

有限温度下一维 Hubbard 模型的化学势泛函理论研究

陆展鹏 魏兴波 刘天帅 陈阿海 高先龙

Chemical potential-functional-theory about the properties of one-dimensional Hubbard model at finite temperature

Lu Zhan-Peng Wei Xing-Bo Liu Tian-Shuai Chen A-Hai Gao Xian-Long

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), **66**, 126701 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.126701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.126701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I12>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

无序效应对 1T-TaS<sub>2</sub> 材料中 Mott 绝缘相的影响

[Anderson localization effect on Mott phase in 1T-TaS<sub>2</sub>](#)

物理学报.2017, 66(5): 057101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.057101>

金属价电子结构对磁性和电输运性质的影响

[Dependences of valence electronic structure on magnetic moment and electrical resistivity of metals](#)

物理学报.2017, 66(2): 027101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.027101>

钙钛矿锰氧化物中的极化子研究

[Investigation of polarons in perovskite manganites](#)

物理学报.2012, 61(20): 207101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.207101>

# 有限温度下一维Hubbard模型的化学势 泛函理论研究\*

陆展鹏 魏兴波 刘天帅 陈阿海 高先龙†

(浙江师范大学物理系, 金华 321004)

(2017年1月7日收到; 2017年3月26日收到修改稿)

通过数值方法求解了有限温度下一维均匀 Hubbard 模型的热力学 Bethe-ansatz 方程组, 得到了在给定温度和相互作用强度情况下, 比热  $c$ 、磁化率  $\chi$  和压缩比  $\kappa$  随化学势  $\mu$  的变化图像. 基于有限温度下一维均匀 Hubbard 模型的精确解, 利用化学势 ( $\mu$ )-泛函理论研究了一维谐振势下的非均匀 Hubbard 模型, 给出了金属态和 Mott 绝缘态下不同温度情况时局域粒子密度  $n_i$  和局域压缩比  $\kappa_i$  随格点的变化情况.

**关键词:** 热力学 Bethe-ansatz 方程组, 压缩比, Hubbard 模型, 化学势泛函理论

**PACS:** 67.25.bd, 71.10.-w

**DOI:** 10.7498/aps.66.126701

## 1 引言

20 世纪初, 玻色和爱因斯坦提出了著名的玻色-爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein condensation, BEC) 理论, 他们预言, 对于玻色气体, 当温度低于某一个临界值  $T_c$  时, 所有的粒子将会占据能量最低的量子态<sup>[1]</sup>. 随着 1985 年美国华裔科学家朱棣文等<sup>[2]</sup> 利用激光冷却技术获得了接近绝对零度的温度, 冷原子物理开始成为研究的热点. 之后在 1995 年, Ketterle, Cornell 和 Wiemann 首次在实验中实现了 Na 和 Rb 的 BEC 凝聚体<sup>[3,4]</sup>. 而后人们开始设法冷却费米气体并得到费米凝聚体. 由于费米气体受到泡利不相容原理的限制, 所以冷却难度比玻色气体更大. 在 1999 年, Jin 的研究组<sup>[5]</sup> 实现了费米凝聚. 随着 Feshbach 共振技术的发展, 人们可以通过磁场改变束缚态原子的散射长度, 进而调节原子之间的相互作用, 从而大大推动了冷原子实验的发展<sup>[6,7]</sup>. 另外由于光晶格技术的发展, 人们在冷原子体系中可以构造出非常干净的一、二、三维晶格结构<sup>[8]</sup>.

一维体系呈现出丰富的物理性质, 如 20

世纪, Tomonaga<sup>[9]</sup> 和 Luttinger<sup>[10]</sup> 提出的著名的 Luttinger 液体理论. 他们指出一维费米体系之中, 如果考虑相互作用, 则朗道液体理论不再适用, 体系中只有集体激发, 没有单粒子激发, 其中最明显的特征即自旋电荷分离<sup>[11]</sup>. 很多一维多粒子体系具有精确可解性, 如 1931 年 Bethe<sup>[12]</sup> 提出的 Bethe-ansatz 理论, 可求解一维 Heisenberg 模型; 1963 年, Lieb 和 Liniger<sup>[13]</sup> 求解了一维玻色气体; 1967 年, Yang<sup>[14]</sup> 和 Gaudin<sup>[15]</sup> 求解了自旋为 1/2 的费米气体; 1968 年, Lieb 和 Wu<sup>[16]</sup> 求解了一维 Hubbard 模型. 以上理论结果可以与一维冷原子实验相互印证, 并用于理解一维谐振势受限体系中呼吸模的集体激发情况<sup>[17]</sup> 和自旋电荷分离现象<sup>[18,19]</sup> 等.

由于绝对零度无法达到, 考虑到温度对受限体系的影响具有十分现实的意义, 所以本文研究一维有限温度的晶格冷原子晶格体系. 在 1969 年, 杨振宁等<sup>[20]</sup> 提出了研究一维可积模型的热力学 Bethe-ansatz (TBA) 方法, 随后, 日本物理学家 Takahashi<sup>[21,22]</sup> 研究了  $XXX$  链模型和具有排除相互作用的自旋  $-1/2$  模型的热力学性质. 此后,

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11374266)、新世纪优秀人才支持计划和浙江省自然科学基金 (批准号: Z15A050001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gaoxl@zjnu.edu.cn

一维有限温度的研究成为热点, 如利用 TBA 方程组结合 Haldane 统计讨论低温下一维强相互作用任意子简并特征<sup>[23]</sup>和能态性质<sup>[24]</sup>, 研究有限温度下吸引相互作用的费米气体的配对特征和相变性质<sup>[25,26]</sup>, 有限温下自旋为 1 的玻色子在一维谐振势中的量子临界现象<sup>[19,27]</sup>, 以及有限温度下一维吸引相互作用的费米气的 Tomonaga-Luttinger 液体相变<sup>[19,28]</sup>等.

由于冷原子实验中的体系普遍是非均匀的, 体系一般变得不可精确求解. 利用一维均匀体系的精确解并结合局域密度近似的密度泛函理论求解一维非均匀体系, 是一种可行的方法<sup>[29-32]</sup>. 利用此密度泛函理论可以研究有限温度下一维晶格体系的交换关联势<sup>[29]</sup>, 有限温度下一维谐振势 Hubbard 模型的磁导率等热力学量<sup>[33]</sup>, 以及用含时密度泛函理论研究一维费米体系自旋电荷分离<sup>[34,35]</sup>等性质.

