

二维半充满 Hubbard 模型有限温度下 绝缘体——金属相变的研究*

陈 锋 应和平 徐铁锋 李文铸

(浙江大学物理系,杭州 310027)

(1993年8月11日收到)

二维半充满条件下的 Hubbard 模型:在有限温度下,是否经历一绝缘体——金属相变?在现有的文献中,这一直是一个有争议而又重要的问题。本文采用巨正则量子 Monte Carlo 方法,计算了二维半充满条件下 Hubbard 模型的比热和电导率。对不同的库仑排斥势 $U(2t-8t)$, 比热曲线在高温区出现一个峰,同时电导率在相应温区呈现一突然上升。因此,计算结果支持存在这样一个相变。

PACC: 7130;0250;7110

1 引 言

Hubbard 模型是研究强关联电子系统的最简单模型之一。自从 Anderson 指出^[1]在高温氧化物超导体中电子的强关联可能起主要作用后, Hubbard 模型又引起了人们极大的兴趣。人们只在一维情形下找到了 Hubbard 模型的严格解。对于二维情形,各种平均场理论又往往给出互相矛盾的结论。因此对模型的各种物理性质有待进一步的认识和澄清。现在比较一致的看法是二维半充满条件下 Hubbard 模型的基态是反铁磁绝缘体^[2]。在有限温度下,系统是否经历一绝缘体—金属相变,这是一个非常重要而又有争议的问题,因为它直接关系到我们对强关联电子系统的正常态性质的认识和理解。

Dohiach^[3] 基于平均场近似,指出随着温度的升高,半充满条件下的 Hubbard 模型将从绝缘态转变为金属态。Bari 和 Kaplan^[4] 讨论了 $\Delta/U \ll 1$ 情形下的 Hubbard 模型,却得到了否定的结论。最近, Hirsch^[5] 采用量子 Monte Carlo 方法计算了磁化率。在电荷激发能隙与磁化率有相同标度的假设下,他用标度律分析了二维半充满条件下 Hubbard 模型的能隙。结果表明,能隙在所有温度下始终存在。这样,系统将不会发生绝缘体—金属相变。但是他的假设是以平均场的结果作依据,因此其正确性一直是有疑问的。White 将最大熵方法结合到量子 Monte Carlo 方法中,计算得到了 Hubbard 模型的谱函数。他发现存在一个有限温度 T_c , 当温度大于 T_c 时,电荷激发能隙将消失。从而,他得到了肯定的结论。

* 国家自然科学基金及浙江省自然科学基金资助的课题。

因此,有必要做进一步的研究,以确定半充满条件下的 Hubbard 模型在有限温度下是否存在绝缘体-金属相变。比热和电导率是两个经常用来判断系统是否发生相变的物理量,同时它们与系统的电子结构和各种关联(比如反铁磁关联)有直接的关系,值得仔细研究。

本文采用巨正则量子 Monte Carlo 方法,计算了二维半充满条件下 Hubbard 模型的比热和电导率。巨正则量子 Monte Carlo 方法是近几年发展起来的处理强关联格点系统的非微扰数值模拟方法^[5,7,8]。在中间耦合区域(库仑排斥势 $U \sim 2t-8t$),用它来研究 Hubbard 模型已取得很大成功。

2 计算方法

单带 Hubbard 模型的哈密顿量为

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

其中 $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) 为产生(湮没)算符,在格点 i 上产生(湮没)一个自旋为 σ 的电子。 t 为跃迁系数,求和在最近邻格点之间进行。 U 为同一格点上自旋相反的电子之间的库仑排斥势。

系统的比热是通过内能 E 来确定的,即

$$c = -\beta^2 \frac{\partial E}{\partial \beta}, \quad (2)$$

其中 β 为温度的倒数,内能 E 可从对哈密顿量(1)式求热力学平均而得到。

根据 Kubo 公式和 Kohn 的工作^[9],二维正方格点上 Hubbard 模型的复电导率 $\sigma(\omega)$ 为

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{2iN(\omega + i\eta)} \langle -T \rangle + \frac{iN}{\omega + i\eta} \pi(\omega + i\eta), \quad (3)$$

其中 η 为正无穷小量, N 为总格点数, $\langle \dots \rangle$ 表示求热力学平均, T 为哈密顿量(1)式中的动能项。 $\pi(\omega)$ 为实时流流关联函数。

如果忽略各种消散过程,复电导率 $\sigma(\omega)$ 可分解成两项

$$\sigma(\omega) = D\delta(\omega) + \sigma_{\text{reg}}, \quad (4)$$

其中正规项 σ_{reg} 在 $\omega \rightarrow 0$ 时保持有限,Drude 因子 D 为

$$D = \frac{e^2 \pi}{N} \langle -T \rangle + \pi N \text{Re} \pi(0), \quad (5)$$

D 反应了系统对静外场 ($\omega \rightarrow 0$) 的响应。对金属, $D > 0$; 对绝缘体, $D = 0$ 。(5)式中等号右端第一项可用量子 Monte Carlo 方法直接计算,而第二项则不同。为此,我们定义虚时流流关联函数

$$J(\tau) = \langle j_x(\tau) j_x(0) \rangle, \quad (6)$$

其中流算符 j_x 为

$$j_x = -\frac{ie\tau}{N} \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (x_i - x_j) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad (7)$$

x_i 为格点 i 的位矢的 x 分量, $J(\tau)$ 的 Fourier 分量为

$$J(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \exp(i\omega_n \tau) J(\tau), \quad (8)$$

