

一维扩展离子 Hubbard 模型的相图研究

赵红霞 赵晖 陈宇光 鄢永红

Phase diagram of the one-dimensional extended ionic Hubbard model

Zhao Hong-Xia Zhao Hui Chen Yu-Guang Yan Yong-Hong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 107101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.107101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

硅基二氧化钒相变薄膜电学特性研究

[Researches on the electrical properties of vanadium oxide thin films on Si substrates](#)

物理学报.2015, 64(1): 017102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017102>

在半导体-金属相变温度附近氧化钒 ϵ 的异常变化

[Abnormal variation of optical properties of vanadium oxide thin film at semiconductor-metal transition](#)

物理学报.2014, 63(10): 107104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107104>

多轨道 Hubbard 模型的玻色子数值算法研究

[Numerical algorithm for slave-boson mean field approach to the multi-band Hubbard model](#)

物理学报.2012, 61(1): 017106 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.017106>

两种扩展 Harper 模型的波包动力学

[Wave packet dynamics of two extended Harper models](#)

物理学报.2011, 60(9): 097104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.097104>

一维扩展离子Hubbard模型的相图研究*

赵红霞¹⁾ 赵晖^{1)†} 陈宇光¹⁾ 鄢永红²⁾

1)(同济大学物理科学与工程学院, 上海 200092)

2)(绍兴文理学院, 绍兴 312000)

(2014年12月17日收到; 2015年2月14日收到修改稿)

应用密度矩阵重整化群方法, 研究了存在交错离子势 Δ 时一维半满扩展 Hubbard 模型的相图. 通过计算关联函数、结构因子、位置算符等方法, 描绘了从 Mott 绝缘体-键有序绝缘体-Band 绝缘体的特性并给出了精确的相边界. 研究发现: 中间的键有序绝缘体相在相图中占据了很小的一部分区域, 当存在离子势 Δ 的情况下, 这个区域将会有所增大; 而当相互作用足够强时, 这个中间相消失. 给出了离子 Hubbard 模型 (最近邻电子-电子相互作用 $V = 0$) 的相图.

关键词: 密度矩阵重整化群, Hubbard 模型, 量子相变, 相图

PACS: 71.30.+h, 71.10.Fd, 71.27.+a

DOI: 10.7498/aps.64.107101

1 引言

不同类型的绝缘态有着不同的起源. 比如一类典型的绝缘体称之为 Mott 绝缘体, 其绝缘性来自于电子之间的库仑排斥. 强库仑相互作用可以使电子局域化, 从而产生一个具有能隙的电子态. 这个能隙是与电子间库仑排斥势 U 有关的函数, 并且在强耦合极限下趋向于 U . 而另一种典型绝缘体——Band 绝缘体, 其是无相互作用的电子在一个周期势场中运动的可能解, 可以用固体理论中的能带论来解释. 这两种绝缘态有着完全不同的性质, 例如 Band 绝缘体是顺磁性的而 Mott 绝缘体一般是反铁磁性的. 各种绝缘态之间的本质区别、不同性质绝缘态之间的转变一直是凝聚态物理研究的热点^[1-6]. 随着近年来超冷原子技术的发展^[7], 使得实验上研究不同态之间的演化成为可能.

上述两种绝缘态可以在同一个理论模型——一维半满的离子 Hubbard 模型 (ionic Hubbard model, IHM), 通过调节库仑相互作用的大小来实现. 这个模型由通常的 Hubbard 模型加上

同一格点上的电子库仑排斥势 U 和一个强度为 Δ 的交错单粒子离子势组成. 对 IHM 已有长期的研究, 它被用来研究有机电荷转移盐中从中性到离子性的转变过程^[8,9], 也被用来了解钙钛矿材料中的铁电转化过程^[10,11]等. 离子势 Δ 和库仑势 U 之间的竞争将决定系统是 Band 绝缘体 (BI) 还是 Mott 绝缘体 (MI). 人们已经在一维^[1,12-17] 和无限维^[3] 系统中, 对离子 Hubbard 模型中 BI 到 MI 的量子相变过程进行了大量详细的解析和数值研究. 在原子极限 ($t \rightarrow 0$) 下, 当 $U < \Delta$ 时 (具有离子势 $-\frac{1}{2}\Delta$ 的格点是双占据的, 其他格点是空占) 基态是一个 Band 绝缘体, 而当 $U > \Delta$ 时 (所有格点都是单占据) 基态是一个 Mott 绝缘体. 而当跃迁能 $t \neq 0$ 时, Fabrizio 等^[12,13] 指出存在着一个自发的二聚化绝缘相——键有序绝缘相 (BOI), 这个相把 BI 和 MI 分开. 随着 U 的增加, 首先在 $U = U_c$ 时电荷能隙消失, 发生一个从 BI 到 BOI 的相变. 进一步增大 U , 当 $U = U_s > U_c$ 时, 伴随着自旋能隙的消失出现一个从 BOI 到 MI 的 Kosterlitz-Thouless (KT) 相变.

