
Hubbard model

Hubbard model 发展史

- 1953 Pariser-Parr-Pople 延展 π -电子系统
- 1963 Hubbard 理解窄能带电子关联
- 1963 Kanamori 描述巡游铁磁
- 1963 Gutzwiller 金属绝缘体相变

Hubbard model 简介

- Hubbard model 是一个用来描述导体和绝缘体系统的转变近似模型。
- Hubbard model是晶格上最简单的相互作用粒子系统，哈密顿量中只有两项：动能项（单粒子）以及势能项（两粒子相互作用）
- $$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.C. + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$
- 三个参数：t-U比例，晶格电子密度，晶格
- 粒子可以是费米子也可以是波色子。Hubbard model是一个足够低温下周期势中粒子的一个好的近似，所有的粒子假设在最低布洛赫能带中，粒子之间的长程相互作用可以忽略。如果包含了不同格点的粒子之间的相互作用，这个模型称之为extended Hubbard model。
- 该模型最初提出来描述固体中的电子，后来成为高温超导的焦点模型。对于固体中的电子，Hubbard model可以视为紧束缚模型的改进，紧束缚模型只包含了hopping 项。对于强相互作用，Hubbard model可以给出不同于紧束缚的定性行为。正确预言了Mott 绝缘体的存在。Hubbard model展现出的有趣现象：任意种类的磁有序，金属绝缘体相变，（高温）超导，Tomonaga-Luttinger 液体，Pomeranchuk 不稳定性。

窄能带理论

- Hubbard model是基于固体物理中的紧束缚近似，TBA描述了周期势中的粒子的运动。能带的宽度由跃迁积分决定。
 - 在紧束缚模型的基础上，Hubbard model引入了晶格上同一格点的相反自旋粒子的接触相互作用。当Hubbard model用来描述电子系统，这些相互作用是排斥的，源于屏蔽库伦相互作用。
 - Hubbard model的物理由hopping 积分强度和相互作用项的强度竞争决定。Hopping 积分描述了系统的动能。Hubbard model因此能够解释某些相互作用系统中金属绝缘体相变。
-

1D Hubbard model

- 紧束缚模型下能带论认为是导体
- Hubbard model认为随着氢原子之间距离的改变，在某一点变成绝缘体。
- 一维Hubbard model 由lieb 和wu通过Bethe ansatz 求解。

Hubbard model中的对称性：规范对称性

- 规范变换：在 $c_{X\sigma}^\dagger \rightarrow \exp(i\alpha)c_{X\sigma}^\dagger$, $c_{X\sigma} \rightarrow \exp(-i\alpha)c_{X\sigma}$ 变换下，哈密顿量不变。

粒子数 $N_e = \sum_{X\sigma} c_{X\sigma}^\dagger c_{X\sigma}$ 守恒

- 晶格对称性

Hubbard model中的对称性：自旋对称性

- 利用泡利矩阵： $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ 定义

局域自旋算符： $S_{\alpha,x} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c_{x\sigma}^\dagger (\sigma_\alpha)_{\sigma,\sigma'} c_{x\sigma'}$, $\alpha = x, y, z$ $S_x = (S_{x,x}, S_{y,x}, S_{z,x})$

全局自旋算符： $S_\alpha = \sum_x S_{\alpha,x}$ $S = (S_x, S_y, S_z)$ $[S_x, S_y] = iS_z$

- $S_\pm = S_x \pm iS_y$ $S_+ = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}} c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\downarrow}$ $S_- = S_+^\dagger$ 这些算符构成SU (2) 代数，H与这些算符对易，满足SU (2) 对称性
- H, S^2, S_z 可以同时对角化

Hubbard model中的对称性：粒子空穴变换

- 粒子空穴变换： $c_{x\sigma}^\dagger \rightarrow c_{x\sigma}$ $c_{x\sigma} \rightarrow c_{x\sigma}^\dagger$
- 哈密顿量变成
- $$H \rightarrow H' = \sum_{x,y \in V, \sigma} t_{xy} c_{x\sigma} c_{y\sigma}^\dagger + U \sum_X c_{X\uparrow} c_{X\downarrow} c_{X\downarrow}^\dagger c_{X\uparrow}^\dagger = - \sum_{x,y,\sigma} t_{xy} c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} + U \sum_x c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\downarrow}^\dagger c_{x\downarrow} c_{x\uparrow} + U(|V| - N_e)$$
- 对于双子格系统引入如下变换
- $c_{x\sigma}^\dagger \rightarrow c_{x\sigma}^\dagger$ if $x \in A$, $c_{x\sigma}^\dagger \rightarrow -c_{x\sigma}^\dagger$ if $x \in B$ 这个变换改变了动能的符号，在半满填充施加此变换和粒子空穴变换，哈密顿量不变。所以对于双子格系统有粒子空穴对称性。
- 对于半满填充的双子格，可以利用粒子空穴对称性得到第二个SU (2) 对称性。生成元为
- $$\hat{S}_z = \frac{1}{2}(N_e - |V|) \quad \hat{S}_+ = \sum_{x \in A} c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\downarrow}^\dagger - \sum_{x \in B} c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\downarrow}^\dagger \quad \hat{S}_- = \hat{S}_+^\dagger$$
- 因此模型在半满填充有着 $SU(2) \times SU(2) = SO(4)$ 对称性。在有关高温超导的讨论中，甚至提出了 $SO(5)$ 对称性。