其中 $\omega_n = 2\pi n/\beta$, n 为整数. $J(i\omega_n)$ 经解析延拓后, 可得 $\pi(\omega)$

$$\pi(\omega + i\eta) = -J(i\omega_n)|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta}. \quad (9)$$

用量子 Monte Carlo 模拟, 仅可获得 $J(\tau)$ 的数据. 我们采用一解析函数来拟合 $J(\tau)$ 的数据^[10], 然后将此解析函数延拓, 由此得到了 $\pi(\omega)$ 和电导率 σ .

3 结果与讨论

图 1 为 Drude 因子 D 随温度变化曲线. 模拟过程在 4×4 正方格点上进行, 采用周期边界条件. 库仑排斥势 U 分别取为 2, 4 和 8 (取 $t = 1$, 以下同). 从图 1 上可看到, 在低温时 D 非常小. 随着温度的增加, D 呈现一突然增大. 随着 U 的增大, D 增大点也相应右移. 半充满条件下 Hubbard 模型的基态为反铁磁绝缘体. 因此在低温时电导率非常小. 随着温度的增加, 系统中反铁磁关联逐渐减弱. 电导率的增大, 表明电荷激发能隙逐渐减小并趋于零. 因此, 系统经历了绝缘体—金属相变, 而进入金属态.

图 2(a)—(c) 为不同的库仑排斥势 U 下, 比热随温度的变化关系. 计算机模拟在 6×6 和 4×4 正方格点上进行, 采用周期边界条件. 从图上可知比热曲线有一个低温峰和一个高温峰. 低温峰的出现, 是因为随着温度的降低, 系统从顺磁态转变为反铁磁态. 对较大的 U , 此峰略向右移动. 这个结果与磁结构因子的模拟结果和 RPA 理论的计算结果相一致^[1].

比热曲线出现高温峰表明系统的电子结构发生了变化. 温度较高时 (热运动能量与 U 同数量级), 系统中存在着两种单粒子激发态: 空穴或双占据态, 并且这两种激发态是稳定的, 它们能在格点之间自由运动. 也就是说电荷在系统中的转移非常容易. 这样, 系

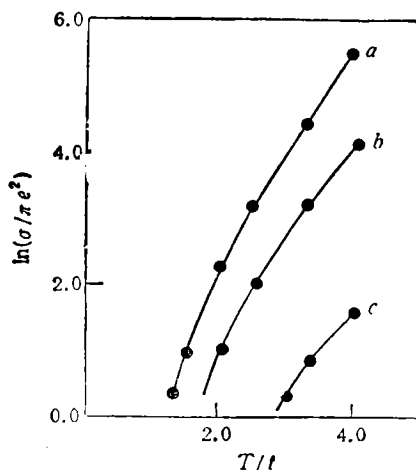


图 1 不同库仑排斥势 U 下, 4×4 正方格点上电导率随温度的变化曲线
曲线 a: $U = 2$; 曲线 b: $U = 4$; 曲线 c: $U = 8$

