

# 三维费米-哈伯德模型的反铁磁和热力学性质

何院耀

西北大学现代物理研究所, 西安 710127

## 摘要

在凝聚态物理领域, 费米-哈伯德模型是描述相互作用多电子体系的重要基础模型, 与关联电子材料中的量子磁性和高温超导等量子多体现象有着深刻联系。相较于研究较多的二维体系, 三维费米-哈伯德模型的相关探索仍显不足。近年来, 随着其有限温反铁磁相变在超冷原子光晶格实验中被成功实现, 该三维模型正逐渐引起越来越多的关注。本文简略介绍国内外研究组在三维费米-哈伯德模型理论研究中的主要进展, 分析其对理解强关联电子体系基础物理性质的意义, 并讨论该模型中若干值得关注的重要问题。

**关键词:** 费米-哈伯德模型, 反铁磁相变, 热力学性质, 金属-绝缘体渡越, 多体数值计算  
通信作者. E-mail: heyuanyao@nwu.edu.cn

## 1. 引言

从基本物理图像出发, 建立简化模型并以此来解释实验现象和揭示深刻物理规律, 是理论物理研究的基本范式。例如, 基于一次量子化的多电子模型, 选取实空间瓦尼尔表象进行二次量子化, 并在窄能带近似条件下, 即可得到单带费米-哈伯德模型 (Fermi-Hubbard model) 的如下哈密顿量:

$$\hat{H} = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

其中  $i, j$  为格点指标,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  为自旋指标, 跃迁系数  $t_{ij}$  包含最近邻 (一般写为  $-t$ )、次近邻 (一般写为  $-t'$ ) 等分量,  $U$  为在位库伦相互作用。该模型最早由 J. Hubbard、J. Kanamori 和 M. C. Gutzwiller 在 1963 年独立提出<sup>[1-3]</sup>, 用于解释在过渡金属及其氧化物中观测到的磁性与金属-绝缘体转变等物理现象。若仅考虑过渡金属元素的  $d$  轨道电子, 氧化镍 (NiO)、氧化钴 (CoO)、氧化锰 (MnO) 及铜酸钡 ( $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ) 等材料均可由三维 Hubbard 模型近似描述。1986 年铜基高温超导体的发现, 使得作为这类材料中铜氧面低能物理近似描述的二维哈伯德模型开始受到人们的广泛关注。此后四十年间, 理论和量子多体数值在该二维模型中的超流、反铁磁、条纹序、赝能隙、奇异金属和  $d$  波超导等新奇物理性质上取得了重要进展<sup>[4,5]</sup>。

相较于二维情形, 三维哈伯德模型的研究更为滞后, 人们对该模型的完整相图 (包括温度、次近邻跃迁、相互作用、填充数等参数) 仍然知之甚少。对于排斥相互作用 ( $U > 0$ ), 先前研究主要集中于半满填充 ( $n = 1$ ) 情形下的有限温反铁磁相变<sup>[6-9]</sup>, 而其热力学性质以及偏离半满的磁性相图则缺乏系统性研究。2024 年, 中国科学技术大学研究团队<sup>[10]</sup>

首次在超冷原子光晶格体系观测到三维哈伯德模型中的反铁磁相变。随后，国内外很多优秀研究组在该三维模型的热力学<sup>[11-13]</sup>、磁性<sup>[14-16]</sup>以及超导<sup>[17]</sup>等方面取得许多重要进展。本文将基于这些研究进展，简要介绍半满填充的三维哈伯德模型的磁性和热力学性质，以及该模型偏离半满时的磁性相图，最后讨论若干尚待深入研究的重要问题。

## 2. 半满填充下三维费米-哈伯德模型的反铁磁与热力学性质

与二维正方晶格模型类似，在半满填充时，三维简立方晶格上的标准哈伯德模型（只考虑最近邻跃迁）的动能色散关系具有完美的费米面嵌套，相应嵌套波矢为 $\mathbf{R} = (\pi, \pi, \pi)$ 。因此，该模型的基态在任意小排斥相互作用即出现奈尔反铁磁序（Néel antiferromagnetic order），并同时打开单粒子能隙<sup>[18]</sup>。在三维情形下，该反铁磁有序相可延伸至有限温度区域，并随温度升高发生反铁磁-顺磁相变，其临界行为属于三维海森堡普适类<sup>[19]</sup>。在相变温度以上，体系处于顺磁相。

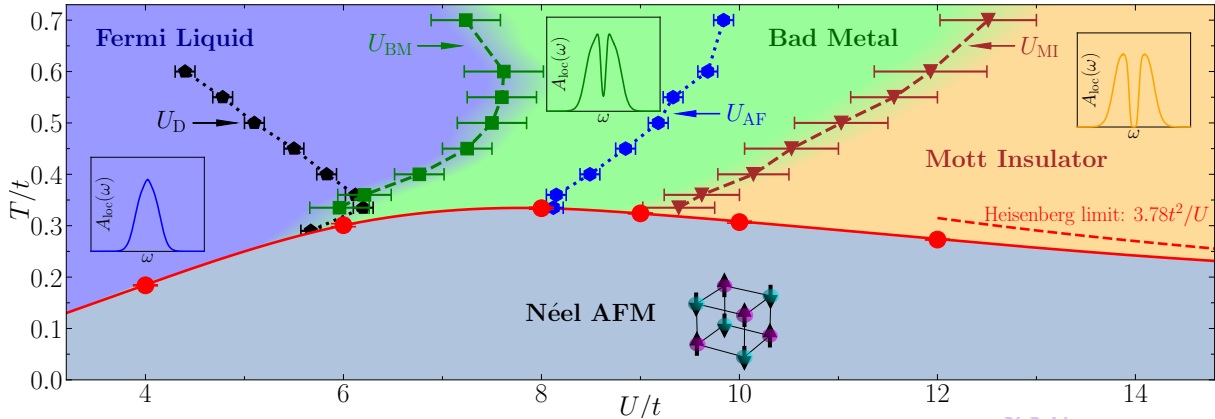


图 1 半满填充下三维费米-哈伯德模型的相图<sup>[11]</sup>。体系在低温区域为反铁磁相，顺磁相存在金属-绝缘体渡越行为：从弱相互作用区域的费米液体态，到中间区域的坏金属态以及强相互作用区域的莫特绝缘体。

Fig. 1. The phase diagram of the half-filled 3D Hubbard model<sup>[11]</sup>. The system is a Néel antiferromagnet in the low-temperature regime, and the paramagnetic phase exhibits a metal-insulator crossover from a Fermi Liquid at weak interactions to a Mott Insulator at strong interactions, with the intermediate crossover regime as a Bad Metal.