另一个普遍研究的模型是扩展 Hubbard 模型

* 国家自然科学基金 (批准号: 11474218) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhaoh@fudan.edu.cn

(extended Hubbard model, EHM). 作为研究紧束缚系统中关联效应的典型模型, EHM被广泛用来探究不同有序相之间的竞争: 如电荷密度波(charge density wave, CDW)、自旋密度波(spin density wave, SDW)、反铁磁性、超导电性(当具有吸引相互作用时的情况)等. 通过弱耦合重整化群(renormalization group, RG)方法, Emery^[18]和 Solyom^[19]首先计算了一维EHM的基态相图. 当同一格点上的库仑排斥 U 相较最近邻格点间排斥作用 V 足够大时, 即当 $U > 2V$ 时, 基态是一个伴随自旋关联函数指数衰减的自旋密度波Mott绝缘相. 而当 $U < 2V$ 时, 基态是一个具有电荷密度波的Band绝缘体. 近来的研究表明上述的相图还需要做一些修正: 在弱耦合情况下, 存在一个呈现键序波(bond ordered wave, BOW)关联的窄小区域, 这个区域可把SDW和CDW两个区域分隔开来^[20-24].

本文用密度矩阵重整化群(DMRG)方法^[25-27], 研究存在交错离子势 Δ 的情况下一维半满扩展Hubbard模型基态的相图. 与之前的DMRG研究相比, 我们主要通过计算电荷和自旋的位置算符^[28,29]来确定不同绝缘态的相边界, 从而得到系统完整的相图. 本文采用周期性边界条件(PBC)下的有限尺寸DMRG算法, 在计算中最多每个块保留 $m = 1024$ 个状态, 依据参数的不同, DMRG中的截断误差控制在 10^{-5} — 10^{-8} 的范围. 另外, 计算中选取系统最大的尺寸为 $L = 128$ 个格点, 并通过有限尺寸分析外推到热力学极限.

2 模型与方法

这里考虑一个扩展版本的Hubbard模型, 其中包含一个额外的最近邻库仑相互作用 V 和一个交错离子势能 Δ , 即所谓扩展离子Hubbard模型(extended ionic Hubbard model, EIHM)的Hamiltonian为

$$H = -t \sum_{i,\sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) + \Delta \sum_i (-1)^i n_i + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1}, \quad (1)$$

其中 $c_{i,\sigma}^\dagger$ ($c_{i,\sigma}$)是格点 i 上自旋为 σ 的电子产生(湮灭)算符; $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ 是电子占据数算符; $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$; Δ 是单粒子离子势, t 是最近邻格

点间电子的跃迁常量, 在计算中我们把它设为能量单位; U 表示同一格点上的库仑排斥, V 是最近邻格点间的电子相互作用.

首先, 我们利用电荷指数 κ_ρ 和自旋指数 κ_σ 来得到MI-BOI和BOI-BI的相边界. 根据Luttinger液体(Luttinger liquid, LL)理论^[30], 如果存在一个电荷或者自旋能隙, 则相应的 κ_ρ 或 κ_σ 变为零. 在周期链上, κ_ρ 和 κ_σ 可以由静态结构因子 $S_{\rho,\sigma}(q)$ 计算得到:

$$S_{\rho,\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{j,k} e^{iq(j-k)} \langle (n_{j\uparrow} \pm n_{j\downarrow}) (n_{k\uparrow} \pm n_{k\downarrow}) \rangle. \quad (2)$$

在 $q \rightarrow 0^+$ 的极限下,

$$\kappa_{\rho,\sigma} = \pi S_{\rho,\sigma}(q_1)/q_1, \quad q_1 = 2\pi/L, \quad L \rightarrow \infty. \quad (3)$$