严格结果： Lieb's定理

- Theorem (Lieb 1989) H 为Hubbard model 哈密顿量, 参数 t 为实数, $T = (t_{xy})$ 图像(graph)为联系 (connected)起来的, $U_x < 0$ 。粒子数 N_e 为偶数。基态是非简并的并且总自旋为 $S = 0$ 。
- Corollary: H 为Hubbard model 哈密顿量, 参数 t 为实数, $T = (t_{xy})$ 图像(graph)为联系 (connected)起来的, 并且是双子格的, $U_x = U > 0$ 。粒子数 $N_e = |V|$ 。那么基态在子空间 $S_z = 0$ 是非简并的。
总自旋为 $S = \frac{1}{2} ||A| - |B||$

严格结果：Mermin-Wagner 定理

- 对于一维或者二维空间维度带有连续对称性的晶格模型，在有限温度没有长程序。
- Theorem (Koma, Tasaki 1992) 对于一维和二维Hubbard model带有有限跃迁，热力学极限下关联函数有如下限制

$$|\langle c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\downarrow}^\dagger c_{y\downarrow} c_{y\uparrow} \rangle| \leq \begin{cases} |x-y|^{-\alpha f(\beta)} & \text{for } d=2 \\ \exp(-\gamma f(\beta)|x-y|) & \text{for } d=1 \end{cases}$$

这个结果排除了一维或者二维有限温度情况下的长程自旋序或者超导电性

$$|\langle \mathbf{S}_x \cdot \mathbf{S}_y \rangle| \leq \begin{cases} |x-y|^{-\alpha f(\beta)} & \text{for } d=2 \\ \exp(-\gamma f(\beta)|x-y|) & \text{for } d=1 \end{cases}$$

严格结果：Nagaoka's 定理

- Theorem (Tasaki 1989) Hubbard model 带有非负的 t_{xy} , $N_e = |V| - 1$, 以及一个硬核的排斥 $U_x = \infty$ 对于所有 $x \in V$ 有一个总自旋 $S = \frac{1}{2}N_e$ 的基态。基态是非简并的, 除了通常的 $(2S+1)$ 重自旋简并度。
 - 该定理告诉我们在半满填充邻近区域有一个非简并的铁磁基态, 会出现一个反铁磁自旋序。
-

严格结果：平带系统

- 平带会导致延展磁化 $S = \frac{1}{2} ||A| - |B|| = \frac{1}{2} |B|$, 这种磁化和两个子格的存在有关系, 系统是铁磁的
 - 一类产生平带的晶格: line graph; 另一类: decorated lattices
 - kagome lattice (作为六角格子的line graph) 是严格结果得以实现的例子
-

严格结果：均匀密度定理

- Theorem (MacLachlan 1959, 1961; Lieb, Loss, McCann 1983) 对于双子格半填充的Hubbard model, 正则系综 $N_e = |V|$, $T > 0$; $T = 0$ 基态; 巨正则系综 $\mu = 0$, 密度矩阵 $\rho_{\sigma,xy} = \langle c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} \rangle$ 有如下性质
- $\rho_{\sigma,xy} = \frac{1}{2}\delta_{xy}$ if $x, y \in A$ or $x, y \in B$
- 均匀密度定理在双子格晶格半填充是正确的。

数值方法

- Hubbard model 还没有在任何维度求得解析解。这引出了对这些强关联电子系统的很多的数值方法研究。一个主要的研究目标是决定低温相图，尤其是二维情况。
- Lanczos algorithm 可以产生静态和动态系统性质
- 有限温度auxiliary-field Monte Carlo , 费米子符号问题
- DMFT动力学平均场： Hubbard哈密顿量 映射成 单点杂质模型
- ○ ○ ○ ○

