

双轨道Hubbard模型的动力学平均场理论研究

倪煜 孙健 全亚民 罗东奇 宋筠

Dynamical mean-field theory of two-orbital Hubbard model

Ni Yu Sun Jian Quan Ya-Min Luo Dong-Qi Song Yun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 147103 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220286

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220286>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

各向异性ruby晶格中费米子体系的Mott相变

Mott transition of fermions in anisotropic ruby lattice

物理学报. 2021, 70(23): 230305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210963>

基于平均场近似的BP算法求解随机块模型

A mean-field approximation based BP algorithm for solving the stochastic block model

物理学报. 2021, 70(22): 228901 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210511>

HD⁺分子的强场光解离动力学及其量子调控的理论研究

Theoretical study of dissociation dynamics of HD⁺ and its quantum control with an intense laser field

物理学报. 2019, 68(17): 178201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190400>

两次淬火下横场中XY链的动力学量子相变

Dynamical quantum phase transitions in transverse field XY chain after a double quench

物理学报. 2021, 70(18): 180502 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210728>

考虑对流和扩散两种动力学起源的连续时间随机行走模型

Continuous time random walk model with advection and diffusion as two distinct dynamical origins

物理学报. 2019, 68(13): 130501 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190088>

共轭聚合物内非均匀场驱动的超快激子输运的动力学研究

Dynamical study of ultrafast exciton migration in conjugated polymers driven by nonuniform field

物理学报. 2019, 68(17): 177201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190432>

双轨道 Hubbard 模型的动力学平均场理论研究*

倪煜¹⁾ 孙健²⁾ 全亚民³⁾ 罗东奇¹⁾ 宋筠^{1)†}

1) (北京师范大学物理系, 北京 100875)

2) (上海科技大学物质科学与技术学院, 上海 201210)

3) (中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所, 材料物理重点实验室, 合肥 230031)

(2022 年 2 月 17 日收到; 2022 年 3 月 24 日收到修改稿)

基于以 Lanczos 方法为杂质求解器的动力学平均场理论, 研究了非局域轨道间跃迁对于双轨道强关联体系中轨道选择 Mott 相变的影响. 计算了轨道间跃迁系数不同的双轨道 Hubbard 模型的准粒子权重和态密度, 并构建了它们在相互作用强度 U 和轨道带宽比 t_2/t_1 影响下的相图. 通过正则变换引入两个有效的退耦和轨道, 在一定条件下轨道间跃迁会有利于轨道选择 Mott 相变的发生. 还比较了 Bethe 晶格和正方晶格的相图, 虽然基于两种不同晶格能带结构得到的轨道选择 Mott 相变的相变点存在一定的差异, 但其中关于轨道选择 Mott 相变的基本物理图像具有一致性. 并将方法拓展到半满的 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 材料的研究中, 与根据密度泛函理论得到的能带对比, 我们发现各向同性的轨道间跃迁对能带结构影响较大, 进一步采用动量空间各向异性的非局域轨道间跃迁项, 得到了材料的相图, 在半满条件下 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 应为轨道选择 Mott 材料.

关键词: 动力学平均场理论, Mott 相变, 双轨道 Hubbard 模型**PACS:** 71.27.+a, 71.30.+h, 74.72.-h**DOI:** 10.7498/aps.71.20220286

1 引言

轨道选择 Mott 相变 (orbital-selective Mott transition, OSMT) 是过渡金属材料中的一种新奇物理现象: 多轨道体系中部分轨道上的电子进入局域化状态, 而其他轨道的电子仍然具有巡游特性. 实验上在 $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ ^[1], 过渡金属硫化物^[2] 以及铁基超导材料^[3] 中均观测到了 OSMT, 其了解强关联系统的本质很有帮助. 双轨道 Hubbard 模型是研究 OSMT 最简单的模型^[4–7]. 动力学平均场理论 (dynamical mean-field theory, DMFT) 在处理单轨道 Hubbard 模型的相关问题中成效显著^[8–11], 并且它拓展到双轨道 Hubbard 模型中也十分有效^[5,12,13].

DMFT 中处理 Anderson 杂质模型所用的杂质求解器对于最终的计算结果有很大的影响, 多种多样的理论以及数值方法都能用作动力学平均场的杂质求解器, 如量子蒙特卡罗方法 (quantum Monte Carlo simulations, QMC)^[14–17], 重整化群理论 (renormalization-group theory)^[18–20] 以及隶算符表示方法 (slave-variable representations)^[21–23] 等. 当 DMFT 用于多轨道体系的求解时, 不同的杂质求解器会面临不同的困难: 在处理掺杂的费米体系时, QMC 方法会出现负几率问题; 重整化群理论能很好地处理单带问题, 但却难以拓展到多带体系; 隶算符表示方法无法精确处理多轨道体系中的电子关联相互作用. 除了上述杂质求解器外, 还有以 Lanczos 方法为代表的精确对角化方法, 它能精确地处理多轨道体系中包括轨道内相互作用 U 、

* 国家自然科学基金 (11474023, 11774350) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yunsong@bnu.edu.cn

轨道间相互作用 U' 以及洪特耦合 J_H 在内的电子关联作用, 但是对于含有非局域轨道间跃迁的系统, 轨道间跃迁所引入的非对角格林函数将会使自治参数求解过程的复杂程度显著增加, 并需要耗费巨大的计算资源.

轨道间跃迁会诱发轨道杂化, 其在具有多轨道关联效应的过渡金属中至关重要^[24–26], 但同时它所带来的非对角格林函数为处理多轨道 Hubbard 模型带来了巨大挑战. 本文引入正则变换将双轨道 Hubbard 模型中的紧束缚部分对角化^[27,28], 得到了没有轨道间跃迁的有效杂化轨道. 同时为了更精确地计算轨道间相互作用对体系的影响, 选取 Lanczos 精确对角化方法作为杂质求解器, 比起早先的工作^[27,28], 该方法能更加精确地描述库仑相互作用以及洪特耦合效应对体系量子相变的影响, 因此所得相图的相变点也更加准确. 除了 DMFT 理论中常用的 Bethe 晶格外, 本文还基于正方晶格能带结构计算了双轨道体系的相图, 并发现 DMFT 中选用的晶格能带结构不同时, 虽然所得相变点存在差异, 但相图展现出来的轨道选择 Mott 相变的物理图像基本一致. 最后应用文中的方法研究了最近发现的新型铜氧化物超导材料 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ ^[29]. $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 是高空穴掺杂浓度下的铜氧化物超导材料, 其超导转变温度约为 73 K. 由于其具有极其扁平的 CuO_6 八面体结构, 铜原子的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道和 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道均对费米面附近的电子态有贡献^[29–32], 这种特殊的双轨道特性是其区别于传统铜氧化物超导材料的地方, 同时密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的计算结果也对双带特性进行了印证^[33–35]. 有理论研究表明这种特殊的多轨道关联特征极有可能是 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 的超导转变温度高于大部分高温超导材料的原因^[34,36]. 对于半满的 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 体系, 我们考虑非局域轨道间跃迁的动量空间各向异性, 通过 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 的完整能带, 得到了材料在半满条件下的相图.

本文主要结构如下: 第 2 部分对含轨道间跃迁的双带 Hubbard 模型中的正则变换进行介绍; 第 3 部分对研究所用的理论方法——以 Lanczos 为求解器的 DMFT 进行详细的说明; 第 4 部分介绍基于上述方法得到的双轨道 Hubbard 模型中轨道选择 Mott 相变的物理图像以及轨道间跃迁对其的影响, 并对比用正方晶格能带代入 DMFT 中计算与 Bethe 晶格的差异; 第 5 部分将方法应用于双轨

道超导材料 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3.5}$ 中, 并介绍了所得的结果; 第 6 部分为文章的主要结论.