基于数值严格的大规模行列式量子蒙特卡洛模拟（最大尺寸 8000 格点）得到的半满三维哈伯德模型完整相图<sup>[11]</sup>如图 1 所示。奈尔反铁磁相占据相图低温区域，相应的反铁磁相变温度随着 $U$ 增大先上升后减小，并在 $U/t = 8$ 附近取得最大值 $T_N/t = 0.334(2)$ 。这些相变温度的计算结果与上海交通大学研究团队同期发表的结果完全一致<sup>[20]</sup>。在相变之上的顺磁相，体系存在由相互作用 $U$ 驱动的金属-绝缘体渡越（Metal-insulator crossover）行为：在小 $U$ 区域，体系为费米液体（Fermi liquid），而在大 $U$ 区域为莫特绝缘体（Mott insulator），且二者之间存在明显的渡越区，称为“坏金属”（Bad metal）态。区别于传统相变，这一金属-绝缘体渡越的特征在于所有物理量均呈现完全平滑的变化，没有任何发散或奇异性。在具体计算方面，反铁磁相变温度可通过反铁磁结构因子

(antiferromagnetic structure factor) 的有限尺寸标度分析得到<sup>[12]</sup>；其中，在小 $U$ 区域（如 $U/t < 4$ ），需采用扭曲平均边界条件（Twisted-average boundary conditions）进行模拟<sup>[21]</sup>，才能克服较强的有限尺寸效应，从而得到准确结果<sup>[12]</sup>。对于上述渡越行为，需结合多种动力学与热力学物理量的特征行为进行刻画（见图 3），并定出相应的渡越边界。

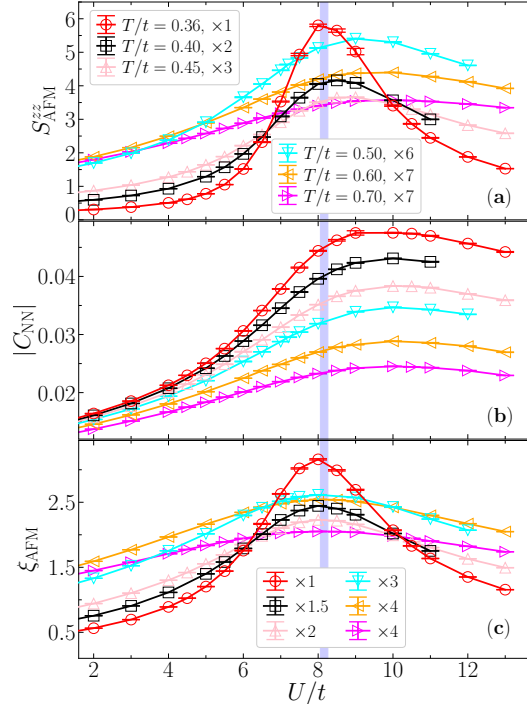


图 2 (a) 反铁磁结构因子, (b) 最近邻自旋关联函数绝对值, (c) 反铁磁关联长度, 随相互作用的变化<sup>[12]</sup>。

Fig. 2. (a) Antiferromagnetic structure factor, (b) absolute values of nearest-neighbor spin-spin correlation, (c) antiferromagnetic correlation length, as a function of the interaction strength.

上述相图中一个有趣的现象是反铁磁相变温度呈现非单调性。这表明在有限温，体系的反铁磁关联也表现出非单调行为：在 $U$ 较小时随 $U$ 增加而增强，在 $U$ 较大时则随 $U$ 增加而减弱。该行为在图 2 中得到明确印证<sup>[12]</sup>：在固定温度 $T/t$ 下，反铁磁结构因子、最近邻自旋关联函数和反铁磁关联长度均表现出非单调性。这一行为可从以下两点来理解：(1) 在小 $U$ 区域，反铁磁关联的增强主要由费米面嵌套主导。嵌套矢量恰好对应于奈尔反铁磁特征波矢 $\mathbf{R} = (\pi, \pi, \pi)$ 。根据 Stoner 理论，反铁磁磁化率 $\chi(\mathbf{R}) = \chi_0(\mathbf{R})/[1 - U\chi_0(\mathbf{R})]$ （其中 $\chi_0(\mathbf{R})$ 为无相互作用的磁化率）会随 $U$ 增大被共振增强，从而驱动反铁磁关联迅速增强。而在大 $U$ 区域，电荷自由度逐渐被冻结，体系可由自旋-1/2 海森堡模型描述，其自旋耦合系数 $J = 4t^2/U$ 随 $U$ 增加而减小，从而导致反铁磁关联逐渐减弱；(2) 费米-哈伯德模型中的固定温度 $T/t = C$ ，等价于海森堡模型中的约化温度 $T/J = C \times U/4t$ ，在 $U \rightarrow \infty$ 时相当于海森堡模型的无穷高温，此时反铁磁关联完全消失。综合这两点，反铁磁关联必然会在中间 $U$ 区域出现最大值，从而解释了上述非单调性。对于反铁磁结构因子，这一最大值的位置恰好出现在相图的渡越区中心附近（图 1 中的 $U_{AF}$ ）。