基于以上的研究, 我们数值求解了有限温度下一维均匀 Hubbard 模型的 TBA 方程组<sup>[36]</sup>, 主要分析了在不同相互作用和不同温度下, 磁化率  $\chi$ 、比热  $c$  和压缩率  $\kappa$  等热力学量, 之后基于这些一维均匀体系的性质, 以化学势为泛函结合密度泛函理论<sup>[37]</sup>方法研究了一维非均匀 Hubbard 模型, 得到了不同温度下金属相和 Mott 绝缘相的粒子密度和局域压缩比随格点的变化情况. 研究表明, 在低温情况下, 一维均匀体系中的磁化率  $\chi$ 、比热  $c$  和压缩率  $\kappa$  能够度量四个相变区域, 分别为真空态、金属态、Mott 绝缘态和带绝缘态. 随着温度的升高, 体系热涨落逐渐占据主导地位, 取代量子涨落成为主导, Mott 绝缘体相会消失. 在非均匀体系中, 体系处于不同相的共存相. 随着温度的升高, 热涨落会破坏势阱中间的 Mott 绝缘相, 相应的粒子密度分布  $n_i$  和局域压缩比  $\kappa_i$  的变化反映了这一过程.

## 2 理论模型

本文先讨论一维均匀 Hubbard 模型, 其哈密顿量的形式如下:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{hom}} &= -t \sum_{i,\sigma} (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + hc) + U \sum_{i=1} \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \\
 &\quad - \mu \sum_{i=1} (\hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}) - h \sum_{i=1} (\hat{n}_{i,\uparrow} - \hat{n}_{i,\downarrow}), \quad (1)
 \end{aligned}$$

式中,  $t$  为近邻格点的跳跃能;  $U$  为同格点粒子之间的相互作用, 本文只研究  $U > 0$  的排斥相互作用情况;  $\mu$  为化学势;  $h$  为磁场;  $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$  为  $i$  格点自旋为  $\sigma$  的产生算符,  $\hat{c}_{i+1,\sigma}$  表示为  $i+1$  格点自旋为  $\sigma$  的湮灭算符;  $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$  为粒子数算符.

比热  $c$ 、磁化率  $\chi$  和压缩比  $\kappa$  的表达式如下:

$$c = u_1^2 \left( D_{11} + \frac{D_{13}^2 D_{22} + D_{12}^2 D_{33} - 2D_{12} D_{13} D_{23}}{D_{23}^2 - D_{22} D_{33}} \right), \quad (2)$$

$$\chi = u_1 \left( D_{33} - \frac{D_{23}^2}{D_{22}} \right), \quad (3)$$

$$\kappa = u_1 \left[ D_{22} - \frac{(nD_{13} + nD_{22})D_{23}}{nD_{33} + mD_{13}} \right], \quad (4)$$

这里  $D_{ij} = \frac{\partial g/T}{\partial u_i \partial u_j}$ , 其中  $g$  为热力学势;  $T$  为温度;  $i, j$  可以取 1, 2, 3, 分别对应着  $u_1, u_2, u_3$  三个参量, 其表达式为

$$u_1 = \frac{1}{T}, \quad (5)$$

$$u_2 = \frac{U/2 - \mu}{T}, \quad (6)$$

$$u_3 = \frac{h}{T}. \quad (7)$$

热力学势  $g$  所满足的 TBA 耦合方程的具体表达式及其相关的二阶微分量的求解过程可以参考文献<sup>[36]</sup>.

我们首先通过数值方法求解一维均匀 Hubbard 模型的 TBA 耦合方程组, 得到磁化率  $\chi$ 、比热  $c$ 、压缩率  $\kappa$ 、化学势  $\mu$ 、粒子密度分布  $n$  等热力学量, 通过分析这些物理量了解系统的量子相变. 基于对这些热力学量的分析, 我们研究一维受限谐振势下的 Hubbard 模型,

$$H = H_{\text{hom}} + \sum_i^{N_a} V_{\text{ext}} \left( i - \frac{N_a}{2} \right)^2 \hat{n}_i, \quad (8)$$

式中,  $V_{\text{ext}}$  为外势强度,  $N_a$  为总格点数.

对于一维非均匀 Hubbard 模型的求解, 可以利用一维晶格密度泛函理论, 即通过构造建立在 Bethe-ansatz 严格解基础上的交换关联势, 用基于局域密度近似来求体系的定态或动力学性质 (BALDA 方法<sup>[11,17,29,33,34]</sup>) 来研究. 但是上述方法在处理具有 Mott 绝缘相的情况时, 由于此时构造的交换关联势在  $n = 1$  的半充满情况下具有不连续性 (即所谓的 Mott 能隙), 此时基于 BALDA 的 Kohn-Sham 方程在不连续的交换关联势上下振荡, 很难收敛, 从而产生不能自洽求解的问题<sup>[37]</sup>. 考

考虑到密度和化学势之间具有一一对应的函数关系, 基于密度的泛函理论等价于基于化学势 ( $\mu$ ) 的泛函理论, 相应的BALDA变成  $\mu$ -BALDA, 以化学势为泛函的交换关联势是连续的, 于是上述困难可以解决.

下面我们具体阐述  $\mu$ -BALDA 方法, 讨论如何通过一维均匀体系的化学势  $\mu(U, n)$  作为泛函, 构造出非均匀体系的有效势  $V_{\text{eff}}$ , 并利用 Kohn-Sham 方程求解出非均匀体系的局域粒子密度  $n_i$ .