2 双轨道模型中的正则变换

双轨道体系的哈密顿量可以分为两部分: 紧束缚部分 H_t 和相互作用部分 H_I , 紧束缚部分 H_t 的形式为

$$H_t = - \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{l\sigma} t_l d_{il\sigma}^\dagger d_{jl\sigma} - \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{l \neq l', \sigma} t_{ll'} d_{il\sigma}^\dagger d_{jl'\sigma} - \mu \sum_{il\sigma} d_{il\sigma}^\dagger d_{il\sigma}, \quad (1)$$

相互作用部分 H_I 的形式为^[4,6]

$$H_I = \frac{U}{2} \sum_{il\sigma} n_{il\sigma} n_{il\bar{\sigma}} + \sum_{i,l < l', \sigma\sigma'} (U' - \delta_{\sigma\sigma'} J_H) n_{il\sigma} n_{il'\sigma'} + \frac{J_H}{2} \sum_{i,l \neq l', \sigma} d_{il\sigma}^\dagger d_{il\bar{\sigma}}^\dagger d_{il'\sigma} d_{il'\bar{\sigma}} + \frac{J_H}{2} \sum_{i,l \neq l', \sigma\sigma'} d_{il\sigma}^\dagger d_{il'\sigma'}^\dagger d_{il\sigma} d_{il'\sigma'}, \quad (2)$$

其中 $d_{il\sigma}^\dagger$ ($d_{il\sigma}$) 是 i 格点的 l 轨道上自旋为 σ 电子的产生 (湮灭) 算符, $\langle ij \rangle$ 表示遍布全空间最近邻格点的求和. t_l 为最近邻同轨道的跃迁系数, $t_{ll'}$ 为最近邻不同轨道间的跃迁系数. U 和 U' 分别表示轨道内电子相互作用和轨道间电子相互作用, J_H 为洪特耦合强度. 本文研究的系统具有自旋旋转对称性, 相互作用部分 H_I 的系数满足 $U = U' + 2J_H$ 的关系.

通过正则变换消除轨道间跃迁, 进而引入两个退耦合的有效轨道 α 和 β ^[27,28], 正则变换的形式如下:

$$\begin{aligned} d_{i1\sigma} &= u\alpha_{i\sigma} + v\beta_{i\sigma}, \\ d_{i2\sigma} &= -v\alpha_{i\sigma} + u\beta_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned} u &= -\frac{t_{12}}{\sqrt{2}|t_{12}|} \left[1 + \sqrt{\frac{(t_1 - t_2)^2}{(t_{12})^2 + (t_1 - t_2)^2}} \right]^{1/2}, \\ v &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 - \sqrt{\frac{(t_1 - t_2)^2}{(t_{12})^2 + (t_1 - t_2)^2}} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4)$$

(3) 式中, $\alpha_{i\sigma}$ 和 $\beta_{i\sigma}$ 分别表示 i 格点上的有效轨道 α 和 β 中自旋为 σ 的电子湮灭算符, 由 (4) 式决定的 u 值和 v 值代入哈密顿量 (1) 中将会使轨道间跃迁项消失. 通过正则变换, (1) 式和 (2) 式描述的

原双轨道的哈密顿量会转换为有效轨道的双轨道哈密顿量 H^{eff} , 其同样包含紧束缚部分 H_t^{eff} 和相互作用部分 H_I^{eff} , 紧束缚部分 H_t^{eff} 为

$$H_t^{\text{eff}} = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (t_{\alpha} \alpha_{i\sigma}^{\dagger} \alpha_{j\sigma} + t_{\beta} \beta_{i\sigma}^{\dagger} \beta_{j\sigma}) - \mu \sum_{i\sigma} (\alpha_{i\sigma}^{\dagger} \alpha_{i\sigma} + \beta_{i\sigma}^{\dagger} \beta_{i\sigma}), \quad (5)$$

相互作用部分 H_I^{eff} 为

$$H_I^{\text{eff}} = \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} (n_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\bar{\sigma}} + n_{i\beta\sigma} n_{i\beta\bar{\sigma}}) + \sum_{i\sigma\sigma'} (U' - \delta_{\sigma\sigma'} J_H) n_{i\alpha\sigma} n_{i\beta\sigma'} + \frac{J_H}{2} \sum_{i,\sigma} (\alpha_{i\sigma}^{\dagger} \alpha_{i\bar{\sigma}}^{\dagger} \beta_{i\sigma} \beta_{i\bar{\sigma}} + \beta_{i\sigma}^{\dagger} \beta_{i\bar{\sigma}}^{\dagger} \alpha_{i\sigma} \alpha_{i\bar{\sigma}}) + \frac{J_H}{2} \sum_{i,\sigma\sigma'} (\alpha_{i\sigma}^{\dagger} \beta_{i\sigma'}^{\dagger} \alpha_{i\sigma'} \beta_{i\sigma} + \beta_{i\sigma}^{\dagger} \alpha_{i\sigma'}^{\dagger} \beta_{i\sigma'} \alpha_{i\sigma}). \quad (6)$$

根据正则变换 (3) 可知紧束缚部分 H_t^{eff} 的系数为

$$t_{\alpha} = t_1 u^2 + t_2 v^2 - t_{12} uv, \\ t_{\beta} = t_1 v^2 + t_2 u^2 + t_{12} uv, \quad (7)$$

结合 (4) 式可以看出, 正则变换后的跃迁积分 t_{α} 和 t_{β} 与 t_{12} 的取值正负无关. 因为本文研究的系统具有自旋旋转对称性 $U = U' + 2J_H$, 相互作用部分 H_I^{eff} 的系数在正则变换后保持不变.

3 动力学平均场理论

正则变换之后去除轨道杂化的双轨道模型, 可以通过 DMFT 有效地处理.

在 DMFT 的基本框架中 [8], 我们将多体问题

中格点数量巨大的格点哈密顿量 (5) 和 (6) 映射成格点数目有限的 Anderson 杂质哈密顿量 H_{imp} ,

$$H_{\text{imp}} = \sum_{m\sigma} (\varepsilon_{m\sigma}^{\alpha} c_{\alpha m\sigma}^{\dagger} c_{\alpha m\sigma} + \varepsilon_{m\sigma}^{\beta} c_{\beta m\sigma}^{\dagger} c_{\beta m\sigma}) + \sum_{m\sigma} V_{m\sigma}^{\alpha} (c_{\alpha m\sigma}^{\dagger} \alpha_{\sigma} + \alpha_{\sigma}^{\dagger} c_{\alpha m\sigma}) + \sum_{m\sigma} V_{m\sigma}^{\beta} (c_{\beta m\sigma}^{\dagger} \beta_{\sigma} + \beta_{\sigma}^{\dagger} c_{\beta m\sigma}) - \mu \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma}^{\dagger} \alpha_{\sigma} - \mu \sum_{\sigma} \beta_{\sigma}^{\dagger} \beta_{\sigma} + H_I^{\text{eff}}(\alpha, \beta), \quad (8)$$

其中 $c_{\gamma m\sigma}^{\dagger}$ ($c_{\gamma m\sigma}$) 表示外场格点 (浴格点) m 上 γ 轨道 ($\gamma = \alpha, \beta$) 中自旋为 σ 的电子产生 (湮灭) 算符, $\varepsilon_{m\sigma}^{\gamma}$ 为第 m 个外场格点上轨道 γ 的能量, $V_{m\sigma}^{\gamma}$ 表示外场格点 m 的轨道 γ 和本文研究的杂质格点轨道 γ 之间的耦合系数. 本文计算选取的外场格点数目 $n_b = 3$, 因为 DMFT 的相关研究证明当外场格点数 $n_b \geq 3$ 时, 以 Lanczos 作为杂质求解器的 DMFT 得到的 OSMT 相变点基本一致 [37].