相较于相变，平滑的金属-绝缘体渡越行为更难以被精确描述，相应的定量研究也少得多。对于费米液体到坏金属的渡越，可通过单粒子谱函数和热力学熵在费米液体中的特征行为来标定：前者在费米能级附近有明确的准粒子峰；而后者与电子有效质量成正比，而有效质量随 $U$ 的增大而增大。因而，单粒子谱函数上准粒子峰消失（或出现凹陷）的位置（图 3(a)和图 3(b)），或热力学熵极大值的位置（图 3(d)），可视为上述渡越的边界（图 1 中的 $U_{\text{BM}}$ ）。二者也确实给出了一致的计算结果<sup>[11,12]</sup>。对于坏金属到莫特绝缘体的渡越，可通过准粒子权重和单粒子谱函数在莫特绝缘体中的特征行为来标定（图 3(e)）：前者应减小到零（通过中间 $U$ 结果的外推），后者在费米能级附近打开能隙。二者也得到一致的渡越边界（图 1 中的 $U_{\text{MI}}$ ）。除上述物理量外，一些常用物理量对于描述金属-绝缘体渡越行为完全失效<sup>[11,12]</sup>，例如双占据。在相互作用驱动的金属-绝缘体相变中，双占据会在相变点附近出现拐点（即下降最快处）。然而，对于上述渡越行为，双占据的拐点位置完全落在费米液体区域（图 1 中的 $U_{\text{D}}$ ），而非预期的渡越区。这一违反传统直觉的异常结果可归因于中等偏高温区域的强热涨落：在此温度区间，双占据拐点已失去明确的物理意义。

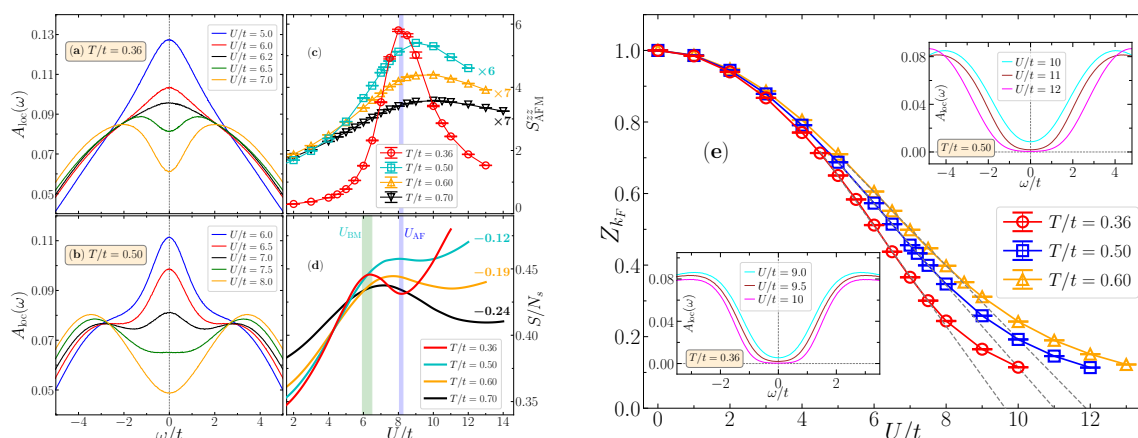


图 3 通过单粒子谱函数、热力学熵和准粒子权重，来确定金属-绝缘体渡越边界<sup>[11,12]</sup>。

Fig. 3. Identification of the metal-insulator crossover boundaries via single-particle spectral function, thermal entropy and quasiparticle weight.

如图 3(d)所示，在金属-绝缘体渡越过程中，热力学熵展现出丰富的非单调行为<sup>[11,12]</sup>：随着 $U$ 的增加，先在费米液体-坏金属渡越边界达到一个极大值，随后出现一个极小值，之后便持续增大。图 3(c)和图 3(d)的对比进一步表明，在较低温区域（比如 $T/t = 0.36$ ），熵的极小值位置（ $U_{\text{S2}}$ ）与反铁磁结构因子的极大值位置（ $U_{\text{AF}}$ ）基本重合。这些现象可通过分解热力学熵为电荷熵和自旋熵两部分来定性理解：电荷熵刻画体系的电荷涨落强度，正比于局域单粒子谱函数在费米能级的值 $A_{\text{loc}}(\omega = 0)$ ；自旋熵则反映体系的自旋无序程度，与反铁磁结构因子成反比。因而，在温度 $T/t = 0.36$ ，上述 $U_{\text{S2}}$ 和 $U_{\text{AF}}$ 的重合表明该温度下的熵几乎完全由自旋熵主导，电荷熵的贡献可忽略——这与极小值点处 $A_{\text{loc}}(\omega = 0) \simeq 0$ 的计算结果一致。在高温区域（ $T/t > 0.50$ ），电荷涨落显著增强，电荷熵贡献不为零且随 $U$ 增加而减小，导致 $U_{\text{S2}} > U_{\text{AF}}$ ，如图 3(c)和图 3(d)所示。物理上，在进入渡越区

后，熵的初始下降源于电荷熵与自旋熵的同时减小，随后的熵上升则归因于体系进入海森堡模型描述的区域——固定温度 $T/t = C$ 在相当于在该模型中不断升温，因此熵持续增加并在 $U \rightarrow \infty$ 时饱和于 $\ln 2$ 。这些分析表明，在大 $U$ 区域，从热力学熵的角度来看，三维哈伯德模型存在明确的自旋-电荷分离行为。