我们先构造出均匀体系的交换关联势  $V^{\text{hxc}}[n]$ ,

$$V^{\text{hxc}}[n] = \mu(U, n) - \mu(0, n), \quad (9)$$

其中  $\mu(U, n)$  代表均匀体系的化学势 (以下简记为  $\mu$ ),  $\mu(0, n)$  为均匀体系中  $U = 0$  时的化学势, 即动能.  $\mu(U, n)$  可以通过如下公式求出:

$$\mu(U, n) = \frac{\partial e(U, n)}{\partial n}, \quad (10)$$

式中  $e(U, n)$  是均匀体系中单位格点的能量. 考虑到 (10) 式中的粒子密度和化学势具有一一对应的函数关系,  $n$  可以被反解出来, 表示成以化学势  $\mu$  为自变量的函数,

$$n = n(U, \mu). \quad (11)$$

于是方程 (9) 中的交换关联势  $V^{\text{hxc}}[n]$  就可以表示成以化学势  $\mu$  为泛函的函数  $V^{\text{hxc}}[\mu]$ ,

$$V^{\text{hxc}}[\mu] = \mu - \mu[0, n(U, \mu)]. \quad (12)$$

基于密度泛函理论, 多粒子体系的薛定谔方程等价于一个在有效势场  $V_i^{\text{eff}}[\mu_i]$  中的单粒子 Kohn-Sham(KS) 方程,

$$\sum_j^{N_a} \{-t_{ij} + V_i^{\text{eff}}[\mu_i] \delta_{ij}\} \phi_j^{(\alpha)} = \varepsilon_\alpha \phi_i^{(\alpha)}, \quad (13)$$

这里  $t_{ij} = t$  (当  $j = i \pm 1$ ) 而其他情况下为 0, 其中系统的密度分布是由 KS 方程的轨道波函数自洽给出,

$$n_i = 2 \sum_\alpha f(\varepsilon_\alpha) |\phi_i^{(\alpha)}|^2, \quad (14)$$

式中的  $\alpha$  为能级指标, 2 来自于自旋简并,  $f(\omega) = \{1 + \exp[\beta(\omega - \mu)]\}^{-1}$  是费米分布,  $\beta = 1/(k_B T)$  是温度的倒数, 其中  $k_B$  是玻尔兹曼常量. 在实际计算中, 非均匀体系的  $V_i^{\text{eff}}[\mu_i]$  可由均匀系统的  $V^{\text{hxc}}[\mu]$  在局域密度近似下给出:

$$V_i^{\text{eff}}[\mu_i] = V^{\text{hxc}}[\mu]|_{\mu \rightarrow \mu_i} + V_{\text{ext}} \left( i - \frac{N_a}{2} \right)^2. \quad (15)$$

从方程 (13) 和 (14) 中计算密度分布等价于寻找以化学势为泛函的不动点问题:

$$n_i[\mu] = 2 \sum_\alpha f(\varepsilon_\alpha[\mu]) |\phi_i^{(\alpha)}[\mu]|^2 \equiv G_i[\mu], \quad (16)$$

其中

$$\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{N_a}) \quad (17)$$

是局域格点的化学势. 方程 (16) 中的轨道  $\phi_i^{(\alpha)}[\mu]$  是从 KS 方程 (13) 中计算得到的. 方程 (16) 中  $i$  的取值范围为:  $i \in 1, 2, \dots, N_a$ , 其集合构成了  $N_a$  个以  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{N_a}$  为自变量的非线性方程组.

如前所述, 对这些方程的普通迭代求解办法不能解决由于交换关联势不连续带来的不收敛问题. 而更精妙的迭代方法如 Newton-Rhapson 方法也不能解决该问题, 因为它用到了非线性方程对于未知变量的一级导数, 其在不连续处会趋于无穷, 同样会导致耦合方程的不收敛问题. 这里我们拟用多维二分法来解决上述以化学势为泛函的不动点问题, 即通过构造

$$n_i - G_i[\mu] = 0 \quad (18)$$

来找方程左边的函数与横轴的交点, 即其零解, 详细的数值解法参见文献 [29].

## 3 结果分析与讨论

### 3.1 一维均匀 Hubbard 模型

本节先给出一维均匀 Hubbard 模型中比热  $c$ 、磁化率  $\chi$  和压缩比  $\kappa$  在不同温度和相互作用强度下的结果, 分析这些物理量在度量量子相变中的作用. 图 1 给出了低温 ( $T = 0.1$ ) 情况、不同相互作用强度  $U$  下的比热  $c$ 、磁化率  $\chi$  和压缩比  $\kappa$  随化学势  $\mu$  变化的性质.

图 1 中比热  $c$  和压缩比  $\chi$  的图像中均出现了四个峰值点或拐点, 这四个峰值点分别对应着系统的四次相变: 真空态向金属态转变, 金属态向 Mott 绝缘体态转变, Mott 绝缘体态向金属态转变, 金属态向带绝缘体态转变. 从压缩比  $\kappa$  的图像看出, 当相互作用  $U$  不断增加时, 压缩比  $\kappa$  中间出现了为零的区域, 这部分区域对应 Mott 绝缘体相 (绝缘相不可压缩), 区域的大小也反映了 Mott 能隙的大小, 随着相互作用  $U$  的增大, Mott 绝缘体区域的范围也在增大.