正则变换之后的哈密顿量去除了轨道间的杂化, 因此格林函数和自能都不含关于轨道的非对角项, 各轨道的格林函数可以独立地计算. 杂质模型的 Weiss 场格林函数 (无相互作用格林函数) 可以由杂质模型的系数直接计算:

$$G_{0\gamma\sigma}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\gamma} - \sum_m \frac{(V_{m\sigma}^{\gamma})^2}{i\omega_n - \varepsilon_{m\sigma}^{\gamma}}. \quad (9)$$

通过 Lanczos 杂质求解器可以得到杂质模型格林函数 $G_{\text{imp}}^{(\gamma)}$ [38–40], 在 Lanczos 方法中

$$G_{\text{imp}}^{(\gamma)}(i\omega_n) = G_{\gamma}^{(+)}(i\omega_n) + G_{\gamma}^{(-)}(i\omega_n), \quad (10)$$

其中

$$G_{\gamma}^{(+)}(i\omega_n) = \frac{\langle \phi_0 | \gamma \gamma^{\dagger} | \phi_0 \rangle}{i\omega_n - a_0^{(+)} - \frac{b_1^{(+)^2}}{i\omega_n - a_1^{(+)} - \frac{b_2^{(+)^2}}{i\omega_n - a_2^{(+)} - \dots}}}, \quad (11)$$

$$G_{\gamma}^{(-)}(i\omega_n) = \frac{\langle \phi_0 | \gamma^{\dagger} \gamma | \phi_0 \rangle}{i\omega_n + a_0^{(-)} - \frac{b_1^{(-)^2}}{i\omega_n + a_1^{(-)} - \frac{b_2^{(-)^2}}{i\omega_n + a_2^{(-)} - \dots}}}. \quad (12)$$

DMFT 通过自洽方程来使 Weiss 场格林函数和无相互作用的格点格林函数相等, 进而可以用杂质模型来表征格点模型的物理性质. 如果考虑具有

半圆形态密度的 Bethe 晶格, DMFT 中的无相互作用的格点格林函数可以化简为非常简洁且便于计算的形式 [8]:

$$g_0^{(\gamma)}(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n + \mu - t_\gamma^2 G_{\text{imp}}^{(\gamma)}(i\omega_n), \quad (13)$$

其中 $g_0(i\omega_n)$ 为无相互作用的格点模型格林函数. (13) 式中 $g_0(i\omega_n)$ 以及由 (9) 式计算的 Weiss 场格林函数 $G_0(i\omega_n)$ 做差即为 DMFT 的自洽方程:

$$d = \frac{1}{n_{\text{max}} + 1} \sum_{\gamma=1}^2 \sum_{n=0}^{n_{\text{max}}} \left| g_0^{(\gamma)}(i\omega_n)^{-1} - G_{0\gamma}^{-1}(i\omega_n) \right|^2, \quad (14)$$

其中 n_{max} 为截断系数, 计算中取 $n_{\text{max}} = 2048$. 利用共轭梯度算法调整自洽参数 V_m^γ 和 ε_m^γ 使 (14) 式中的 d 趋于 0, 我们工作中体系自洽完成的判断标准为 d 值小于 10^{-5} .

如果计算中选用其他晶格的能带结构, 则在计算局域的格点格林函数 $G_{\text{lat}}(i\omega_n)$ 的过程中需要在动量空间对动量 \mathbf{k} 求和, 以正方晶格为例,

$$G_{\text{lat}}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n, \mathbf{k})}, \quad (15)$$

其中 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 2t(\cos k_x + \cos k_y)$ 代表正方晶格的色散关系, $\Sigma(i\omega_n, \mathbf{k})$ 为体系自能 (因为各轨道独立, 所以这里略去了轨道指标 γ). 在 DMFT 中, 当体系的维度 d 趋于无穷大时空间的涨落将会被冻结, 此时系统自能将不再依赖动量 \mathbf{k} 而局域化 [8]:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \Sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = \Sigma_{\text{loc}}(i\omega_n). \quad (16)$$

通过 Dyson 方程可以计算杂质模型的自能:

$$\Sigma_{\text{loc}}(i\omega_n) = G_0^{\text{imp}}(i\omega_n)^{-1} - G_{\text{imp}}(i\omega_n)^{-1}, \quad (17)$$

其中, $G_0^{\text{imp}}(i\omega_n)$ 和 $G_{\text{imp}}(i\omega_n)$ 分别为利用 (9) 式和 (10) 式计算的杂质模型的 Weiss 场格林函数以及考虑相互作用的格林函数. DMFT 中认为杂质格林函数的自能与格点格林函数的局域自能相等, 因此可以通过 (15) 式—(17) 式计算格点格林函数 $G_{\text{lat}}(i\omega_n)$. 对于正方晶格, 本文选取的自洽标准为 $G_{\text{imp}}(i\omega_n) = G_{\text{lat}}(i\omega_n)$, 同样地, 在自洽过程通过共轭梯度算法调整自洽参数 V 和 ε 来使 $G_{\text{imp}}(i\omega_n)$ 和 $G_{\text{lat}}(i\omega_n)$ 相等.

利用体系的格林函数虚部来计算各轨道的态密度:

$$A_\gamma(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_\gamma^\gamma(\omega + i\eta), \quad (18)$$

其中 η 为能量展宽因子, γ 为轨道指标. 各轨道的准粒子权重可以通过自能计算 [41]:

$$Z_\gamma = \left[1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re} \Sigma_\gamma(\omega + i\eta) \Big|_{\omega=0} \right]^{-1}. \quad (19)$$

4 计算结果与讨论

首先研究相互作用 U 和轨道间跃迁 t_{12} 对 Bethe 晶格双带 Hubbard 模型相变的影响. 研究中选取轨道间跃迁 $t_{12} > 0$, 因为正则变换后的跃迁积分 t_α 和 t_β 与 t_{12} 的取值正负无关, 所以之后的研究结果能够自然地拓展到 $t_{12} < 0$ 的情况中. 在本文研究的半满体系中, 化学势保持 $\mu = U/2 + U' - J_H/2$ 以满足粒子空穴对称性. 图 1 比较了当两轨道带宽比 $t_2/t_1 = 0.4$, 相互作用 U 以及轨道间跃迁 t_{12} 不同时体系准粒子权重的变化. 当 $t_{12} = 0$ 时, 从准粒子权重曲线可以看出, 宽有效轨道 α 金属绝缘体相变 (metal-insulator transition, MIT) 的相变点 $U_{c\alpha} = 3.7$, 而窄有效轨道 β 在相互作用强度 $U_{c\beta} = 2.3$ 时发生金属绝缘体相变, 因此体系在相互作用强度 $2.3 \leq U < 3.7$ 时处于轨道选择 Mott 相 (orbital-selective Mott phase, OSMP). 当轨道间跃迁系数 $t_{12} = 0.4$ 时, 轨道选择 Mott 相对应的相互作用区间扩大为 $2.1 \leq U < 4.1$, 轨道间跃迁的引入使窄有效轨道 β 发生 MIT 所需的相互作用强度减弱, 而使宽有效轨道 α 的临界相互作用