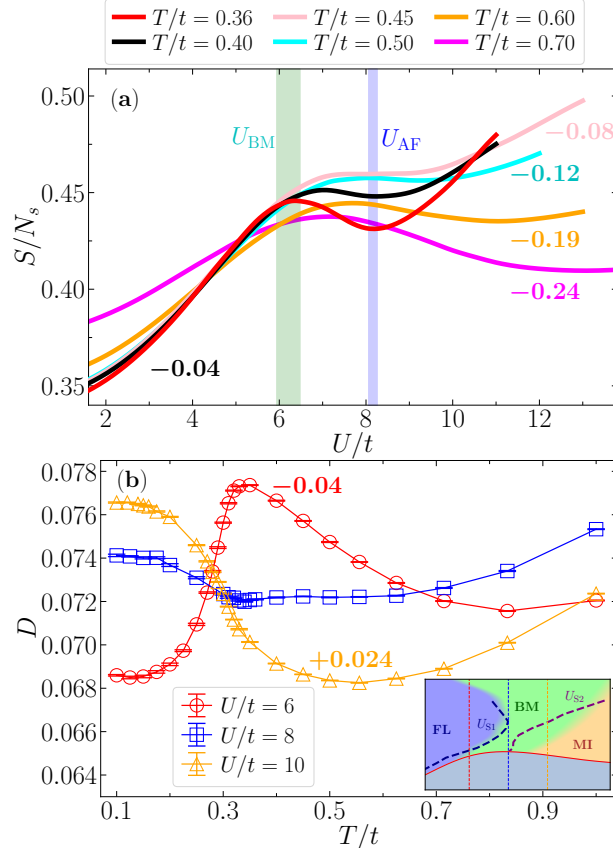


图 4 (a) 热力学熵对相互作用强度的依赖关系<sup>[12]</sup>; (b) 双占据率对温度的依赖关系<sup>[12]</sup>, 插图是图 1 中相图的示意图, 以及热力学熵的极大值位置 ( $U_{S1}$ , 蓝色虚线) 和极小值位置 ( $U_{S2}$ , 紫色虚线)。

Fig. 4. (a) Thermal entropy as a function of interaction<sup>[12]</sup>; (b) Double occupancy as a function of temperature<sup>[12]</sup>, with the inset as a schematic plot of the phase diagram in Fig. 1 including the curves of the local maximum ( $U_{S1}$ , blue dashed line) and local minimum ( $U_{S2}$ , violet dashed line) of thermal entropy.

上述分析表明，热力学熵随 $U$ 增加所呈现的非单调性，是体系金属-绝缘体渡越行为的自然结果。同时，这种非单调性还决定着体系的其他物理性质。首先，熵密度 $s$ 和双占据 $D$ 满足如下麦克斯韦关系 (Maxwell's relation):

$$\left(\frac{\partial s}{\partial U}\right)_T = -\left(\frac{\partial D}{\partial T}\right)_U$$

该关系表明，固定 $U$ 下双占据随温度的变化，由固定温度下熵随 $U$ 的变化决定，如图 4 所示<sup>[12]</sup>。根据图 4(a)中熵随相互作用的变化曲线，标记其极大、极小值位置分别为 $U_{S1}$ 和 $U_{S2}$ ，不同温度下二者的连接曲线见图 4(b)插图虚线。结合上述麦克斯韦关系可得：在 $U < U_{S1}$ 区域（即相图中费米液体区域）和 $U > U_{S2}$ 区域，有 $(\partial s/\partial U)_T > 0$ 以及 $(\partial D/\partial U)_U < 0$ ；而

在中间区域  $U_{S1} < U < U_{S2}$  则有  $(\partial s / \partial U)_T < 0$  以及  $(\partial D / \partial U)_U > 0$ 。由此可分析和理解图 4(b) 中双占据随温度的变化行为：(1) 在弱相互作用区域（如  $U/t = 4$ ），随着温度降低，双占据先从高温极限值 0.25 下降，即  $(\partial D / \partial T)_U > 0$ ，对应于图 4(b) 插图中的  $U_{S1} < U < U_{S2}$  区域；随后达到极小值并开始上升，即  $(\partial D / \partial T)_U < 0$ ，对应于  $U < U_{S1}$  区域；再达到极大值后再次下降，即  $(\partial D / \partial T)_U > 0$ ，再次对应  $U_{S1} < U < U_{S2}$  区域；(2) 在强相互作用区域（如  $U/t = 10$ ），双占据仅出现一个极小值，其随温度下降而下降的部分对应图 4(b) 插图中的  $U_{S1} < U < U_{S2}$  区域，而上升部分则对应  $U > U_{S2}$  区域。双占据随温度的极值点位置则严格对应于熵随  $U$  的极值点位置。在双占据对温度的依赖关系中，最有趣的行为出现在  $(\partial D / \partial T)_U < 0$  的区域——即随着温度降低，双占据反而上升。如图 4 (b) 所示，该行为在  $U/t = 4$  出现在中间温区，在  $U/t = 10$  出现在低温区域。这种反常行为被称为 Pomeranchuk 效应<sup>[22-24]</sup>，可通过图 1 中的相图来理解：在弱相互作用下， $(\partial D / \partial T)_U < 0$  的区域对应于相图的费米液体区域，体系金属性随降温而增强，从而导致双占据上升；在强相互作用下， $(\partial D / \partial T)_U < 0$  的区域对应于  $U > U_{S2}$ ，体系由虚电荷涨落驱动的自旋超交换（海森堡模型）主导，这种量子涨落带来一定的双占据，并在降温时显著增强。

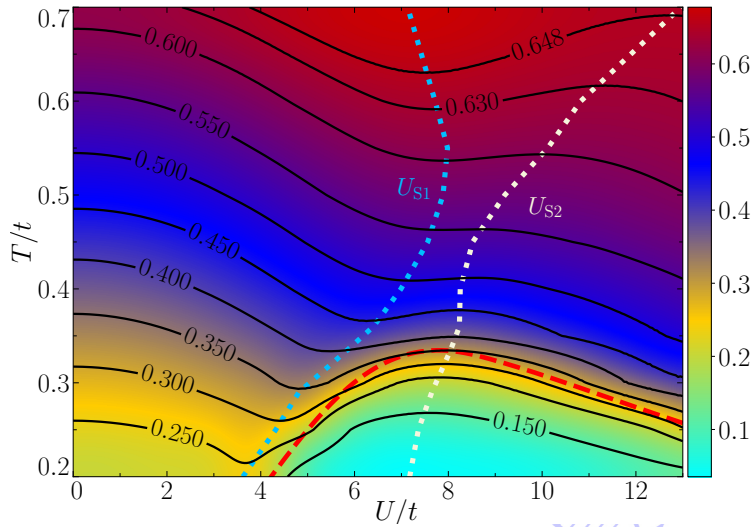


图 5 半满填充下三维费米-哈伯德模型的等熵线图<sup>[13]</sup>。

Fig. 5. The entropy phase diagram of the half-filled 3D Hubbard model<sup>[13]</sup>.