这个函数的长程行为由LL自旋指数 κ_ρ (κ_σ)决定. 在热力学极限下, 如果系统存在自旋能隙则 $\kappa_\sigma = 0$, 否则 $\kappa_\sigma = 1$. 另一方面, κ_ρ 只有在连续Gaussian相变的临界点处为有限值, 其他地方则处处为零. 因此, 我们可以利用 κ_ρ 和 κ_σ 的这些特性来判定MI-BOI和BOI-BI的相变点. 由于在固定 U 而逐渐增加 V 的情况下存在MI-BOI-BI三个连续的相, 可以预期当系统处于MI时自旋指数 $\kappa_\sigma = 1$, 而在其他相时 $\kappa_\sigma = 0$ (MI相中自旋能隙为零而BOI, BI中自旋能隙非零); 除了恰好在连续的BOI-BI的量子相变点外, 电荷指数在其他地方都是 $\kappa_\rho = 0$ (如果相变是一阶相变, 那么在相变点处 κ_ρ 也等于零). 图1显示了当 $U = 4$, $\Delta = 0.5$ 时, 电荷和自旋指数随 V 的变化情况, 内置图显示了随着链长倒数 $1/L$ 变化的两个相变点的线性外推. 就像上面分析的一样, 我们发现对于比较小的 V , 随着系统尺寸的增加 κ_σ 趋于1. 在一个临界值 V_s 处, κ_σ 变得小于1, 并随着 V 的增加很快下降到0, 这表明有一个自旋能隙被打开; 而电荷指数 κ_ρ 在BOI-BI的相变点 $V = V_c$ 处由于基态性质的改变(这时电荷能隙等于0)形成一个峰值, 而在相变点的两侧都趋向于等于0.

在密度矩阵重整化群算法中, 为了计算关联函数和结构因子, 相应的算符都需要被重整化, 也就是在每一个DMRG步骤进行矩阵乘运算(其复杂度为 $O(m^3)$). 这个过程需要耗费大量的CPU计算时间, 所以下面不再通过计算电荷和自旋结构因子来确定模型的相图. 取而代之的是通过计算电荷

和自旋的位置算符^[28,29]来得到系统精确的相图. 位置算符作为表征关联系统的局域度由Resta和Sorella率先提出, 通过计算周期性边界条件下 L 个格点的精确基态从而得到预期值:

$$\begin{aligned} z_L^\rho &= \langle g | \hat{U}_L^\rho | g \rangle, \\ \hat{U}^\rho &= \exp \left[i \frac{2\pi}{L} \sum_j j (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \right], \\ z_L^\sigma &= \langle g | \hat{U}_L^\sigma | g \rangle, \\ \hat{U}^\sigma &= \exp \left[i \frac{2\pi}{L} \sum_j j (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

在热力学极限下, $z_{L \rightarrow \infty}$ 的正负对应于重整化群分析中两个不同的确定点, 而 $z_{L \rightarrow \infty} = 0$ 对应Gaussian和Wess-Zumino-Novikov-Witten类型的相变点^[29]. 这个方法已广泛应用于研究一维晶格模型中金属-绝缘体、金属-超导体等^[31-33]量子相变.

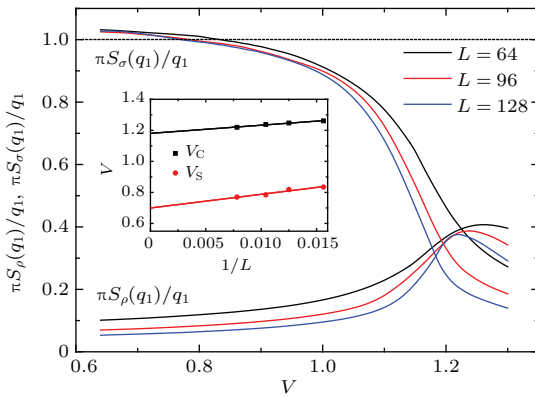


图1 (网刊彩色) $\Delta = 0.5, U = 4$ 时 κ_ρ 和 κ_σ 随 V 的变化(内置图显示了 V_c 和 V_s 随着链长倒数 $1/L$ 变化的线性外推)

Fig. 1. (color online) Long-wavelength charge (κ_ρ) and spin (κ_σ) structure factors vs V for $\Delta = 0.5, U = 4$. The inset shows a linear extrapolation of the critical values V_c and V_s with the inverse of chain length $1/L$.