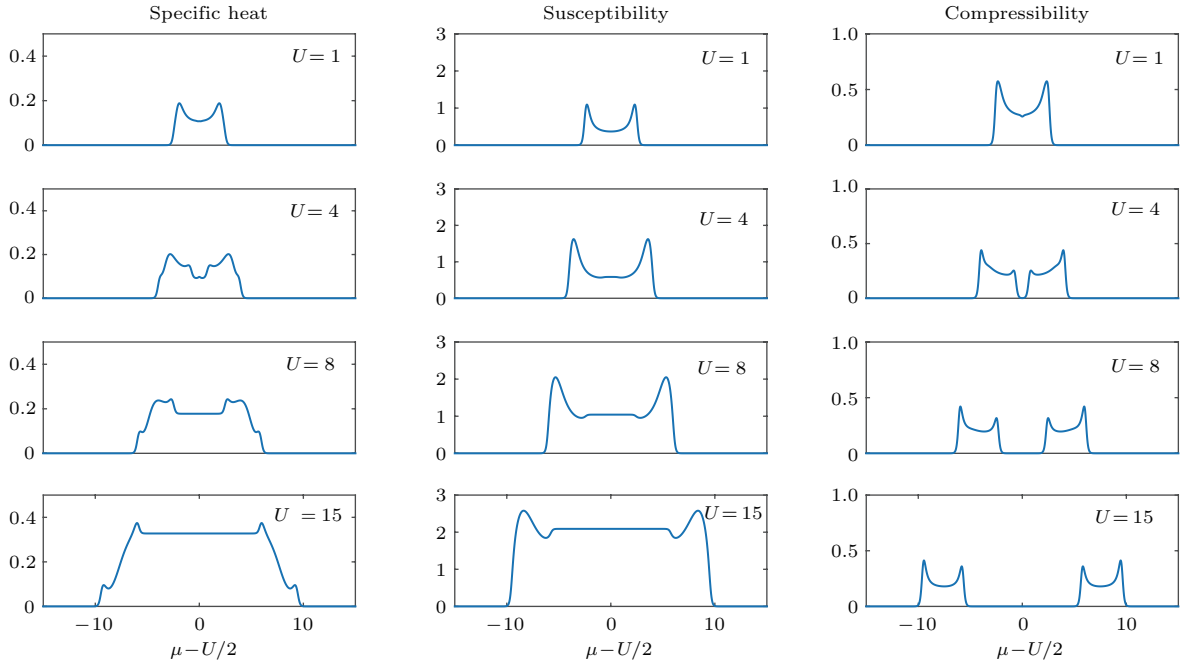


图1 (网刊彩色) 温度  $T = 0.1$ , 不同相互作用强度 ( $U = 1, 4, 8, 15$ ) 下的压缩比  $\kappa$ 、比热  $c$  和磁化率  $\chi$  随化学势  $\mu$  的变化情况, 其中对化学势进行了平移  $\mu - U/2$ , 使系统具有中心对称 (数值计算方便取  $t = k_B = 1$ )

Fig. 1. (color online) Specific heat  $c$ , susceptibility  $\chi$ , and compressibility  $\kappa$  as a function of the chemical potential  $\mu$  for temperature  $T = 0.1$  and different interaction strength ( $U = 1, 4, 8, 15$ ). In order to have the system of the central symmetry, we shift the chemical potential  $\mu$  by  $U/2$  (for convenience, we let  $t = k_B = 1$ ).

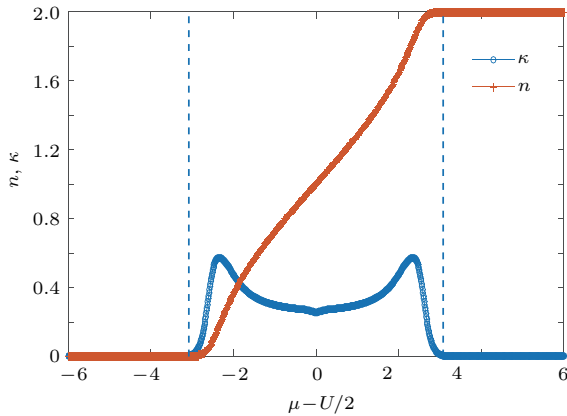


图2 (网刊彩色)  $T = 0.1, U = 1$  时压缩比  $\kappa$  和粒子密度  $n$  随  $\mu$  的变化 (图中的虚线从左到右把系统划分为真空区、金属相和带绝缘体相)

Fig. 2. (color online) Compressibility  $\kappa$  and density  $n$  as a function of the chemical potential  $\mu$  for temperature  $T = 0.1$  and interaction strength  $U = 1$ . The dotted lines from left to right divide the system into the vacuum phase, the metal phase, and the band-insulating phase.

为了清晰地看出 Mott 绝缘相的区域, 我们将不同相互作用  $U$  下压缩比  $\kappa$  和粒子密度  $n$  的结果放在一起比较, 结果见图2、图3和图4. 从图2可以看出, 在低温 ( $T = 0.1$ ) 下, 相互作用  $U$  较弱时, 此时并非 Mott 绝缘体相 (这与零温时有限相互作用

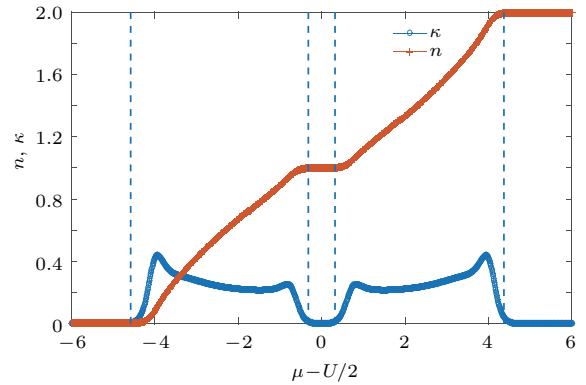


图3 (网刊彩色)  $T = 0.1, U = 4$  压缩比  $\kappa$  和粒子密度  $n$  随  $\mu$  的变化 (图中的虚线从左到右把系统划分为真空区、金属相、Mott 绝缘体相、金属相和带绝缘体相)

Fig. 3. (color online) For the temperature  $T = 0.1$  and interaction strength  $U = 4$ , compressibility  $\kappa$ , and density  $n$  as a function of the chemical potential  $\mu$ . The dotted line from left to right divide the system into the vacuum phase, the metal phase, the Mott-insulating phase, the metal phase, and the band-insulating phase.

用在半充满情况下即为 Mott 绝缘相不同). 此时压缩比  $\kappa$  的图像中没有反映出不可压缩的区域, 而粒子密度  $n$  的图像上也没有出现  $n = 1$  的半充满的 Mott 平台. 从图3可以看出, 由于粒子之间的相互作用  $U$  增强到4, 压缩比  $\kappa$  的图像中间出现为零的

不可压缩的Mott绝缘区域, 而对应的粒子密度  $n$  也出现了  $n = 1$  的半充满的Mott平台(图中的中间两条虚线部分对应的是Mott绝缘体系区域的范围). 从图4可以看出, 随着粒子之间的相互作用  $U$  增强到8, 压缩比  $\kappa$  的图像中Mott绝缘体系区域的范围扩大了, 而对应的粒子密度  $n$  的图像中的Mott平台也相应地增大, 两者的变化是一致的. 由此说明压缩比  $\kappa$  可以分辨各个量子相. 如果将图1中的磁化率  $\chi$  和比热  $c$  的结果和粒子密度  $n$  相比较也能够得出上述类似的结论.

图5给出了高温情况 ( $T = 1$ )、不同相互作用 ( $U = 1, 4, 8, 15$ ) 下的压缩比  $\kappa$ 、比热  $c$  和磁化率  $\chi$  随化学势  $\mu$  变化的结果.