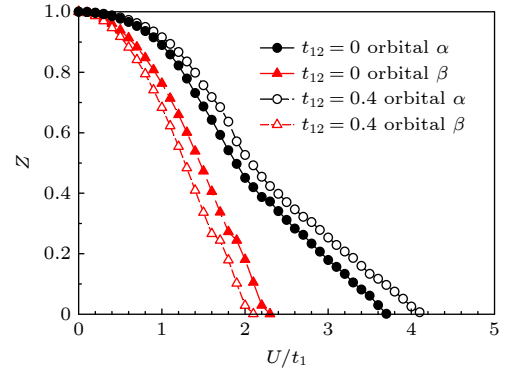


图 1 不同轨道间跃迁系数下两个有效轨道的准粒子权重 Z 随相互作用 U 的变化曲线. 轨道 α 和轨道 β 分别用黑色圆圈和红色三角标识, 实心标志和空心标志分别代表 $t_{12} = 0$ 和 $t_{12} = 0.4$ 的情况. 体系中的洪特耦合作用 $J_H = 0.25U$, 两轨道带宽比 $t_2/t_1 = 0.4$, 所选用的能量单位为宽带跃迁系数 t_1

Fig. 1. The interaction dependencies of the quasiparticle weight Z of the effective orbital α (black circles) and β (red triangles) with interorbital hopping $t_{12} = 0.4$ (hollow symbols) and without interorbital hopping $t_{12} = 0$ (solid symbols) when $J_H = 0.25U$ and $t_2/t_1 = 0.4$. The energy is in unit t_1 .

用 $U_{\alpha\alpha}$ 增强. 由 (7) 式可知, 轨道间相互作用通过调整两个有效轨道的跃迁系数来促进 OSMT 的发生, 如当 $t_{12} = 0.4$ 时, 两个有效轨道的跃迁系数比值为 $t_{\beta}/t_{\alpha} = 0.32$, 因此体系更容易发生轨道选择 Mott 相变.

图 2 给出了当轨道间跃迁 $t_{12} = 0.4$ 、带宽比 $t_2/t_1 = 0.4$ 以及洪特耦合 $J_H = 0.25U$ 时双轨道体系的态密度随相互作用强度 U 变化的细节. 当相互作用强度 $U = 1.5$ 时, 有效轨道 α (图 2(a)) 和 β (图 2(b)) 在费米面附近都存在明显的准粒子峰, 这意味着两个轨道都处于金属态, 因此整个体系表现出金属相的特征. 当相互作用强度增加至 $U = 3.0$ 时, 轨道 α 在费米面附近仍存在明显的准粒子峰 (图 2(c)), 但此时轨道 β 的费米面附近打开了 Mott 能隙 (图 2(d)), 这是 OSMP 的典型特征. 继续增加相互作用强度至 $U = 4.5$, 图 2(e) 和图 2(f) 中两个有效轨道均在费米面附近打开了 Mott 能隙, 这也意味着体系进入了 Mott 绝缘相. 图 2 给出的物理图像与图 1 中 $t_{12} = 0.4$ 的曲线相符合, 这二者也是本文判定体系物态以及绘制相图的依据.

图 3(a) 所示为轨道间跃迁系数 t_{12} 不同时, 两轨道带宽比 t_2/t_1 和相互作用强度 U 影响下的体系相图. 在没有轨道间跃迁的双轨道体系中, 除了 $t_2/t_1 = 1$ 的情况外体系中均存在 OSMP, 这主要是由于洪特耦合的作用^[42], 相图中 OSMP 区域的范

围随着带宽比 t_2/t_1 的增加而收缩, 说明两轨道差异越大体系越容易发生轨道选择 Mott 相变, 这与早先对 OSMP 的研究结果相符合^[43–45]. 在双轨道体系中引入轨道间跃迁之后, 两个有效轨道之间的差异会增大, 这将导致相图中轨道选择 Mott 相的区域扩大, 图 3(b) 直观地反映了当 $t_{12} = 0.4$ 时相图中 OSMP 区域的扩大, 和图 3(a) 对比可以看出, 所有的 t_2/t_1 情况下轨道选择 Mott 相的区域都扩大了, 并且两轨道差异越小轨道间跃迁对 OSMP 的促进作用越明显.

根据 (15) 式及正方晶格的能带结构, 研究了正方晶格双轨道 Hubbard 模型中的 OSMT. 图 4 给出了正方晶格 $t_2/t_1 = 0.4$ 时轨道间跃迁 t_{12} 及相互作用 U 影响的准粒子权重变化, 以及 $t_{12} = 0.4$ 时相互作用 U 和带宽比 t_2/t_1 决定的相图, 可与 Bethe 晶格的结果 (图 1 和图 3(b)) 做对比. 如图 4(a) 所示, 当 $t_{12} = 0$ 时体系在相互作用强度 $3.9 \leq U < 6.6$ 时处于轨道选择 Mott 相; 引入轨道间跃迁 $t_{12} = 0.4$, OSMP 存在范围扩大至 $3.5 \leq U < 6.9$, 尽管相变点的具体数值与 Bethe 晶格的结果存在差异, 但是 $t_{12} = 0.4$ 对 OSMP 影响的物理图像是一致的. 图 4(b) 进一步印证了这一点, $t_{12} = 0.4$ 时体系相图中的 OSMT 的相变点与图 3(b) 中的存在差异, 但二者的 OSMP 的变化趋势基本一致, 都反映出两轨道带宽差异越小轨道间相互作用对 OSMP 的

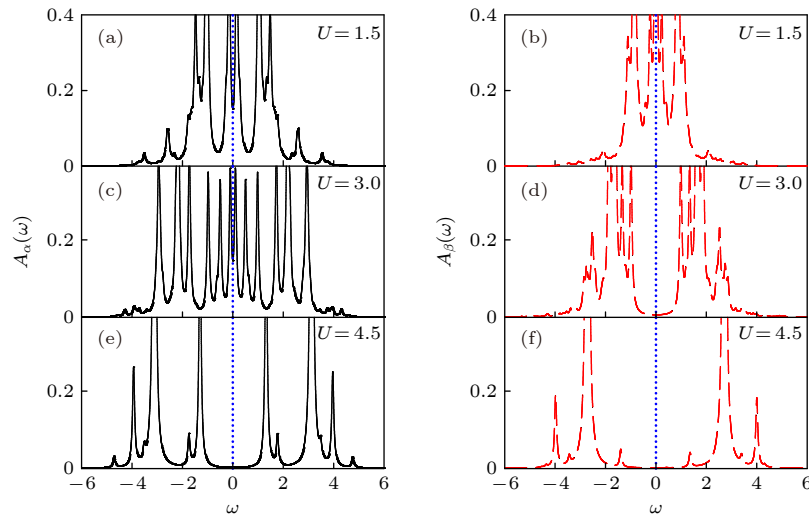


图 2 两个有效轨道的态密度随相互作用 U 增加的演化图像, 体系中的轨道间跃迁 $t_{12} = 0.4$, 带宽比 $t_2/t_1 = 0.4$ 以及相互作用强度 $J_H = 0.25U$. 左边的图像为 α 轨道的结果, 右边图像为 β 轨道的结果, 计算中选取的能量展宽因子为 $\eta = 0.05$

Fig. 2. Evolution of the orbital-resolved spectral density $A(\omega)$ with the increasing Coulomb interaction U when $t_{12} = 0.4$, $t_2/t_1 = 0.4$ and $J_H = 0.25U$. Left panels show the results of effective orbital α and right panels are for effective orbital β . The energy broadening factor in our calculation takes $\eta = 0.05$.