上述算子的预期值在基于Lanczos算法的严格对角化(exact diagonalization, ED)方法中可以很容易地计算得到. 虽然ED方法可以得到非常精确的基态信息, 但是由于计算机内存的限制, 一般只能计算非常有限大小的团簇尺寸, 从而出现非常明显的尺寸效应. 现在, 需要简单介绍一下在DMRG框架下处理算符 $\hat{U}_L^{\rho(\sigma)}$ 的方法. 我们可以发现时间演化算符 $\hat{U} = \exp(-i\Delta t \hat{H}/\hbar)$ 也具有指数的形式. 因此, 处理位置算符的过程就类似于应用含时密度矩阵重整群(t-DMRG)方法^[34,35]处理时

间演化算符的过程. (4)式中的位置算符可以写成

$$\begin{aligned} \hat{U}_L^\rho &= \prod_j \exp \left(i \frac{2\pi}{L} \hat{U}_j^\rho \right), \\ \hat{U}_j^\rho &= j(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}), \\ \hat{U}_L^\sigma &= \prod_j \exp \left(i \frac{2\pi}{L} \hat{U}_j^\sigma \right), \\ \hat{U}_j^\sigma &= j(n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}). \end{aligned} \quad (5)$$

算符 $\hat{U}_L^{\rho(\sigma)}$ 经上式分解之后, $\hat{U}_j^{\rho(\sigma)}$ 是一个只作用在格点 j 上的算符. 因此, 格点 j 上的位置算符 $\hat{U}_j^{\rho(\sigma)}$ 可以直接精确地作用到DMRG波函数的第 j 步上. 然后通过密度矩阵选取最优化的基将波函数变换到DMRG的第 $j+1$ 步上, 从而可以将(5)式中的 $\hat{U}_{j+1}^{\rho(\sigma)}$ 作用到波函数上. 重复上面的过程直到 j 遍历整个链 L , 则可将完整的算符 $\hat{U}_L^{\rho(\sigma)}$ 作用到基态波函数上. 和静态的DMRG算法一样, 在做波函数变换时由于基的不完备性在每一步都会引入一个截断误差. 通过增加每个块保留的状态数, 这个误差可以得到很好的控制.

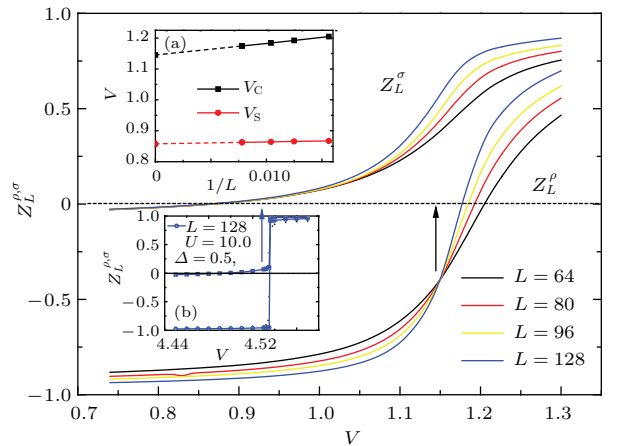


图2 (网刊彩色) $\Delta = 0.5, U = 4$, 链长分别为 $L = 64, 80, 96$ 和 128 时 z_L^ρ 和 z_L^σ 随 V 的变化. 在热力学极限 $L \rightarrow \infty$ 下, (z_L^ρ, z_L^σ) 在区域MI, BOI, 和BI中分别收敛到 $(-1, 0), (-1, 1)$ 和 $(1, 1)$; 内置图(a)显示了相变点 $V_{c(s)}$ (对应于 $z_L^{\rho(\sigma)} = 0$ 的点)的有限尺寸分析, 热力学极限下的外推值如图中箭头所示; 内置图(b)显示了 $U = 10$ 时 z_L^ρ 和 z_L^σ 随 V 的变化

Fig. 2. (color online) Behavior of z_L^ρ , and z_L^σ at $\Delta = 0.5, U = 4$ for $L = 64, 80, 96$, and 128 systems. In the $L \rightarrow \infty$ limit, (z_L^ρ, z_L^σ) converge as $(-1, 0), (-1, 1)$, and $(1, 1)$ for the MI, BOI, and BI regions. The inset (a) shows finite-size scaling of the critical coupling $V_{c(s)}$ (indicated by arrow) where $z_L^{\rho(\sigma)} = 0$; (b) shows the same quantities but for $U = 10$.