从图5中我们发现热力学涨落破坏了原来的相变, 四个相变点已经基本消失. 在非常强的相互作用 ( $U = 15$ ) 下, Mott绝缘体区域仍然稳健, 这可以从压缩比  $\kappa$  的图像中看出, 其不可压缩的  $\kappa$  为零的区域依然存在, 此时热力学涨落仍然没有破坏Mott绝缘体相. 从上面的结果中我们发现低温下热力学量压缩比  $\kappa$ 、比热  $c$  和磁化率  $\chi$  可以清晰地反映出一维均匀 Hubbard 模型的相变情况, 拐点和峰值点可以反映体系的相变. 随着温度升高, 热涨

落会产生影响并很快破坏Mott绝缘相, 但如果相互作用足够大, Mott绝缘体区域在高温 ( $T = 1.0$ ) 时仍然稳健. 更详细的相图可由Bethe-ansatz解析分析得到, 具体可见文献[19, 26, 27].

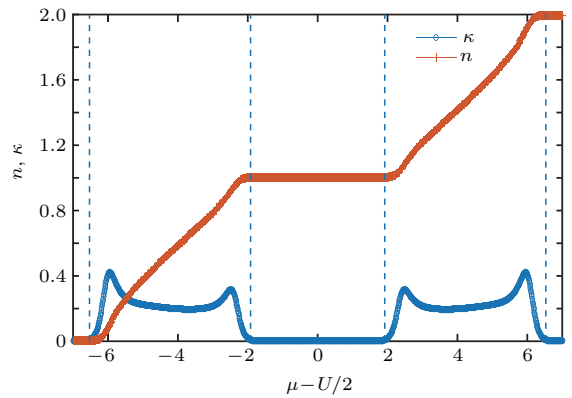


图4 (网刊彩色)  $T = 0.1, U = 8$  压缩比  $\kappa$  和粒子密度  $n$  随  $\mu$  的变化 (图中的虚线从左到右把系统划分为真空区、金属相、Mott绝缘体相、金属相和带绝缘体相)  
 Fig. 4. (color line) Compressibility  $\kappa$  and density  $n$  as a function of the chemical potential  $\mu$  for temperature  $T = 0.1$  and interaction strength  $U = 8$ . The dotted lines from left to right divide the system into the vacuum phase, the metal phase, the Mott-insulating phase, the metal phase, and the band-insulating phase.

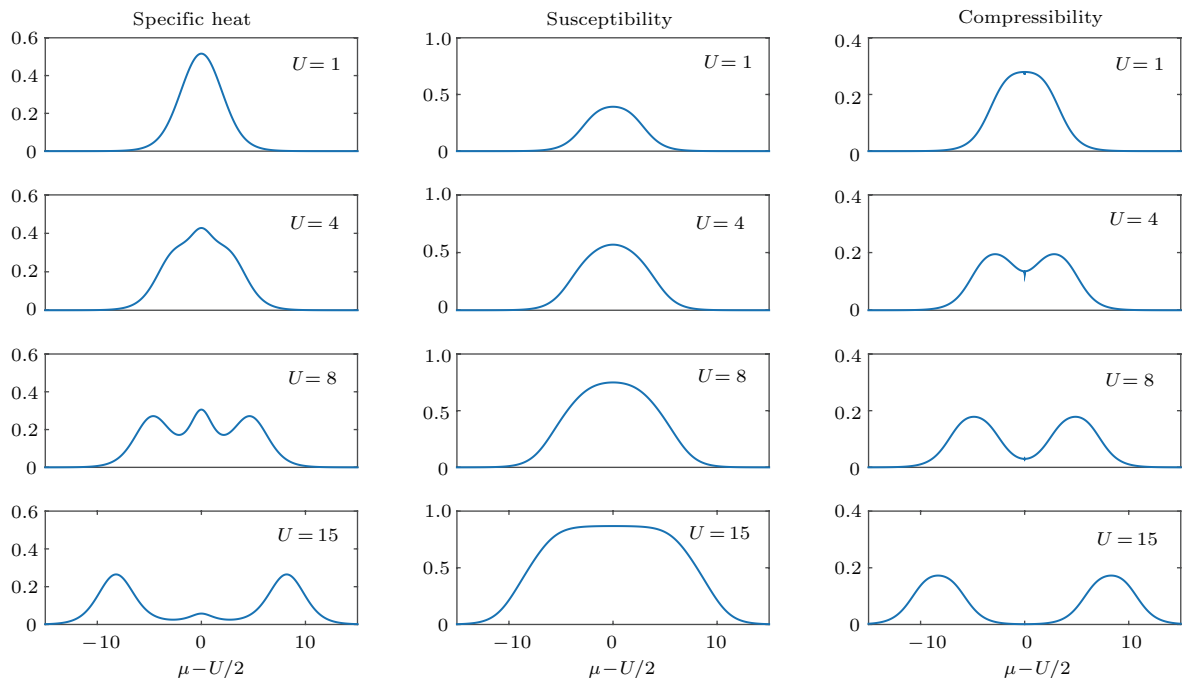


图5 (网刊彩色) 温度  $T = 1.0$ , 不同相互作用强度 ( $U = 1, 4, 8, 15$ ) 下的压缩比  $\kappa$ 、比热  $c$  和磁化率  $\chi$  随化学势  $\mu$  的变化

Fig. 5. (color online) Specific heat  $c$ , susceptibility  $\chi$ , and compressibility  $\kappa$  as a function of the chemical potential  $\mu$  for temperature  $T = 0.1$  and different interaction strength ( $U = 1, 4, 8, 15$ ).

### 3.2 一维束缚势中的 Hubbard 模型

本节分析光晶格中的一维费米冷原子体系, 由于束缚势的存在, 体系变成非均匀的. 在单带近似和紧束缚模型下, 体系可由非均匀的 Hubbard 模型 [方程 (8)] 描写. 下面我们讨论金属相和 Mott 绝缘相中的局域粒子密度  $n_i$  和局域压缩比  $\kappa_i$  在不同温度下的分布.

图 6 是相互作用  $U = 8$ , 粒子数  $N = 30$  时, 不同温度 ( $T = 0.01, 0.1, 0.6, 1.0$ ) 下金属态局域粒子密度  $n_i$  随格点  $i$  的变化. 其他物理参数为: 晶格长度  $N_a = 200$ , 谐振势强度  $V_{\text{ext}} = 2.5 \times 10^{-3}$ , 这些参数也用在以下其他图的计算中.