另一个由熵随  $U$  增加的非单调性决定的性质是体系的等熵线，如图 5 所示<sup>[13]</sup>（图中也画出了固定温度下熵对  $U$  的极大值位置  $U_{S1}$  和极小值位置  $U_{S2}$ ）。将等熵线记为  $T_i(U)$ ，则可以得到如下关系

$$\left(\frac{\partial s}{\partial U}\right)_{T=T_i} = -\frac{c(T_i)}{T_i} \frac{dT_i(U)}{dU}$$

其中  $c(T) = T \times (\partial s / \partial T)$  为比热。此关系表明，等熵线对  $U$  的斜率  $dT_i(U) / dU$  与  $(\partial s / \partial U)_T$  具有相反的符号，因而等熵线也由此可分为  $U < U_{S1}$ ， $U_{S1} < U < U_{S2}$  和  $U > U_{S2}$  三个区域，分别对应等熵线的斜率为负、正、负。其中，在  $U < U_{S1}$  和  $U > U_{S2}$  区域中，沿着等熵线

$T_i(U)$ 增加 $U$ ，温度随之下降——此即相互作用驱动的绝热冷却，又被称为 **Pomeranchuk** 制冷<sup>[25]</sup>。这一现象被发现存在于很多其他模型体系和实际材料中，如二维哈伯德模型<sup>[23,24]</sup>、**SU(6)**哈伯德模型<sup>[25,26]</sup>以及魔角石墨烯体系<sup>[27]</sup>。在实际的超冷原子光晶格实验中<sup>[10]</sup>，通过 **Feshbach** 共振调节相互作用 $U$ 的大小时，往往难以满足绝热条件，特别是在大 $U$ 区域。这导致在实验中增加 $U$ 通常伴随着熵增过程——这正是实验测得的反铁磁结构因子峰值位置  $U/t \simeq 11.75$  显著高于数值计算值（在  $U/t \sim 8$  附近）的主要原因<sup>[13]</sup>。

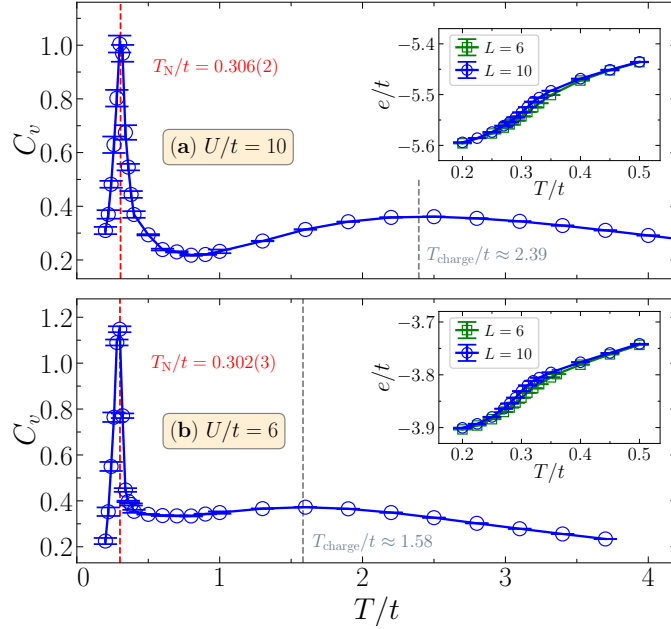


图 6 比热对温度的依赖关系<sup>[12]</sup>: (a)  $U/t = 10$ ; (b)  $U/t = 6$ 。插图是不同尺寸下能量密度  $e/t$  的数值。  
Fig. 6. The specific heat as a function of temperature<sup>[12]</sup> for (a)  $U/t = 10$  and (b)  $U/t = 6$ . The insets show the energy density  $e/t$  for different system sizes.

除了上述与金属-绝缘体渡越直接相关的物性，三维哈伯德模型中还有其他物理量表现出有趣的特征行为，例如比热和电荷压缩率随温度的变化。如图 6 所示<sup>[12]</sup>，比热呈现出典型的双峰结构（通过  $C_v = de/dT$  计算，能量密度  $e$  的结果见插图）——该现象最早在二维正方晶格哈伯德模型中被发现<sup>[28]</sup>并被系统研究<sup>[29]</sup>。比热上的低温峰和高温峰分别被称为自旋峰和电荷峰。对于三维哈伯德模型，自旋峰与体系的反铁磁相变有关。然而，由于海森堡普适类<sup>[19]</sup>的比热临界指数  $\alpha = -0.1336(15)$ ，使得与相变相关的比热奇异部分  $C_v \propto |T - T_N|^{-\alpha}$  不发散，因此自旋峰的位置未必严格对应相变点——这一点受限于数值计算精度难以严格确认。高温区的电荷峰则与体系的电荷激发密切相关，且随着  $U$  的增加，电荷峰的位置会逐渐靠近原子极限理论 ( $\beta U \ll 1$ ) 预测的结果  $\sim 0.208U$ <sup>[12]</sup>。

电荷压缩率的温度依赖关系是可以区分体系是金属还是绝缘体。如图 7(a) 所示<sup>[12]</sup>，电荷压缩率  $\chi_e$  随  $U$  增加而单调减小，在大  $U$  区域基本消失，这与图 1 相图中的金属-绝缘体渡越行为一致。采用简单的判据  $\chi_e < \epsilon$ （其中  $\epsilon \sim 10^{-3}$ ）即可大致标定体系进入莫特绝缘体的位置，其结果与图 2 中由准粒子权重和谱函数给出的结果一致。图 7(b) 展示了电荷压缩