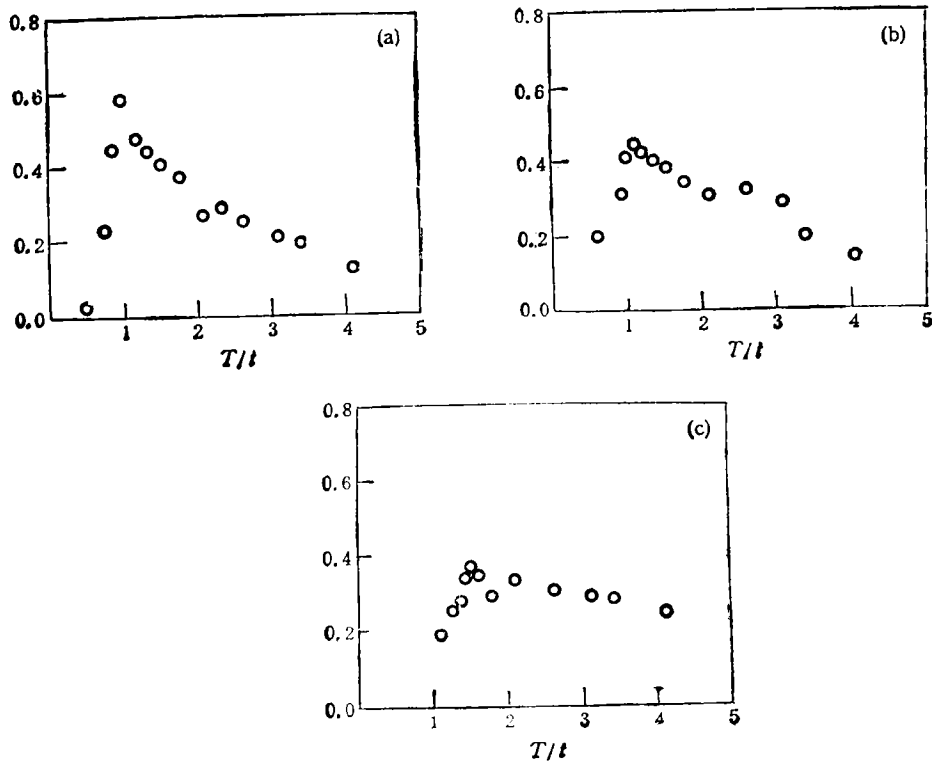


图2 不同库仑排斥势 U 下,比热 c 随温度变化曲线 (a)为 $U=2, 6 \times 6$ 格点; (b)为 $U=4, 4 \times 4$ 格点; (c)为 $U=8, 4 \times 4$ 格点

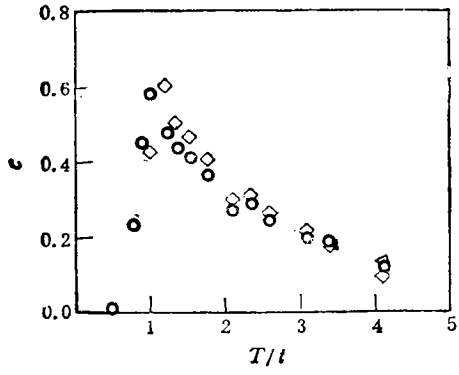


图3 比热 c 随温度变化曲线 $U=2$; \triangle : 6×6 格点; \circ : 4×4 格点; \diamond : 3×3 格点

统就进入了金属态。这一过程在比热曲线上就表现为在高温区出现一个峰。

比较图2中的(a),(b)和(c),可以看到比热曲线峰位随库仑排斥势 U 的变化情况。当 U 逐渐增大时,高温峰和低温峰逐渐合二为一。当 $U \rightarrow +\infty$ 时,比热曲线将只出现一个峰。已经得到证明,在大 U 极限下半充满条件下的 Hubbard 模型等价于 Heisenberg 模型。因此,比热曲线峰对应于 Heisenberg 模型的反铁磁转变。此时系统中的电荷已被限制在格点上了。

为了研究格点系统的尺寸效应,我们在图3中给出了 $U=2$ 时 $6 \times 6, 4 \times 4$ 和 3×3

正方格点上的比热曲线。从图 3 中可以看到,随着格点数的增大,比热曲线逐渐靠近,其中 6×6 和 4×4 的结果,在计算误差范围内完全一致。这说明系统的有限尺寸效应非常小。

4 小 结

为了研究二维半充满条件下 Hubbard 模型在有限温度时绝缘体—金属相变,我们采用巨正则量子 Monte Carlo 方法,计算了模型的比热和电导率。比热曲线在高温区出现了一个峰,而电导率则在相应温区呈现一突然增大。这些结果表明在二维半充满条件下 Hubbard 模型在有限温度下存在绝缘体—金属的相变。

感谢与季达人和唐景昌教授的有益讨论。感谢浙江大学计算中心的帮助和支持。

- [1] P. W. Anderson, *Science*, **235** (1987), 1196.
- [2] J. E. Hirsch and S. Tang, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 591.
- [3] S. Doniach, *Adv. Phys.*, **18**(1969), 819.
- [4] R. A. Bari and T. A. Kaplan, *Phys. Rev.*, **B6**(1972), 4623.
- [5] J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 4403.
- [6] S.R. White, perprint.
- [7] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, *Phys. Rev.*, **D24** (1981), 2278; D. J. Scalapino and R. L. Sugar, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 4295.
- [8] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis and R. T. Scalettar, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 506.
- [9] K. Kohn, *Phys. Rev.*, **A171**(1964), 133.
- [10] Chen Feng, Ying Heping, Xu Tiefeng and Li Wenzhou, *Chinese Phys. Lett.*, **11**(1994), 57.

INSULATOR-METAL TRANSITION OF THE 2-D HALF-FILLED HUBBARD MODEL AT FI- NITE-TEMPERATURES

CHEN FENG YING HE-PING XU TIE-FENG LI WEN-ZHU
(Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027)
(Received 11 August 1993)

ABSTRACT

In the present paper, we attempt to attack the problem of the existence of insulator-metal transition at finite temperature for a 2 dimensional half-filled Hubbard half-filled model. we used the grand Canonical quantum Monte Carlo method to calculate the electrical conductivity and the specific heat of the system. A peak on the specific heat vs temperature curve in high temperature region is observed, and the electrical conductivity curves show a sudden rise in the same temperature region. Thus, our results support that there exists a transition.

PACC: 7130; 0250; 7110