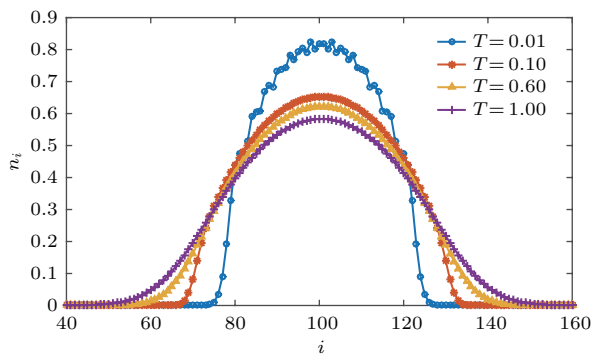


图 6 (网刊彩色) 相互作用  $U = 8$ , 粒子数  $N = 30$  时, 不同温度  $T = 0.01, 0.1, 0.6, 1.0$  下金属态的局域粒子密度  $n_i$  随着格点  $i$  的变化

Fig. 6. (color online) The local density  $n_i$  of the metal phase as a function of the lattice site  $i$  for interaction strength  $U = 8$ , the number of particles  $N = 30$ , and different temperature  $T = 0.01, 0.1, 0.6, 1.0$ .

从图 6 可以看出, 温度较低 ( $T = 0.01$ ) 时, 量子涨落引起的 Friedel 振荡仍然可见, 随着温度的升高, 热力学涨落占据主导作用, Friedel 振荡不复存在, 密度分布呈高斯型.

图 7 为相互作用  $U = 8$ , 粒子数  $N = 70$  时, 不同温度 ( $T = 0.01, 0.1, 0.6, 1.0$ ) 下 Mott 绝缘态局域粒子密度  $n_i$  的分布情况, 从图 7 可以看出, 在温度比较低的情况下, 整个体系是金属相和 Mott 绝缘相共存, Mott 平台 ( $n_i = 1$ ) 存在于势阱中部, 两边属于金属相. 温度  $T$  从 0.01 升高至 0.1 时, Mott 绝缘相整体保持稳定, 逐渐从 Mott 平台的两边开始受到破坏. 分析表明, Mott 平台稳健存在于  $T < 0.3$ , 破坏 Mott 相的温度和均匀体系相近. 当温度  $T$  升高到 1.0 时, 热力学涨落占主导作用, 体系的密度分布接近于高斯型.

为了更好地刻画温度和相互作用对 Mott 绝缘相的影响, 我们计算了局域压缩比, 定义为

$\kappa_i = \kappa(n)|_{n \rightarrow n_i}$ . 图 8 为温度  $T = 0.1$ , 相互作用  $U = 8$  时, 局域粒子密度分布  $n_i$  和局域压缩比  $\kappa_i$  的对比图. 从图 8 可以看出, 体系的局域压缩比  $\kappa_i$  为零的不可压缩区域对应着 Mott 绝缘平台 (虚线分割的中间部分正好对应 Mott 绝缘区) 和真空态, 分别对应着密度分布  $n_i = 1$  和  $n_i = 0$ . 图 9 为高温情况  $T = 1.0$  的局域压缩比  $\kappa_i$  和局域粒子密度  $n_i$  的对比, 可以看出局域压缩比在中间区域有下降的趋势但不为零, 这正说明了随着温度的升高, 由于相互作用和束缚势产生的 Mott 绝缘平台被破坏, 体系重新变成了可压缩的金属相, 相应的密度为  $n_i < 1$ .

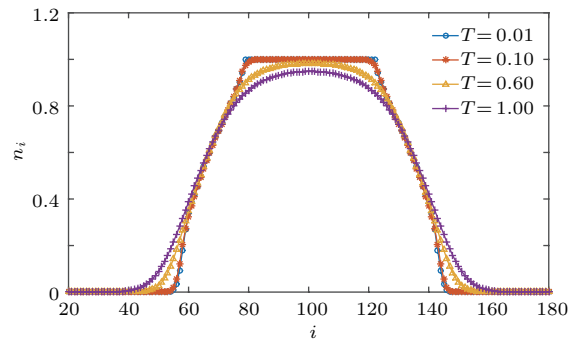


图 7 (网刊彩色) 相互作用  $U = 8$ , 粒子数  $N = 70$  时, 不同温度  $T = 0.01, 0.1, 0.6, 1.0$  下金属相和 Mott 绝缘相共存时的局域粒子密度  $n_i$  随着格点  $i$  的变化

Fig. 7. (color online) The local density  $n_i$  of the metal-Mott insulating mixed phase as a function of the lattice site  $i$  for interaction strength  $U = 8$ , the number of particles  $N = 70$ , and different temperature  $T = 0.01, 0.1, 0.6, 1.0$ .

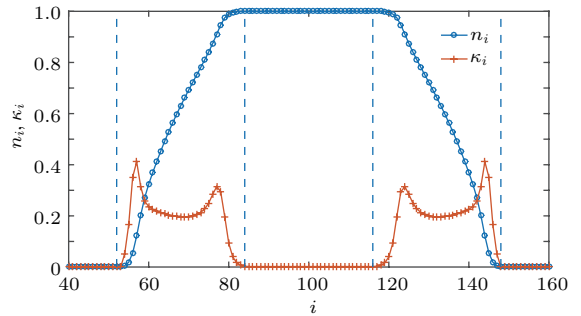


图 8 (网刊彩色) 温度  $T = 0.1$ , 相互作用  $U = 8$ , 粒子数  $N = 70$  时, 局域粒子密度  $n_i$  和局域压缩比  $\kappa_i$  随着格点  $i$  的变化 (图中的虚线从左到右把系统划分为真空态、金属相、Mott 绝缘体相、金属相、真空态)

Fig. 8. (color online) The local density  $n_i$  and local compressibility  $\kappa_i$  as a function of the lattice site  $i$  for temperature  $T = 0.1$ , interaction strength  $U = 8$ , and the number of particles  $N = 70$ . The dotted line from left to right divide the system into the vacuum phase, the metal phase, the Mott-insulating phase, the metal phase, and the vacuum phase.