率倒数 $\chi_e^{-1}$ 随温度变化的行为，可见其在高温区域呈现很好的线性，这一点也可以通过原子极限理论 ( $\beta U \ll 1$ ) 得到<sup>[12]</sup>:

$$\chi_e^{-1} \simeq T \left( n - \frac{n^2}{2} \right)^{-1} + \frac{U}{2}$$

其中 $n$ 为体系的费米填充密度。由此可见，不论是在半满 ( $n = 1$ ) 还是有掺杂 ( $n \neq 1$ )， $\chi_e^{-1}$ 在高温区域都有线性行为。此外， $\chi_e^{-1}$ 与直流电阻 $\rho$ 之间满足能斯特-爱因斯坦关系 $\rho = \chi_e^{-1}/D_{\text{diff}}$ ，且扩散系数 $D_{\text{diff}}$ 在高温区域几乎是一个常数，因此电阻 $\rho$ 也显然存在高温线性行为。上述基于原子极限理论的分析可视为哈伯德模型中高温区域线性电阻率<sup>[30,31]</sup>的一个简单理解。上述公式和图7(b)也表明， $\chi_e^{-1}$ 和电阻 $\rho$ 随温度的线性关系在高温下愈发显著，这与许多高温超导体中的实验观测结果一致<sup>[32,33]</sup>。

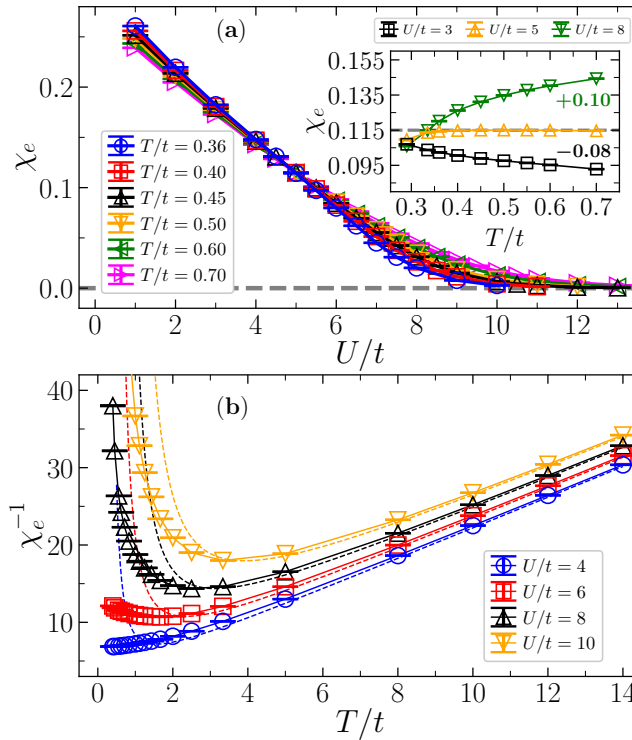


图 7 (a) 电荷压缩率对相互作用强度的依赖关系<sup>[12]</sup>; (b) 电荷压缩率倒数对温度的依赖关系<sup>[12]</sup>。

Fig. 7. (a) The charge compressibility as a function of interaction<sup>[12]</sup>; (b) The inverse charge compressibility as a function of temperature<sup>[12]</sup>.

综上所述，半满填充下三维费米-哈伯德模型最主要的物理性质包括有限温度反铁磁相变和金属-绝缘体渡越行为，且后者决定了该模型的主要热力学性质。这种金属-绝缘体渡越行为在二维正方晶格哈伯德模型中亦已被系统研究<sup>[34]</sup>，并发现熵随相互作用增加表现出类似的非单调行为。比热和电荷压缩率中的特征行为则主要由原子极限理论主导，后者与体系维度无关，因而在二维哈伯德模型中同样呈现出类似行为<sup>[34]</sup>。

### 3. 掺杂三维费米-哈伯德模型的磁性相图

早期的微扰理论研究表明<sup>[35]</sup>，在固定相互作用强度下，掺杂的三维哈伯德模型的反铁磁基态会随着掺杂的引入演化为非公度的自旋密度波（spin-density wave, SDW）态，其特征波矢为 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, q)$ （由空间旋转对称性， $(\pi, q, \pi)$ 和 $(q, \pi, \pi)$ 与之等价），且 $q$ 与掺杂浓度相关。这对应一种典型的三维条纹序——在实空间中的两个方向（如 $x$ 和 $y$ 方向）保持奈尔反铁磁序，而在第三个方向（ $z$ 方向）则呈现长周期条纹调制。此类条纹序在掺杂的二维哈伯德模型中已被广泛研究<sup>[36-38]</sup>。

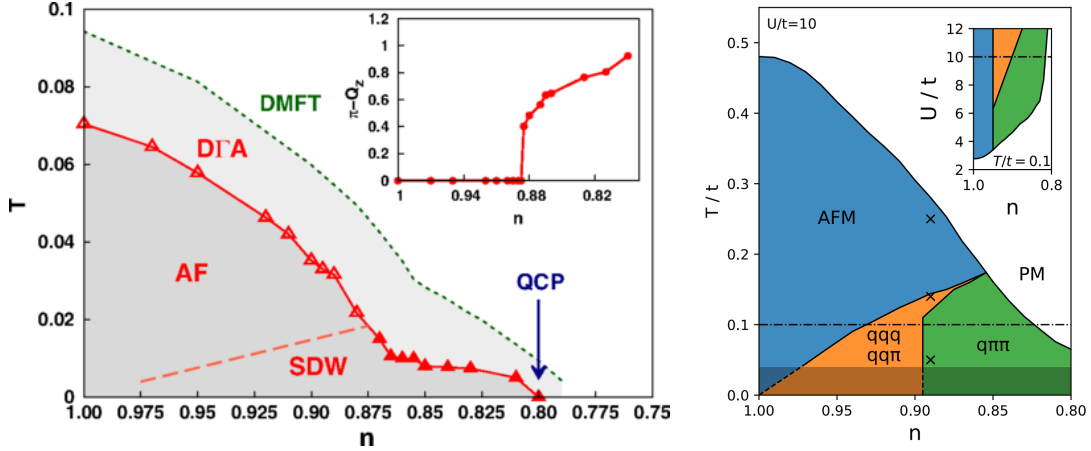


图 8 掺杂三维哈伯德模型的磁性相图：(左) DGA算法得到的 $U \approx 9.8t$ 相图<sup>[14]</sup>；(右) DMFT算法得到的 $U = 10t$ 相图<sup>[16]</sup>，其中特征矢量 $\mathbf{Q} = (q, q, q)$ 和 $(q, q, \pi)$ 代表螺旋磁序， $\mathbf{Q} = (q, \pi, \pi)$ 则表示三维条纹序。