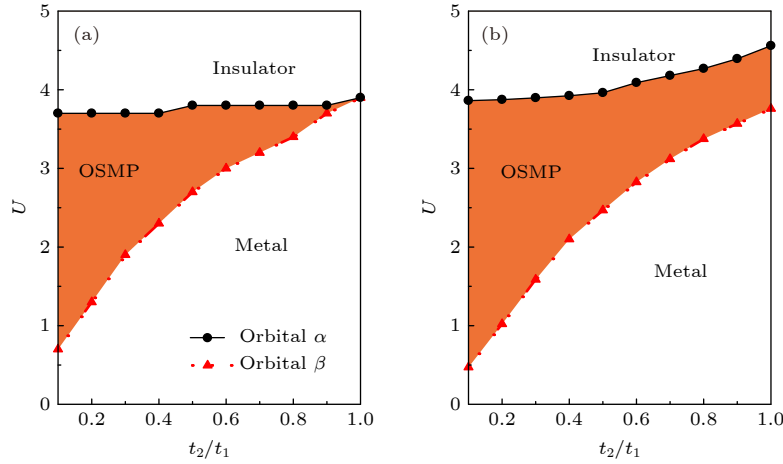


图3 轨道间跃迁系数不同时, 相互作用 U 和带宽比 t_2/t_1 影响下的双轨道体系相图 (a) 轨道间跃迁 $t_{12} = 0$; (b) 轨道间跃迁 $t_{12} = 0.4$. 体系的洪特耦合 $J_H = 0.25U$. 黑色圆圈和红色三角分别代表轨道 α 和 β 的 MIT 相变点

Fig. 3. Phase diagrams in the plane of interaction U and hopping integral t_2/t_1 of the effective two-orbital Hubbard model with different interorbital hopping, when $J_H = 0.25U$: (a) $t_{12} = 0$; (b) $t_{12} = 0.4$. The black circles (red triangles) denote the critical points of MIT for effective orbital $\alpha(\beta)$.

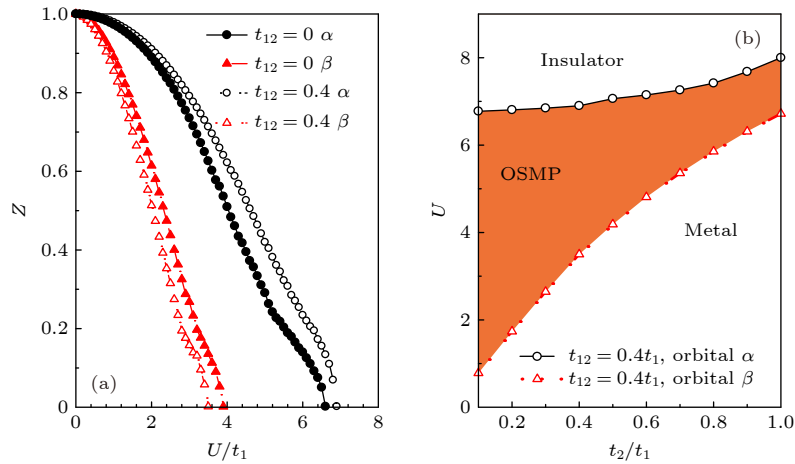


图4 DMFT 结合正方晶格能带结构所得到的结果 (a) 轨道间跃迁系数不同时, 准粒子权重 Z 随相互作用 U 的变化曲线, 体系的洪特耦合 $J_H = 0.25U$, 带宽比 $t_2/t_1 = 0.4$; (b) $t_{12} = 0.4$ 以及 $J_H = 0.25U$ 时, 相互作用 U 和带宽比 t_2/t_1 影响下的有效轨道模型相图

Fig. 4. DMFT results of the square lattice: (a) The interaction dependencies of the quasiparticle weight Z with different interorbital hoppings when $J_H = 0.25U$ and $t_2/t_1 = 0.4$; (b) phase diagrams in the plane of interaction U and hopping integral t_2/t_1 of the effective two-orbital Hubbard model when $t_{12} = 0.4$ and $J_H = 0.25U$.

促进作用越明显. 综上, Bethe 晶格是一种理想的晶格, 其态密度作为一种近似手段来定性研究实际晶格中关联效应驱动相变是可行的, 这也正是 Bethe 晶格被广泛应用于 DMFT 的原因.

5 应用

把结合了正则变换的扩展 DMFT 运用到最近发现的铜氧化物超导材料 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 中^[29], 由于 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 晶格中具有极其扁平的 CuO_6 八面体

结构, 所以可以用双轨道 Hubbard 模型描述其电子结构与性质. 根据 DFT 计算半满情况下 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3.5}$ 所得到的电子能带结构可知, 费米面附近的电子态主要由 Cu 的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道和 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道贡献^[33-35]. 将 DFT 所得的能带结果近似处理, 只考虑最近邻跃迁而忽略较小的次近邻跃迁, 并忽略非局域轨道间跃迁的动量空间各向异性. 之后采用适用于动量空间的各向异性的扩展 DMFT 研究了 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 半满情况下的相图.

选取如下的跃迁模型系数代入 (1) 式: $t_1 = 0.504$ eV, $t_2 = 0.196$ eV, 及 $t_{12} = -0.302$ eV, $d_{x^2-y^2}$ 轨道和 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道的能量分别为 $\mu_1 = -0.222$ eV 和 $\mu_2 = 0.661$ eV^[33]. 第 2 部分中采用正则变换后所得的跃迁积分 t_α 和 t_β 与 t_{12} 的取值正负无关, 因此可以将第 4 部分的结果拓展至 $t_{12} < 0$ 的情况. 结合本文的 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 紧束缚模型, 体系中轨道间跃迁 t_{12} 将促进体系的有效轨道的 OSMP, 同时由于 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 材料中具有晶体场劈裂 $\varepsilon_d = \mu_1 - \mu_2$, 不同轨道化学势的差异会导致有效轨道的格林函数矩阵形式非对角元中出现常数项, 其中常数项的处理采用与之前工作中同样的方法^[28].

图 5(a) 给出了 $J_H = 0.25U$ 时各轨道的准粒子权重随相互作用 U 的变化曲线. 根据准粒子权重的变化曲线可知, 当相互作用 $U < 2.1$ eV 时, 双轨道体系为金属态; 当相互作用强度 $U \geq 2.3$ eV 时, 体系转变为绝缘态; 在这两个态之间存在一个狭窄的 OSMP 区域, 即作用强度 $2.1 \text{ eV} \leq U < 2.3 \text{ eV}$ 时, 宽有效轨道 α 处于金属态而窄有效轨道 β 呈现出绝缘态的特征. 图 5(b)–(d) 进一步展现了 $J_H = 0.25U$ 时相互作用强度 U 对两个有效轨道 α 和 β 电子态密度的影响. 当相互作用强度 U 较弱, 如图 5(b) 所示, $U = 1.0$ eV 时两个轨道在费米能级附近的电子态密度都不为零, 说明体系为金属态; 随着相互作用强度 U 增加到 2.5 eV, 如图 5(d) 所示, 两个轨道的态密度图像中均有 Mott 能隙打开,

此时体系为绝缘态; 而当相互作用强度 $U = 2.2$ eV 时, 如图 5(c) 所示, 宽轨道费米能级附近的态密度仍为有限值的同时窄轨道打开了 Mott 能隙, 说明此时体系处于轨道选择 Mott 相^[44–46].