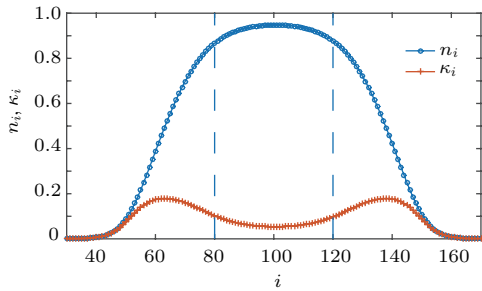


图9 (网刊彩色) 温度  $T = 1.0$ , 相互作用  $U = 8$ , 粒子数  $N = 70$  时, 局域粒子密度  $n_i$  和局域压缩比  $\kappa_i$  随着格点  $i$  的变化

Fig. 9. (color online) The local density  $n_i$  and the local compressibility  $\kappa_i$  as a function of the lattice site  $i$  for temperature  $T = 1.0$ , interaction strength  $U = 8$ , and the number of particles  $N = 70$ .

为了更好地理解有限温度下金属相向 Mott 绝缘相的转变过程, 我们给出了一维束缚势中的 Hubbard 模型在给定粒子数  $N = 70$ 、晶格长度  $N_a = 200$  和谐振势强度  $V_{\text{ext}} = 2.5 \times 10^{-3}$  下的  $T$ - $U$  相图, 如图 10 所示.

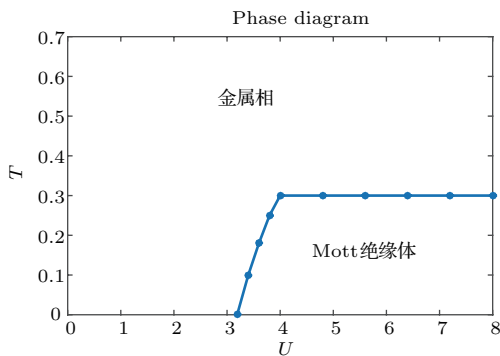


图 10 (网刊彩色) 一维束缚势中的 Hubbard 模型在给定粒子数  $N = 70$ 、晶格长度  $N_a = 200$  和谐振势强度  $V_{\text{ext}} = 2.5 \times 10^{-3}$  下的温度-相互作用 ( $T$ - $U$ ) 相图 (图中横坐标表示相互作用  $U$ , 纵坐标表示温度  $T$ , 图中的点是两个相的分界点)

Fig. 10. (color online)  $T$ - $U$  phase Diagram of a harmonically trapped Hubbard model in one dimension with the number of particles  $N = 70$ , the length of the lattice  $N_a = 200$  and the harmonic potential strength  $V_{\text{ext}} = 2.5 \times 10^{-3}$ . The points in the divide the region into two quantum phases.

从图 10 中我们可以看出, Mott 绝缘相只存在于温度  $T \leq 0.3$  和相互作用  $U \geq 3.2$  的区域, 随着温度的升高, 体系的 Mott 绝缘相会被破坏掉.

## 4 总结

本文通过数值方法求解了一维均匀 Hubbard 模型的 TBA 方程组, 得到了不同温度和相互作用

下压缩比  $\kappa$ 、比热  $c$  和磁化率  $\chi$  等热力学量. 发现在低温下, 这三个热力学量 (特别是压缩比  $\kappa$ ) 能够清晰地反映出体系的四个相变, 分别对应着体系从真空态向金属态转变、金属态向 Mott 绝缘体态转变、Mott 绝缘体态向金属态转变、金属态向带绝缘体态转变. 随着温度的升高, 热涨落逐渐取代量子涨落成为主导, 温度会破坏掉原有体系的 Mott 绝缘体相, 明显的相变点消失. 而后利用一维均匀 Hubbard 模型的 Bethe-ansatz 严格解的数值结果, 我们构造了可以用于研究一维非均匀 Hubbard 模型的化学势泛函方法:  $\mu$ -BALDA, 该方法从理论上讲是严格的密度泛函理论的变种. 化学势泛函理论的构造解决了密度泛函理论中 Kohn-Sham 耦合方程在交换关联势不连续时的不收敛问题, 并把问题转变成用多维二分法来解决以化学势为泛函的不动点问题, 从而收敛性可以得到保障.

我们用  $\mu$ -BALDA 方法我们数值求解了有限温度下一维谐振势中的 Hubbard 模型, 得到了不同温度下粒子的密度分布情况. 从结果中可以看出在给定相互作用  $U$  的情况下, 逐渐升高温度, 热涨落会破坏金属态中的 Friedel 振荡和 Mott 绝缘体平台, 最终变成平滑的高斯分布. 而 Mott 绝缘体在一定温度范围内保持稳定, 平台的破坏是从边界开始到中心地带, 从而使整个 Mott 平台被破坏. 最后通过对比非均匀体系的局域压缩比  $\kappa_i$ , 并与粒子密度分布  $n_i$  进行了对比, 验证了温度对 Mott 绝缘态的破坏. 在给定粒子数、晶格长度和谐振势强度下, 我们给出了一个简单的  $T$ - $U$  相图. 由相图可知在此情况下 Mott 绝缘相只存在于温度  $T \leq 0.3$  和相互作用  $U \geq 3.2$  的区域内.

本文所运用的  $\mu$ -BALDA 方法可以进一步推广到非均匀的具有短程相互作用的 Gaudin-Yang 模型和吸引 Hubbard 模型中去, 其中自旋激发有能隙, 相应的交换关联势在自旋为零处不连续. 另外也可以推广到一维  $XXZ$  模型 (可用 Jordan-Wigner 变换变成一维近邻相互作用的极化费米子模型, 在 Tomonaga-Luttinger 液体相和公度的电荷密度波相的临界点处  $n = 0.5$ , 交换关联势不连续) [38] 中去, 或推广到有限温度 (或多组分) 的上述模型 [26] 中去.

感谢浙江师范大学物理系王沛副教授在论文构思阶段部分物理内容的讨论.