在 $L \rightarrow \infty$ 的极限下, (z_L^ρ, z_L^σ) 对于MI, BOI, BI三个区域的预期值分别为 $(-1, 0), (-1, 1)$ 和

(1, 1)^[29]. $z_L^{\rho(\sigma)}$ 的值可以直接通过上面介绍的 t-DMRG 方法来计算得到. 图 2 显示了 $\Delta = 0.5$, $U = 4$ 时的数值计算结果. 我们发现对于电荷和自旋部分, z_L^ρ 和 z_L^σ 都是连续变化, 但是分别在 MI-BOI 相变点和 BOI-BI 相变点符号发生改变. 对于一个比较小的 V , z_L^ρ 随着系统尺寸的增大而趋于等于 -1 , 而 z_L^σ 则趋于等于 0 , 与系统处在 MI 相一致. 随着 V 的增加, 在一个临界耦合值 V_s 处, z_L^σ 改变它的符号并且很快地趋向于 1 , 而 z_L^ρ 基本保持不变, 这表明一个存在自旋能隙的 BOI 相出现. 继续增加 V 的大小, 当 $V = V_c$ 时, z_L^ρ 改变符号并向 1 靠近. 这表明金属态 (电荷能隙为零) 只出现在这个临界点, 在具有更强 V 的相互作用区域波函数仍然是局域化的. 很显然, 电子的最近邻排斥相互作用 V 在较大时破坏了 BOI 相而有利于 BI 相的形成. 图 2 的内置图 (a) 显示了由条件 $z_L^{\rho,\sigma} = 0$ 得到的 MI-BOI 和 BOI-BI 的相变点随系统尺寸变化的情况. 通过有限尺寸分析, 我们得到两个相变点分别为 $V_s \simeq 0.86$ 和 $V_c \simeq 1.15$. 图 2 的内置图 (b) 显示了 z_L^ρ, z_L^σ 在 $U = 10$ 时随 V 变化的情况. 我们可以发现, 中间的 BOI 相与 U 比较小的情况下相比要窄很多. 另外, 在 MI-BOI 相边界 $V \simeq 4.494$ 附近, 所有变量的行为和 $U = 4$ 时类似, 都是连续变化; 而在 BOI-BI 相边界 $V \simeq 4.535$ 处的物理性质是不连续的, 这表明这时的相变是一阶相变. 由于链长和方法的限制, 我们并没有计算 BOI-BI 从连续相变到一阶相变转化过程中的三重临界点 (对应于 Luttinger 电荷指数 κ_ρ 在达到 $1/4$ 后不连续地下降到 0 的临界点^[23,24]).

改变各种相互作用能的大小, 我们在图 3(a) 中显示了 $\Delta = 0.5$ 和 $\Delta = 1.0$ 时, 用上面所描述的方法计算得到的 EIHM 的相图. 其中的黄色区域表示 BI 和 MI 之间的 BOI 中间相, BOI 区域上沿和下沿的包络曲线分别由 BOI-BI 和 MI-BOI 的相边界构成. 可以发现 BOI 的区域随着离子势能的增加而有所增大. 此外, 离子势 Δ 有利于 CDW 态 (也就是 Band 绝缘体) 的形成, 这使得一个较小的 V 就能驱使系统从 MI 相转变到 BI 相. 随着 U 和 V 的增加, MI-BOI 和 BOI-BI 的相变线逐渐靠拢而形成 MI-BI 的相变线. 相应地, BOI 相区域先是有所扩大, 然后慢慢缩小到一个双临界点. 超过这个双临界点以后 BOI 相消失, 而 MI-BI 的相变线逐渐地靠近强耦合极限下的

$U = 2\Delta + 2V$. 计算给出了 $\Delta = 0.5$ 和 $\Delta = 1.0$ 时的双临界点分别为 $(U_t, V_t) \simeq (10.73, 4.90)$ 和 $(U_t, V_t) \simeq (12.03, 5.01)$. 通过改变 Δ 的值并做线性外推 (见图 3(a) 的内置图), 我们得到 $\Delta = 0$ 时的双临界点为 $(U_t, V_t) \simeq (9.44, 4.75)$, 这与 Ejima 的结论^[36] $(U_t, V_t) \simeq (9.25, 4.76)$ 符合得非常好.