图 6 给出了在相互作用 U 和洪特耦合 J_H 作用下的相图, 在强电子关联作用导致的 Mott 绝缘相和相互作用强度较弱时体系的金属相之间存在着一定范围的 OSMP 区域, 随着洪特耦合 J_H 的减小以及相互作用 U 的增加 OSMP 区域逐渐缩小, 并在 $J_H = 0.34$ eV 以及 $U = 2.7$ eV 时在相图上消失. 根据之前对电子关联效应的研究, 洪特耦合作用有利于 OSMP 的形成^[12,42,47], 这也解释了相图中当 $J_H > 0.34$ eV 时 OSMP 区域随洪特耦合增加而扩大的原因. 而当洪特耦合 $J_H < 0.34$ eV 时, 晶体场劈裂对体系的影响压制住了库仑相互作用以及洪特耦合的影响, 因此 OSMP 从相图上消失^[12,42,47].

图 7(a) 给出了本文研究的紧束缚模型的能带图像, 并将其与根据 DFT 模拟 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 的双带模型能带图像 (图 7(b)) 进行了对比.

模拟 DFT 计算结果所得的半满情况下 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 的能带结构如下^[33]:

$$H_0(k) = \sum_{k\sigma} \sum_{l'l'} \{ \xi_{ll'}(k) + (\varepsilon_l - \mu) \delta_{ll'} \} d_{l\sigma}^\dagger(k) d_{l'\sigma}(k), \quad (20)$$

其中

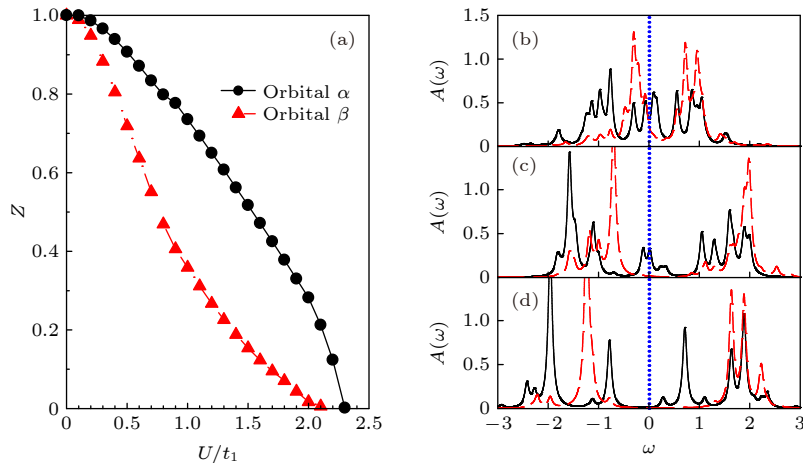


图 5 (a) $J_H = 0.25U$ 时有效轨道的准粒子权重随相互作用强度的变化曲线. 不同相互作用强度 U 下体系各有效轨道的态密度图像 (b) $U = 1.0$ eV; (c) $U = 2.2$ eV; (d) $U = 2.5$ eV. 当相互作用 $2.1 \text{ eV} \leq U < 2.3 \text{ eV}$ 时体系处于 OSMP

Fig. 5. (a) Quasiparticle weight Z as a function of interaction U when $J_H = 0.25U$. The orbital-resolved spectral density $A(\omega)$ with different intraorbital interaction: (b) $U = 1.0$ eV; (c) $U = 2.2$ eV; (d) $U = 2.5$ eV for the two effective orbitals. An OSMP occurs in a narrow interaction region with $2.1 \text{ eV} \leq U < 2.3 \text{ eV}$.

$$\begin{aligned}\xi_{11/22}(k) &= 2t_{11/22}(\cos k_x + \cos k_y) \\ &+ 4t'_{11/22} \cos k_x \cos k_y \\ &+ 2t''_{11/22} [\cos(2k_x) + \cos(2k_y)],\end{aligned}\quad (21)$$

以及

$$\begin{aligned}\xi_{12}(k) &= \xi_{21}(k) \\ &= 2t_{12}(\cos k_x - \cos k_y) \\ &+ 2t''_{12} [\cos(2k_x) - \cos(2k_y)],\end{aligned}\quad (22)$$

式中 $t_{ab}(a, b = 1, 2)$ 表示由轨道 a 跃迁至 b 的跃迁系数, 下标 1 和 2 分别表示 $d_{x^2-y^2}$ 轨道和 $d_{3z^2-r^2}$ 轨道, t , t' 和 t'' 分别表示最近邻跃迁、次近邻跃迁以及第三近邻跃迁系数, 具体的数值见表 1. 由于本文选取的紧束缚模型忽略了非局域轨道间跃迁的动量空间各向异性, 因此其能带结构和根据 DFT 模拟的双带模型能带结构存在明显差异, 各向同性的紧束缚模型中两个能带存在分离的特征, 因此需要采用和材料能带相符合的双带模型开展研究. 本文基于图 7(b) 的能带结构, 研究了电子关联效应对 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 中量子相变的影响, 并在附录中对如何用 DMFT 处理图 7(b) 的能带结构进行了详细的介绍.

考虑非局域轨道间跃迁项的动量空间的各向异性, 将 DFT 模拟所得完整能带结构代入 DMFT 中, 计算半满 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 体系^[36] 的相图. 考虑完

整能带结构的相图如图 8 所示, 相图中的相变点与相图 6 中存在差异, 主要是因为本文选用的紧束缚模型的能带结构与 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 的能带结构差异比较大, 图 8 给出的相图能更加精确地描述半满 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 体系的量子相变. 同时能带结构及相图的对比也说明了利用正则变换处理轨道间跃迁的局限性.

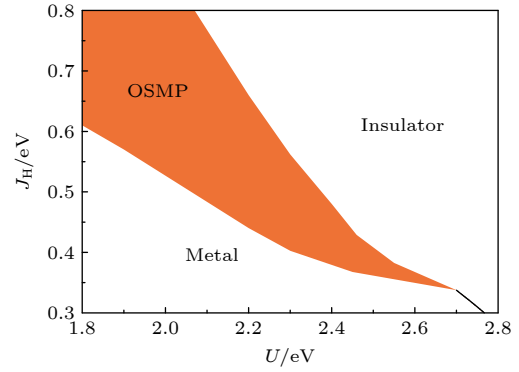


图 6 相互作用 U 和洪特耦合 J_H 影响下体系的相图. 随着相互作用 U 的增加以及洪特耦合 J_H 的减小, OSMP 区域逐渐缩小, 大约在 $J_H = 0.34$ eV 以及 $U = 2.7$ eV 时体系中的 OSMT 消失

Fig. 6. The phase diagram of the effective two-orbital Hubbard model with interaction U and Hund's rule coupling J_H . The region of OSMP becomes narrower with the decreasing J_H and increasing U , and OSMT vanishes around $J_H = 0.34$ eV and $U = 2.7$ eV.