Fig. 8. Magnetic phase diagram of the 3D doped Hubbard model: (left) DGA result for  $U \approx 9.8t$ <sup>[14]</sup>; (right) DMFT result for  $U = 10t$ <sup>[16]</sup>, with the ordering vector  $\mathbf{Q} = (q, q, q)$  and  $(q, q, \pi)$  representing the spiral magnetic order and  $\mathbf{Q} = (q, \pi, \pi)$  standing for the three dimensional spiral magnetic order.

随后的量子多体数值计算在掺杂三维哈伯德模型中证实了上述三维条纹序的存在。如图 8(a)所示<sup>[14]</sup>，基于动力学顶点近似（Dynamical Vertex Approximation, DGA）算法的研究表明，半满填充下的奈尔反铁磁相在有限温度下会延伸到有限掺杂区域；而在基态附近，体系在很小的掺杂下便进入条纹序相；此外，该体系在电子填充密度 $n_c \approx 0.805$ 发生条纹序-无序量子相变（其中 $U/t \approx 9.8$ ）。这项研究还探讨了该量子相变的临界行为，提出驱动相变的机制为费米面的科恩反常（Kohn anomalies），与传统的 Hertz-Millis-Moriya 理论不符。最近的动力学平均场理论（Dynamical Mean-Field Theory, DMFT）计算得到了类似的磁性相图（ $U/t = 10$ ），如图 8(b)所示<sup>[16]</sup>。该研究改进了 DMFT 计算自由能的方法，并以此识别出了相图中的各种磁有序相。然而，与前期研究<sup>[14,35]</sup>不同的是，在较小掺杂（ $n > 0.93$ ）的低温区域发现了特征波矢为 $\mathbf{Q} = (q, q, \pi)$ 和 $\mathbf{Q} = (q, q, q)$ 的磁螺旋相——一种不同于三维条纹序的磁有序态。这些研究得到的掺杂三维哈伯德模型的磁性相图在定性上具有明确的合理性，但在定量上因存在不可控误差，仍有待更高精度的多体数值计算加以验证，并需要更进一步的系统性研究。

## 4. 总结与展望

迄今，半满填充条件下三维费米-哈伯德模型的物理性质及其所蕴含的物理图像，已基本清晰<sup>[6-9,11-13]</sup>。目前，该模型的研究重点与难点已转向掺杂体系的磁性和热力学性质，特别是以下关键问题：与二维体系相比，三维哈伯德模型在掺杂下是否会出现赝能隙现象、奇异金属行为以及  $d$  波超导态等新奇物理性质。然而，受限于多体数值算法的计算能力和精度，这些问题目前几乎没有任何可靠的定性或定量的理论结果。在排斥相互作用下，该模型可能出现的超导配对可能与二维体系有显著区别：三维各向同性体系空间点群为  $O_h$  群，因而不会出现类似于二维体系的面内  $d$  波超导配对。基于这一点，北京理工大学和西湖大学研究团队<sup>[17]</sup>利用弱耦合和强耦合理论分析，提出了具有三维  $d_{3z^2-r^2} + id_{x^2-y^2}$  配对称性的三维外尔拓扑超导态。与此相关，在掺杂的三维哈伯德模型中实现二维的面内  $d$  波超导配对的一种可能途径是，在模型中引入  $z$  方向的跃迁各向异性以破缺  $O_h$  对称性，从而将该模型转变为准二维体系。这一思路也与目前多类高温超导材料（如常见的铜基高温超导体<sup>[32]</sup>）的实际空间结构相一致。上述具体问题均有待于理论分析与量子多体计算的系统研究。

另一方面，基于超冷原子的光晶格量子模拟近年来取得了突破性进展，已成为研究哈伯德模型的重要范式。特别地，光晶格实验成功观测到三维费米-哈伯德模型中的反铁磁相变<sup>[10]</sup>并完成了相关热力学物理量的测量<sup>[39]</sup>，这是费米-哈伯德模型量子模拟的重要里程碑，为后续更深入的探索奠定了坚实基础。展望未来，光晶格量子模拟实验与同样处于高速发展的量子多体数值计算将深度融合、互为促进，有望携手解决三维费米-哈伯德模型中那些悬而未决的重大科学问题。

## 参考文献

- [1] Hubbard J, Flowers B H 1963 *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A* **276** 238
- [2] Kanamori J 1963 *Prog. Theor. Phys.* **30** 275
- [3] Gutzwiller M C 1963 *Phys. Rev. Lett.* **10** 159
- [4] Arovas D P, Berg E, Kivelson S A, Raghu S 2022 *Annu. Rev. Condens. Ma. P.* **13** 239
- [5] Qin M, Schäfer T, Andergassen S, Corboz P, Gull E 2022 *Annu. Rev. Condens. Ma. P* **13** 275
- [6] Staudt R, Dzierzawa M, Muramatsu A 2000 *Eur. Phys. J. B* **17** 411
- [7] Werner F, Parcollet O, Georges A, Hassan S R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 056401
- [8] Kozik E, Burovski E, Scarola V W, Troyer M 2013 *Phys. Rev. B* **87** 205102
- [9] Garioud R, Šimkovic F, Rossi R, Spada G, Schäfer T, Werner F, Ferrero M 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 246505
- [10] Shao H J, Wang Y X, Zhu D Z, Zhu Y S, Sun H N, Chen S Y, Zhang C, Fan Z J, Deng Y, Yao X C, Chen Y A, Pan J W 2024 *Nature* **632** 267
- [11] Song Y F, Deng Y, He Y Y 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 016503
- [12] Song Y F, Deng Y, He Y Y 2025 *Phys. Rev. B* **111** 035123

