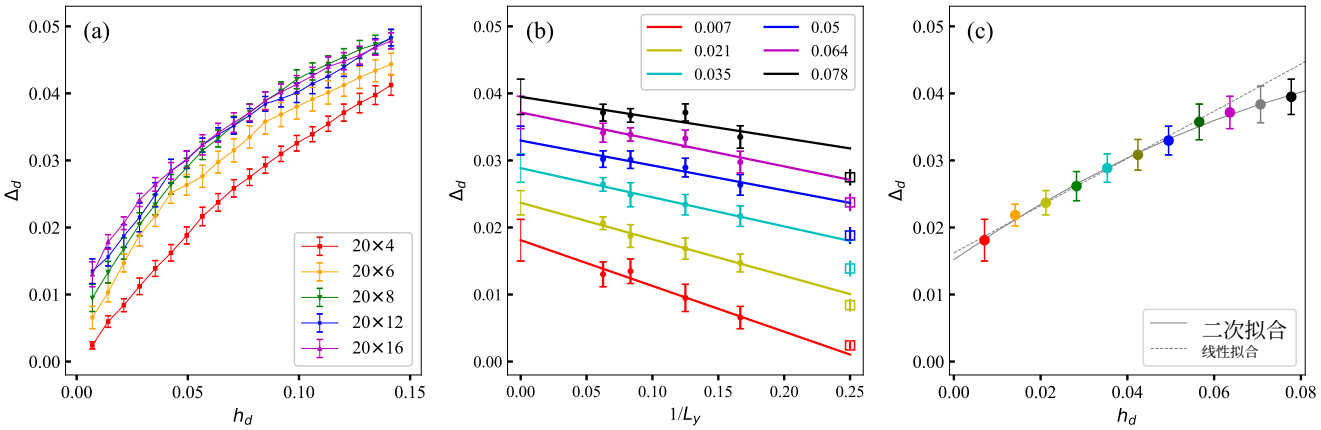

图 9：与图 5 类似，但对应于 1/5 空穴掺杂。

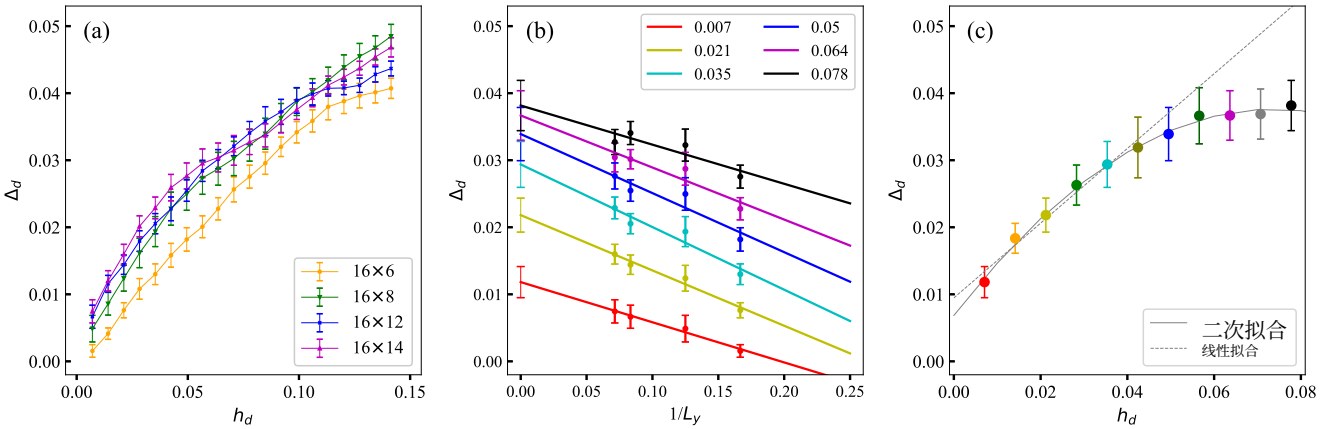

图 10：与图 5 类似，但对应于 1/4 空穴掺杂。

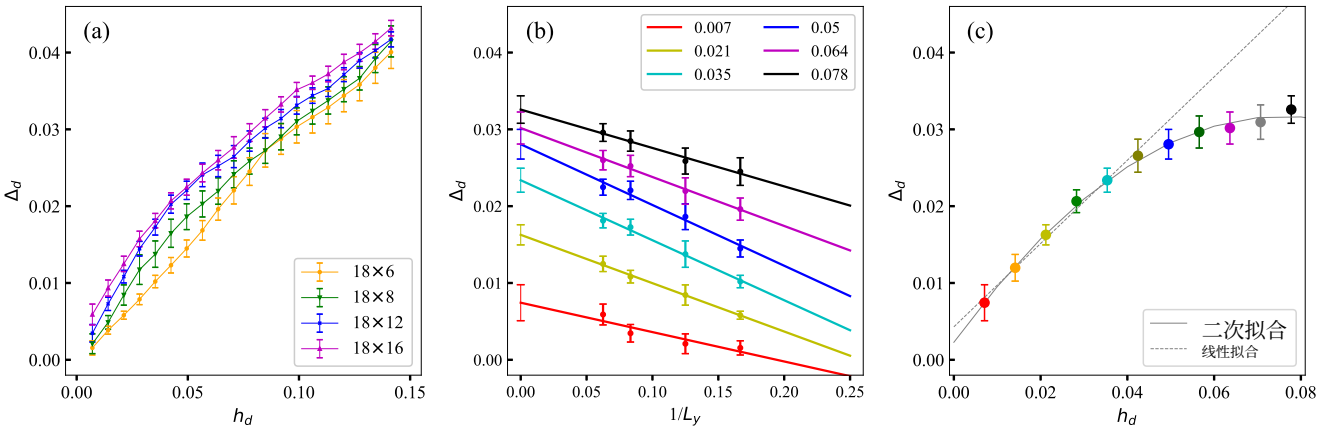

图 11：与图 5 类似，但对应于 $1/3$ 空穴掺杂。