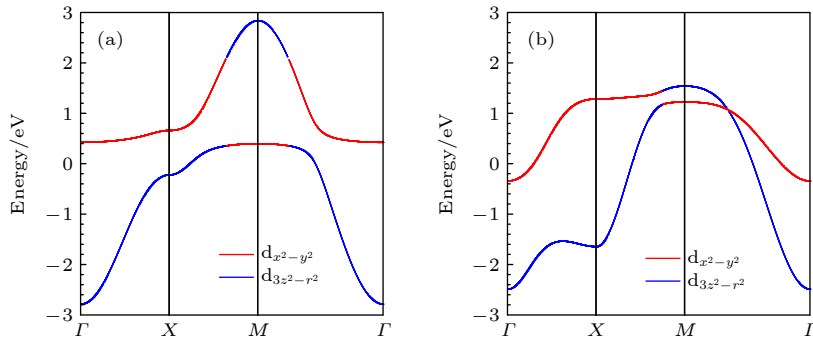


图 7 由不同模型得到的半满 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 体系的能带图 (a) $t_1=0.504$ eV, $t_2=0.196$ eV, $t_{12}=-0.302$ eV, $\mu_1=-0.222$ eV 和 $\mu_2=0.661$ eV 的紧束缚模型所得到的能带图; (b) 根据 DFT 模拟的双带模型能带图像^[33]

Fig. 7. Bandstructure for half-filling $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3.5}$ with different model: (a) Tight binding model with $t_1=0.504$ eV, $t_2=0.196$ eV, $t_{12}=-0.302$ eV, $\mu_1=-0.222$ eV and $\mu_2=0.661$ eV; (b) two-orbital model according to DFT results^[33].

表 1 半满 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 紧束缚哈密顿量中的参数 (单位为 eV)^[33]

Table 1. Model parameters of the TB Hamiltonian of $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ at half-filling (unit: eV)^[33].

	on-site energy (ε)	1 st hopping (t)	2 nd hopping (t')	3 rd hopping (t'')
Orbital $d_{x^2-y^2}$	-0.222	0.504	-0.067	0.130
Orbital $d_{3z^2-r^2}$	0.661	0.196	0.026	0.029
inter-orbital	0	-0.302	0	-0.051

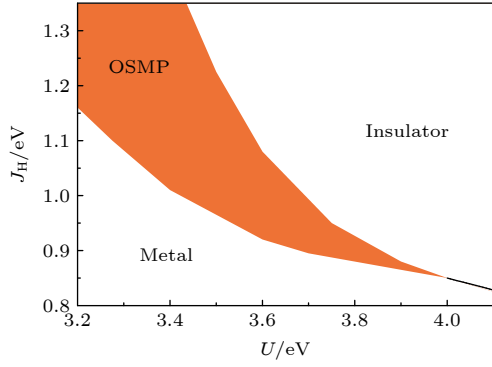


图 8 在 DMFT 中考虑 DFT 得到的 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3.5}$ 完整能带结构得到的相图. 此相图与图 6 中的相图定性一致

Fig. 8. Phase diagram of $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3.5}$ obtained by the DMFT investigation using the DFT calculated band structure. The phase diagram is qualitatively consistent with Fig. 6.

6 结 论

运用以 Lanczos 方法为求解器的 DMFT 对相互作用 U 及非局域轨道间跃迁 t_{12} 在双轨道 Hubbard 模型中轨道选择 Mott 相变的影响进行了研究, 结果表明轨道间跃迁通过调整两有效轨道的带宽比来促进双轨道体系中轨道选择 Mott 相的发生. 对比了动力学平均场中使用不同晶格能带结构得到的相图, 尽管相变点存在差异但其描述的轨道选择 Mott 相变的物理图像具有一致性, 进一步说明了 Bethe 晶格作为近似的理论工具在研究关联效应驱动的量子相变中的泛用性. 最后将拓展的 DMFT 应用于双轨道铜氧化物超导材料 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$, 并采用动量空间各向异性的非局域轨道间跃迁的双带模型绘制了体系的相图, 发现半满的 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 为轨道选择 Mott 材料.

感谢中国科学院固体物理研究所邹良剑教授在本工作中的讨论.

附录 考虑完整能带结构的动力学平均场理论

在 DMFT 中考虑 (20) 式的紧束缚哈密顿量, 则映射之后的杂质模型为

$$H_{\text{imp}} = \sum_{m\sigma} \varepsilon_{m\sigma} c_{m\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \sum_{l\sigma} (\varepsilon_l - \mu) d_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma} + \sum_{ll'm\sigma} V_{ll'm\sigma} (d_{l\sigma}^\dagger c_{ml'\sigma} + c_{ml'\sigma}^\dagger d_{l\sigma}) + H_l^{\text{imp}}, \quad (\text{A1})$$

其中 l ($l = 1, 2$) 为轨道指标, 与 (8) 式不同的地方在于杂质

格点与外场格点的耦合系数 $V_{ll'm\sigma}$ 含不同轨道间耦合的部分, $V_{ll'm\sigma}$ 表示外场格点 m 的 l 轨道与杂质格点 l' 轨道间的耦合. (A1) 式对应的格林函数具有 2×2 的矩阵形式:

$$\mathbf{G}_{\text{imp}}(i\omega_n) = \begin{pmatrix} G_{11}(i\omega_n) & G_{12}(i\omega_n) \\ G_{21}(i\omega_n) & G_{22}(i\omega_n) \end{pmatrix}. \quad (\text{A2})$$

通过 Lanczos 精确对角化方法可以直接求得这个矩阵的对角元部分 G_{ll} [37–40], 求解方式与 (10) 式一致. 非对角元 $G_{l,l'}$ 可由对角元的线性组合求出:

$$G_{12}(i\omega_n) = G_{21}(i\omega_n) = \frac{1}{2} \left[G_{1+2,1+2}(i\omega_n) - \sum_l G_{ll}(i\omega_n) \right], \quad (\text{A3})$$

其中 $G_{1+2,1+2}$ 为两轨道结合的格林函数, 在 Lanczos 算法中将构建三对角矩阵的初始矢量分别替换为 $(d_1^\dagger + d_2^\dagger)|\Psi_0\rangle$ 和 $(d_1 + d_2)|\Psi_0\rangle$ 即可得到.

杂质模型的 Weiss 场格林函数 $G_0^{\text{imp}}(i\omega_n)$ 也为 2×2 的矩阵, 可以通过杂质模型无相互作用部分的系数直接求出,

$$G_0^{\text{imp}}(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n), \quad (\text{A4})$$

其中杂化函数 $\Delta(i\omega_n)$ 也为 2×2 的矩阵:

$$\Delta(i\omega_n) = \begin{pmatrix} \Delta_{11}(i\omega_n) & \Delta_{12}(i\omega_n) \\ \Delta_{21}(i\omega_n) & \Delta_{22}(i\omega_n) \end{pmatrix}, \quad (\text{A5})$$

$\Delta_{l_1 l_2}(i\omega_n)$ 的表达形式为

$$\Delta_{l_1 l_2}(i\omega_n) \equiv \sum_{ml} \frac{V_{l_1 l m} V_{l_2 l m}}{i\omega - \varepsilon_{ml}}. \quad (\text{A6})$$

将 Lanczos 方法得到的 $\mathbf{G}_{\text{imp}}(i\omega_n)$ 与 Weiss 场格林函数 $G_0^{\text{imp}}(i\omega_n)$ 相结合, 并利用 Dyson 方程即可求出杂质模型自能的矩阵形式:

$$\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) = G_0^{\text{imp}}(i\omega_n)^{-1} - \mathbf{G}_{\text{imp}}(i\omega_n)^{-1}. \quad (\text{A7})$$

DMFT 中杂质模型自能与格点模型的局域自能相等, 由此可计算格点格林函数 $\mathbf{G}_{\text{lat}}(i\omega_n)$

$$\mathbf{G}_{\text{lat}}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_k \mathbf{G}(i\omega_n, k) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{i\omega_n - \mathbf{H}_0(k) - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)}, \quad (\text{A8})$$

其中 \mathbf{H}_0 表示体系能带结构, 对半满情况下的 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$, 代入 (20) 式中的能带表达式即可计算. 最后通过调节自洽参数 ε_{ml} 和 $V_{ll'm}$ 使得自洽条件 $\mathbf{G}_{\text{imp}}(i\omega_n) = \mathbf{G}_{\text{lat}}(i\omega_n)$ 成立后, 即可根据格林函数来了解 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ 体系的电子性质.