- [13] Song Y F, Deng Y, He Y Y 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 110710
- [14] Schäfer T, Katanin A A, Held K, Toschi A 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 046402
- [15] Lenihan C, Kim A J, Šimkovic F, Kozik E 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 107202
- [16] Rampon L, Šimkovic F, Ferrero M 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 066502
- [17] Pan Z, Lu C, Yang F, Wu C 2024 arXiv:2411.06932 [cond-mat. str-el]
- [18] Hirsch J E 1985 *Phys. Rev. B* **31** 4403
- [19] Campostrini M, Hasenbusch M, Pelissetto A, Rossi P, Vicari E 2002 *Phys. Rev. B* **65** 144520
- [20] Sun F, Xu X Y 2025 *SciPost Phys.* **18** 055
- [21] Qin M, Shi H, Zhang S 2016 *Phys. Rev. B* **94** 085103.
- [22] Richardson R C 1997 *Rev. Mod. Phys.* **69** 683
- [23] Li Q, Gao Y, He Y Y, Qi Y, Chen B B, Li W 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 226502
- [24] Li G, Antipov A E, Rubtsov A N, Kirchner S, Hanke W 2014 *Phys. Rev. B* **89** 161118
- [25] Cai Z, Hung H h, Wang L, Zheng D, Wu C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 220401
- [26] Taie S, Yamazaki R, Sugawa S, Takahashi Y 2012 *Nat. Phys.* **8**, 825
- [27] Rozen A, Park J M, Zondiner U, Cao Y, Rodan-Legrain D, Taniguchi T, Watanabe K, Oreg Y, Stern A, Berg E, Jarillo-Herrero P, Ilani S 2021 *Nature* **592** 214
- [28] Duffy D, Moreo A 1997 *Phys. Rev. B* **55** 12918
- [29] Paiva T, Scalettar R T, Huscroft C, McMahan A K 2001 *Phys. Rev. B* **63** 125116
- [30] Huang E W, Sheppard R, Moritz B, Devereaux T P 2019 *Science* **366** 987
- [31] Brown P T, Mitra D, Guardado-Sanchez E, Nourafkan R, Reymbaut A, Hébert C D, Bergeron S, Tremblay A M S, Kokalj J, Huse D A, Schauß P, Bakr W S 2019 *Science* **363** 379
- [32] Hussey N E, Cooper R A, Xu X, Wang Y, Mouzopoulou I, Vignolle B, Proust C 2011 *Phil. Trans. R. Soc. A* **369** 1626
- [33] Hsu Y T, Lee K, Badoux S, Duffy C, Cuoghi A, Wang B Y, Kool A, Haïk-Dunn I, Hwang H Y, Hussey N E 2024 *Nat. Commun.* **15** 9863
- [34] Lu M, Song Y F, Deng Y, He Y Y 2016 arXiv: 2602.22705 [cond-mat. str-el]
- [35] Tahvildar-Zadeh A N, Freericks J K, Jarrell M 1997 *Phys. Rev. B* **55** 942
- [36] Zheng B X, Chung C M, Corboz P, Ehlers G, Qin M P, Noack R M, Shi H, White S R, Zhang S, Chan G K L 2017 *Science* **358** 1155
- [37] Xu H, Chung C M, Qin M, Schollwöck U, White S R, Zhang S 2024 *Science* **384** eadh7691
- [38] Xiao B, He Y Y, Georges A, Zhang S 2023 *Phys. Rev. X* **13** 011007
- [39] Wang Y X, Shao H J, Zhu Y S, Zhu D Z, Sun H N, Chen S Y, Yao X C, Chen Y A, Pan J W 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 043403

# Antiferromagnetic and thermodynamic properties of the three-dimensional Fermi-Hubbard model

HE Yuanyao

*Institute of Modern Physics, Northwest University, Xi'an 710127, China*

## Abstract

In condensed matter physics, the Fermi-Hubbard model is a fundamental model for describing interacting many-electron systems and is closely related to quantum many-body phenomena in correlated electron materials, especially including quantum magnetism and high-temperature superconductivity. Compared with the extensively studied two-dimensional systems, the three-dimensional (3D) Fermi-Hubbard model remains less explored. In recent years, however, with the successful experimental realization of its finite-temperature antiferromagnetic phase transition in ultracold atomic optical lattice, this 3D model has been gradually attracting growing interest. This article provides a concise and timely overview of the major theoretical progress on the three-dimensional Fermi-Hubbard model from research groups worldwide, analyzes its significance for understanding the fundamental physics of strongly correlated electron systems, and discusses several important issues that deserve further attention.

The paper is organized as follows. We begin with a brief introduction of the Fermi-Hubbard model, emphasizing its fundamental role as a minimal paradigm for strongly correlated electron systems, and summarize its recent progress in both theoretical and experimental studies. Next, we provide a comprehensive review of the most recent determinantal quantum Monte Carlo (DQMC) studies of the half-filled 3D Hubbard model. This includes a detailed examination of the antiferromagnetic (AFM) and thermodynamic properties at finite temperature, with a particular focus on the AFM phase transition and the metal-insulator crossover (MIC) phenomenon that emerges above the Néel transition. The temperature dependences of commonly used observables are also discussed, including the double occupancy, specific heat, and charge susceptibility. In the third section, we review several many-body computational studies on the magnetic phase diagram of the 3D doped Hubbard model, including the AFM phase and the spin-density wave phase. Finally, we highlight the outstanding challenges in the 3D doped Hubbard model, with an emphasis on the possible emergence of fermion pairing and unconventional superconductivity. We also discuss the direction of combining many-body precision computation with quantum simulation based on ultracold atomic optical lattice experiments to jointly resolve the major outstanding scientific problems in the 3D Fermi-Hubbard model.

**Key words:** Fermi-Hubbard model, antiferromagnetic phase transition, thermodynamic properties, metal-insulator crossover, many-body numerical calculations