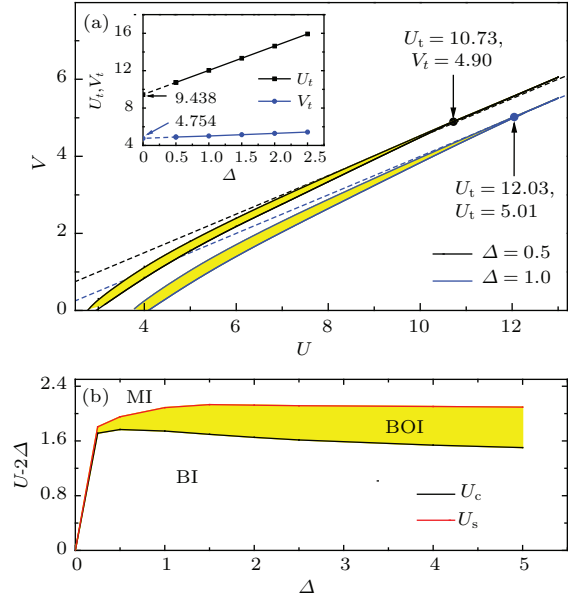


图 3 (网刊彩色) (a) 一维半满 EIHM 的相图, 其中黄色区域表示 MI 和 BI 之间的 BOI 相, 虚线表示强耦合极限下 $U = 2\Delta + 2V$ 的渐近线, $\Delta = 0.5$ 和 $\Delta = 1.0$ 时的双临界点分别为 $(U_t, V_t) \simeq (10.73, 4.90)$ 和 $(U_t, V_t) \simeq (12.03, 5.01)$, 内置图显示了不同交错离子势 Δ 下双临界点的线性外推; (b) 一维半满 IHM ($V = 0$) 的相图

Fig. 3. (color online) (a) phase diagram of the 1 D half filled EIHM, the BOI phase existing between the MI and BI phases is colored by yellow, dashed lines indicates $U = 2\Delta + 2V$, the bicritical point is at $(U_t, V_t) \simeq (10.74, 4.90)$ for $\Delta = 0.5$ and $(U_t, V_t) \simeq (12.03, 5.01)$ for $\Delta = 1.0$, respectively; the inset shows a linear extrapolation of the critical values (U_t, V_t) with the staggered ionic potential Δ ; (b) phase diagram of the 1 D half filled IHM ($V = 0$).

从以上的相图中我们可以发现, 在较大的 U 和 V 时, 与 EHM 的相图类似, 而在较小 V 值区域却有着本质的不同. 当 $V = 0$ 时, (1) 式中的 Hamiltonian 退化为已经大量研究的 IHM, 在这个模型中同样有一个中间相 BOI 存在于 BI 和 MI 之间. 对于任一个确定的 Δ 值, 随着 U 的增加从 BI 相到 MI 相的转变都是经历两步: 首先, 电荷能隙 Δ_c 和自旋能隙 Δ_s 都是逐渐减小, 在 BI-BOI 的相边界处 (仅在这一点) $\Delta_c = 0$; 继续增大 U , Δ_c 逐渐变大, 而当 $U = U_s > U_c$ 时, 自旋能隙消失并保持 $\Delta_s = 0$

变. 在图 3 (b) 中, 我们给出了定量上与 MCEL [37] 的结论一致但是更为精确的相图. 至此, 有了 BOI 相消失的双临界点 (U_t , V_t)、强耦合下 MI-BI 的相变线 ($U = 2\Delta + 2V$), $V = 0$ 极限下的相变点 (IHM 的相图), 我们立即可以给出整个 EIHM 的大致相图.

3 总 结

本文应用 DMRG 方法研究了一维半满扩展离子 Hubbard 模型的相图. 这个系统随着相互作用的增强经历了一个从 Mott 绝缘体到一个自发的二聚化绝缘体、再从自发二聚化绝缘体到 Band 绝缘体的相变. 在相互作用足够强的时候, 中间相 BOI 消失. 我们通过计算电荷和自旋位置算符的方法得到了精确相边界和双临界点. 另外, 也给出了一维半满离子 Hubbard 模型的相图.