参考文献

- [1] Anisimov V I, Nekrasov I A, Kondakov D E, Rice T M, Sigrist M 2002 *Eur. Phys. J. B* **25** 191
- [2] Zhong Z, Hansmann P 2017 *Phys. Rev. X* **7** 011023
- [3] Huang J, Yu R, Xu Z, Zhu J X, Jiang Q, Wang M, Wu H,

- Chen T, Denlinger J D, Mo S K, Hashimoto M, Gu G, Dai P, Chu J H, Lu D, Si Q, Birgeneau R J, Yi M 2021 arXiv: 2010.13913
- [4] Oleś A M 1983 *Phys. Rev. B* **28** 327
- [5] Koga A, Imai Y, Kawakami N 2002 *Phys. Rev. B* **66** 165107
- [6] Koga A, Kawakami N, Rice T M, Sigrist M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045128
- [7] Kubo K 2007 *Phys. Rev. B* **75** 224509
- [8] Georges A, Kotliar G, Krauth W, Rozenberg M J 1996 *Rev. Mod. Phys.* **68** 13
- [9] Held K, Keller G, Eyert V, Vollhardt D, Anisimov V I 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5345
- [10] Kotliar G, Savrasov S Y, Haule K, Oudovenko V S, Parcollet O, Marianetti C A 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 865
- [11] Zhao J Z, Zhuang J N, Deng X Y, Bi Y, Cai L C, Fang Z, Dai X 2012 *Chin. Phys. B* **21** 057106
- [12] Liebsch A 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 116402
- [13] Peters R, Kawakami N, Pruschke T 2011 *Phys. Rev. B* **83** 125110
- [14] Hirsch J E 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51** 1900
- [15] Hirsch J E 1985 *Phys. Rev. B* **31** 4403
- [16] Chang C C, Zhang S 2008 *Phys. Rev. B* **78** 165101
- [17] Tocchio L F, Becca F, Sorella S 2016 *Phys. Rev. B* **94** 195126
- [18] Hanke W, Hirsch J E, 1982 *Phys. Rev. B* **25** 6748
- [19] Shankar R 1994 *Rev. Mod. Phys.* **66** 129
- [20] Hille C, Kugler F B, Eckhardt C J, He Y Y, Kauch A, Honerkamp C, Toschi A, Andergassen S 2020 *Phys. Rev. Research* **2** 033372
- [21] Kotliar G, Ruckenstein A E 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 1362
- [22] Lechermann F, A Georges, Kotliar G, Parcollet O 2007 *Phys. Rev. B* **76** 155102
- [23] Yu R, Si Q 2012 *Phys. Rev. B* **86** 085104
- [24] Imada M, Fujimori A, Tokura Y 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 1039
- [25] Lee P A, Nagaosa N, Wen X G 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 17
- [26] Rohringer G, Hafermann H, Toschi A, Katanin A A, Antipov A E, Katsnelson M I, Lichtenstein A I, Rubtsov A N, Held K 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 025003
- [27] Song Y, Zou L J 2005 *Phys. Rev. B* **72** 085114
- [28] Song Y, Zou L J 2009 *Eur. Phys. J. B* **72** 59
- [29] Li W M, Zhao J F, Cao L P, Hu Z, Huang Q Z, Wang X C, Y. Liu, Zhao G Q, Zhang J, Liu Q Q, Yu R Z, Long Y W, Wu H, Lin H J, Chen C T, Li Z, Gong Z Z, Guguchia Z, Kim J S, Stewart G R, Uemura Y J, Uchida S, Jin C Q 2019 *PNAS* **116** 12156
- [30] Liu K, Lu Z, Xiang T 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 044802
- [31] Li Y, Du S, Weng Z, Liu Z 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 044801
- [32] Wang Z, Zhou S, Chen W, Zhang F 2020 *Phys. Rev. B* **101** 180509
- [33] Maier T, Berlijn T, Scalapino D J 2019 *Phys. Rev. B* **99** 224515
- [34] Jiang K, Le C, Li Y, Qin S, Wang Z, Zhang F, Hu J 2021 *Phys. Rev. B* **103** 045108
- [35] Jin H, Pickett W E, Lee K 2021 *Phys. Rev. B* **104** 054516
- [36] Ni Y, Quan Y M, Liu J, Song Y, Zou L J 2021 *Phys. Rev. B* **103** 214510
- [37] Niu Y, Sun J, Ni Y, Liu J, Song Y, Feng S 2019 *Phys. Rev. B* **100** 075158
- [38] Dagotto E 1994 *Rev. Mod. Phys.* **66** 763
- [39] Caffarel M, Krauth W 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1545
- [40] Capone M, de' Medici L, Georges A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 245116
- [41] Perroni C A, Ishida H, Liebsch A 2007 *Phys. Rev. B* **75** 045125
- [42] Georges A, de' Medici L, Mravlje J 2013 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **4** 137
- [43] Koga A, Kawakami N, Rice T M, Sigrist M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 216402
- [44] Costi T A, Liebsch A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 236404
- [45] de' Medici L, Mravlje J, Georges A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 256401
- [46] Sun J, Liu Y, Song Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 247101 (in Chinese) [孙健, 刘洋, 宋筠 2015 物理学报 **64** 247101]
- [47] de' Medici L 2011 *Phys. Rev. B* **83** 205112

Dynamical mean-field theory of two-orbital Hubbard model*

Ni Yu¹⁾ Sun Jian²⁾ Quan Ya-Min³⁾ Luo Dong-Qi¹⁾ Song Yun^{1)†}

1) (*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)

2) (*School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China*)

3) (*Key Laboratory of Materials Physics, Institute of Solid State Physics,
Hefei Institute of Physics Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China*)

(Received 17 February 2022; revised manuscript received 24 March 2022)

Abstract

The effect of interorbital hopping on orbital selective Mottness in a two-band correlation system is investigated by using the dynamical mean-field theory with the Lanczos method as impurity solver. The phase diagrams of the two-orbital Hubbard model with non-local interorbital hopping (t_{12}), where the orbital selective Mott phases (OSMP) region is expanded by the increasing of the interorbital hopping. We compare the results obtained by self-consistent relations of Bethe lattice and square lattice based on DMFT procedure, and the general OSMP physics of Bethe lattice is consistent with that of the square lattice while the critical points of two kinds of lattices are different. We extend the method to the study of half-filled $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ materials. By comparing with the band structure obtained from the density functional theory (DFT), it is found that the isotropic inter-orbital hopping has a great influence on the bandstructure. The DFT bandstructure in DMFT is considered, and the phase diagram of the material is obtained. The half-filled $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ should be orbital-selective Mott compound according to our results.

Keywords: dynamical mean-field theory, Mott transition, two-orbital Hubbard model

PACS: 71.27.+a, 71.30.+h, 74.72.-h

DOI: 10.7498/aps.71.20220286

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11474023, 11774350).

† Corresponding author. E-mail: yunsong@bnu.edu.cn