参考文献

- [1] Wang Z C 2003 *Thermodynamics Statistical Physics* (Beijing: Higher Education Press) p300 (in Chinese) [汪志诚 1993 热力学和统计物理学 (北京: 高等教育出版社) 第300页]
- [2] Chu S, Hollberg L, Bjorkholm J E, Cable A, Ashkin A 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 48
- [3] Davis K B, Mewes M O, Andrews M R, van Druten N J, Durfee D S, Kurn D M, Ketterle W 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969
- [4] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E, Cornell E A 1995 *Science* **269** 198
- [5] DeMarco B, Jin D S 1999 *Science* **285** 1703
- [6] Feshbach H 1958 *Ann. Phys.* **5** 357
- [7] Batchelor M T, Bortz M, Guan X W, Oelkers N 2005 *Phys. Rev. A* **72** 061603
- [8] Pachos J K, Knight P L 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 107902
- [9] Tomonaga S 1950 *Prog. Theo. Phys.* **5** 544
- [10] Luttinger J M 1963 *J. Math. Phys.* **4** 1154
- [11] Gao X L 2010 *Phys. Rev. B* **81** 104306
- [12] Bethe H 1931 *Z. Phys.* **71** 205
- [13] Lieb E H, Liniger W 1963 *Phys. Rev.* **130** 1605
- [14] Yang C N 1967 *Phys. Rev. Lett.* **19** 1312
- [15] Gaudin M 1967 *Phys. Lett. A* **24** 55
- [16] Lieb E H, Wu F Y 1968 *Phys. Rev. Lett.* **20** 1445
- [17] Hu H, Gao X L, Liu X J 2014 *Phys. Rev. A* **90** 013622
- [18] Lee J Y, Guan X W, Sakai K, Batchelor M T 2012 *Phys. Rev. B* **85** 085414
- [19] Guan X W, Batchelor M T, Lee C 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1633
- [20] Yang C N, Yang C P 1969 *J. Math. Phys.* **10** 1115
- [21] Takahashi M 1969 *Prog. Theo. Phys.* **42** 1098
- [22] Takahashi M 1972 *Prog. Theo. Phys.* **47** 69
- [23] Batchelor M T, Guan X W 2006 *Phys. Rev. B* **74** 195121
- [24] Batchelor M T, Guan X W, Oelkers N 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 210402
- [25] Guan X W, Batchelor M T, Lee C, Bortz M 2007 *Phys. Rev. B* **76** 085120
- [26] Jiang Y Z, Chen Y Y, Guan X W 2015 *Chin. Phys. B* **24** 050311
- [27] Kuhn C C N, Guan X W, Foerster A, Batchelor M T 2012 *Phys. Rev. A* **86** 011605
- [28] Guan X W, Lee J Y, Batchelor M T, Yin X G, Chen S 2010 *Phys. Rev. A* **82** 021606
- [29] Gao X L, Chen A H, Tokatly I V, Kurth S 2012 *Phys. Rev. B* **86** 235139
- [30] Gao X L 2012 *J. Phys. B* **45** 225304
- [31] Gao X L, Asgari R 2008 *Phys. Rev. A* **77** 033604
- [32] Hu J H, Wang J J, Gao X L, Okumura M, Igarashi R, Yamada S, Machida M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 014202
- [33] Campo V L 2015 *Phys. Rev. A* **92** 013614
- [34] Gao X L, Polini M, Rainis D, Tosi M P, Vignale G 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 206402
- [35] Li W, Gao X L, Kollath C, Polini M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 195109
- [36] Takahashi M, Shiroishi M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165104
- [37] Ying Z J, Brosco V, Lorenzana J 2014 *Phys. Rev. B* **89** 205130
- [38] Wang C J, Chen A H, Gao X L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 127501 (in Chinese) [王婵娟, 陈阿海, 高先龙 2012 物理学报 **61** 127501]

# Chemical potential-functional-theory about the properties of one-dimensional Hubbard model at finite temperature\*

Lu Zhan-Peng   Wei Xing-Bo   Liu Tian-Shuai   Chen A-Hai   Gao Xian-Long<sup>†</sup>

(Department of Physics, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China)

( Received 7 January 2017; revised manuscript received 26 March 2017 )

## Abstract

In this paper, we numerically solve the thermodynamic Bethe-ansatz coupled equations for a one-dimensional Hubbard model at finite temperature and obtain the second order thermodynamics properties, such as the specific heat, compressibility, and susceptibility. We find that these three quantities could embody the phase transitions of the system, from the vacuum state to the metallic state, from the metallic state to the Mott-insulating phase, from the Mott-insulating phase to the metallic state, and from the metallic state to the band-insulating phase. With the increase of temperature, the thermal fluctuation overwhelms the quantum fluctuations and the phase transition points disappear due to the destruction of the Mott-insulating phase. But in the case of the strong interaction strength, the Mott-insulating phase is robust, embodying the compressibility. Furthermore, we study the thermodynamic properties of the inhomogeneous Hubbard model with trapping potential. Making use of the Bethe-ansatz results from the homogeneous Hubbard model, we construct the chemical potential-functional theory ( $\mu$ -BALDA) for the inhomogeneous Hubbard model instead of the commonly used density-functional theory, in order to solve the in-convergence problem of the Kohn-Sham equation in the case of the divergence appearing in the exchange-correlation potential. We further point out a multi-dimensional bisection method which changes the Kohn-Sham equation into a problem of finding the fixed points. Through  $\mu$ -BALDA we numerically solve the one-dimensional homogeneous Hubbard model of trapping potential. The density profile and the local compressibility are obtained. We find that at a given interaction strength, the metallic phase and the Mott-insulating phase are destroyed and the density profile becomes a Gaussian distribution with increasing temperature. To the metallic phase, Friedel oscillation caused by quantum fluctuations is still visible at low temperature. With increasing temperature, Friedel oscillation will disappear. This situation reflects the fact that the thermal fluctuation overwhelms the quantum fluctuations. For the Mott-insulating phase, the Mott-insulating plateau is robust at a certain temperature and only the boundary of the Mott-insulating plateau is destroyed. With increasing temperature, the Mott insulating plateau will be destroyed. And the change of the local compressibility provides the information about such a change. So we conclude that the thermal fluctuation destroys the original quantum phase. Through our analysis, we find that the  $\mu$ -BALDA can be used to study the finite temperature properties for the system of the exchange-correlation potential divergence with high efficiency.

**Keywords:** thermodynamic Bethe-ansatz equations, compressibility, Hubbard model, chemical potential-functional theory

**PACS:** 67.25.bd, 71.10.-w

**DOI:** 10.7498/aps.66.126701

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11374266), the Program for New Century Excellent Talents in University, China, and the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. Z15A050001).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [gaoxl@zjnu.edu.cn](mailto:gaoxl@zjnu.edu.cn)