参考文献

- [1] Manmana S R, Meden V, Noack R M, Schönhammer K 2004 *Phys. Rev. B* **70** 155115
- [2] Batista C D, Aligia A A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 246405
- [3] Garg A, Krishnamurthy H R, Randeria M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 046403
- [4] Fuhrmann A, Heilmann D, Monien H 2006 *Phys. Rev. B* **73** 245118
- [5] Paris N, Bouadim K, Hebert F, Batrouni G G, Scalettar R T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 046403
- [6] Kancharla S S, Dagotto E 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 016402
- [7] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T W, Bloch I 2002 *Nature* **415** 39
- [8] Hubbard J, Tarrance J B 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1750
- [9] Nagaosa N, Takimoto J 1986 *J. Phys. Soc. Jpn.* **55** 2735
- [10] Egami T, Ishihara S, Tachiki M 1993 *Science* **261** 1307
- [11] Ishihara S, Egami T, Tachiki M 1994 *Phys. Rev. B* **49** 8944
- [12] Fabrizio M, Gogolin A O, Nersesyan A A 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 2014
- [13] Fabrizio M, Gogolin A O, Nersesyan A A 2000 *Nucl. Phys. B* **580** 647
- [14] Zhang Y Z, Wu C Q, Lin H Q 2003 *Phys. Rev. B* **67** 205109
- [15] Kampf A P, Sekania M, Japaridze G I, Brune P 2003 *J. Phys.: Condens. Matter* **15** 5895
- [16] Otsuka H, Nakamura M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 155105
- [17] Torio M E, Aligia A A, Japaridze G I, Normand B 2006 *Phys. Rev. B* **73** 115109
- [18] Emery V J 1997 in: *Highly Conducting One Dimensional Solids* (New York: Plenum) p247
- [19] Sólyom J 1979 *Adv. Phys.* **28** 201
- [20] Nakamura M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 16377
- [21] Sengupta P, Sandvik A W, Campbell D K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 155113
- [22] Zhang Y Z 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 246404
- [23] Sandvik A W, Balents L, Campbell D K 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 236401
- [24] Glocke S, Klumper A, Sirker J 2007 *Phys. Rev. B* **76** 155121
- [25] White S R 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863
- [26] White S R 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10345
- [27] Schollwöck U 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 259
- [28] Resta R, Sorella S 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 370
- [29] Nakamura M, Voit J 2002 *Phys. Rev. B* **65** 153110
- [30] Voit J 1995 *Rep. Prog. Phys.* **58** 977
- [31] Aligia A A, Ortiz G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 2560
- [32] Aligia A A, Hallberg K, Batista C D, Ortiz G 2000 *Phys. Rev. B* **61** 7883
- [33] Ortiz G, Aligia A A 2000 *Phys. Status Solidi B* **220** 737
- [34] Vidal G 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 040502
- [35] White S R, Feiguin A E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 076401
- [36] Ejima S, Nishimoto S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 216403
- [37] Torio M E, Aligia A A, Ceccatto H A 2001 *Phys. Rev. B* **64** 121105R

Phase diagram of the one-dimensional extended ionic Hubbard model*

Zhao Hong-Xia¹⁾ Zhao Hui^{1)†} Chen Yu-Guang¹⁾ Yan Yong-Hong²⁾

1) (*Key Laboratory for Advanced Microstructure Materials of the Ministry of Education and Department of Physics, Tongji University, Shanghai 200092, China*)

2) (*Department of Physics, Shaoxing University, Shaoxing 312000, China*)

(Received 17 December 2014; revised manuscript received 14 February 2015)

Abstract

We use a density-matrix renormalization group method to study quantitatively the phase diagram of the half-filled one-dimensional (1D) extended Hubbard model in the presence of a staggered ionic potential Δ . An extensive finite-size scaling analysis is carried out on the relevant structure factors and localization operator to characterize the Mott-insulator (MI)-bond-ordered insulator (BOI)-band-insulator (BI) transitions. The intermediate BOI phase occupies a small region of the phase diagram, and this region is enlarged in the presence of Δ . In addition, the phase diagram of ionic Hubbard (the nearest-neighbor electron-electron interaction $V = 0$) is also given.

Keywords: density-matrix renormalization group, Hubbard model, quantum phase transition, phase diagram

PACS: 71.30.+h, 71.10.Fd, 71.27.+a

DOI: 10.7498/aps.64.107101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11474218).

† Corresponding author. E-mail: zhaoh@fudan.edu.cn