参考资料

- 维基百科
- The Hubbard Model and its properties

Mott Transition

Mott Transition/Insulator

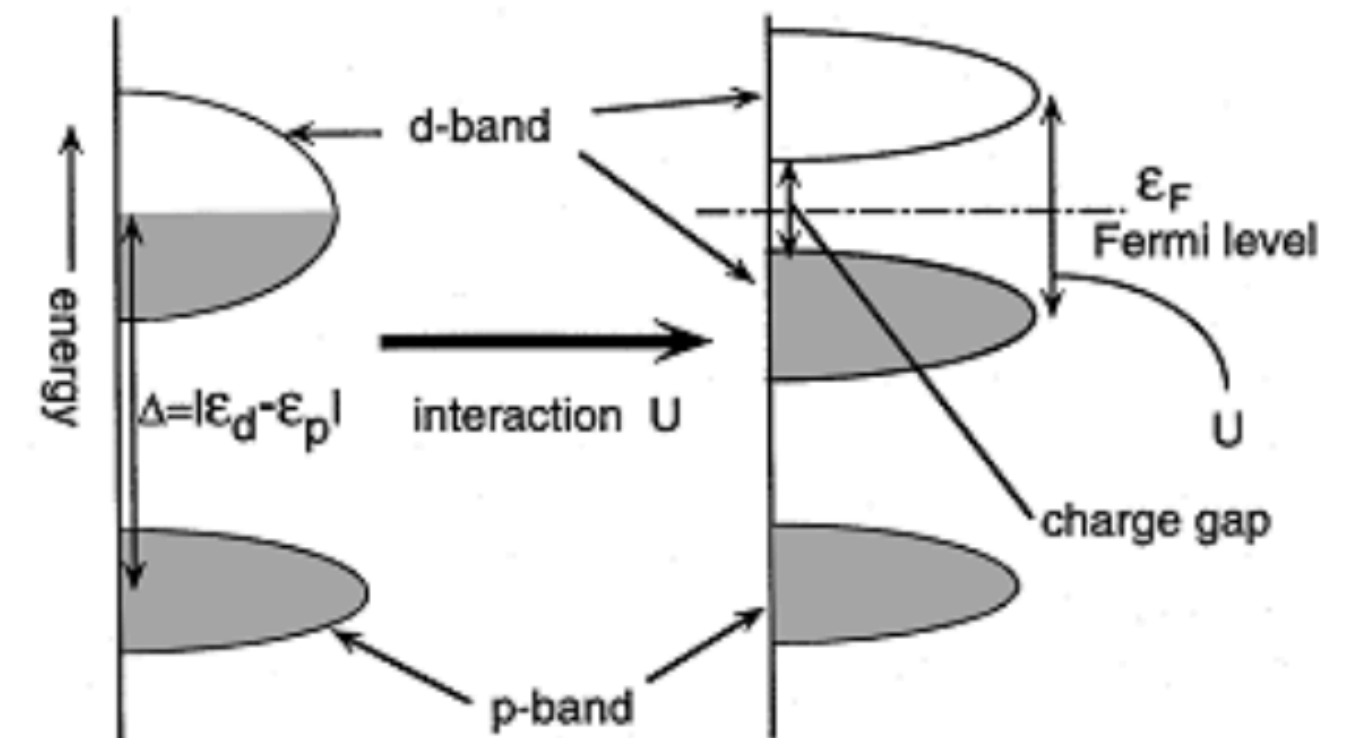
- Mott transition 就是金属-非金属相变
- Mott 绝缘体是在传统能带理论下应该能够导电的一类材料，但是实际上是绝缘体（尤其是低温）。这是由于电子-电子相互作用，这在传统能带理论中并没有考虑。

很多过渡金属氧化物在能带论预测下是导体，但是实际上是绝缘体。

- Mott 绝缘体是一种典型的强关联系统。特别在高温超导发现后，Mott 绝缘体成为大多数高温超导研究中的起点。
 - 金属-绝缘体相变最成功的模型是Hubbard model，尽管在高维情况不可解，仍然能够产生很多金属-绝缘体相变的预测。
-

金属和绝缘体的理论发展

- 固体中电子行为的第一个量子版本理论是Sommerfeld 理论，将电子视为自由粒子，并且不包含底层离子场以及电子电子相互作用。
- 能带理论是Sommerfeld 理论的下一步发展，考虑了离子场。能带理论的一个重要成功之处在于解释了金属和绝缘体。绝缘体相应于满填充的能带，而金属只是部分填充。
- 金属绝缘体相变的Hubbard model
- $H_H = H_t + H_u - \mu N$
- $H_t = -t \sum (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.)$ $H_u = U \sum (n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2})$ $N = \sum n_{i\sigma}$, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$
- 在这个模型中，Mott绝缘体相出现在半填充 $\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{2}$

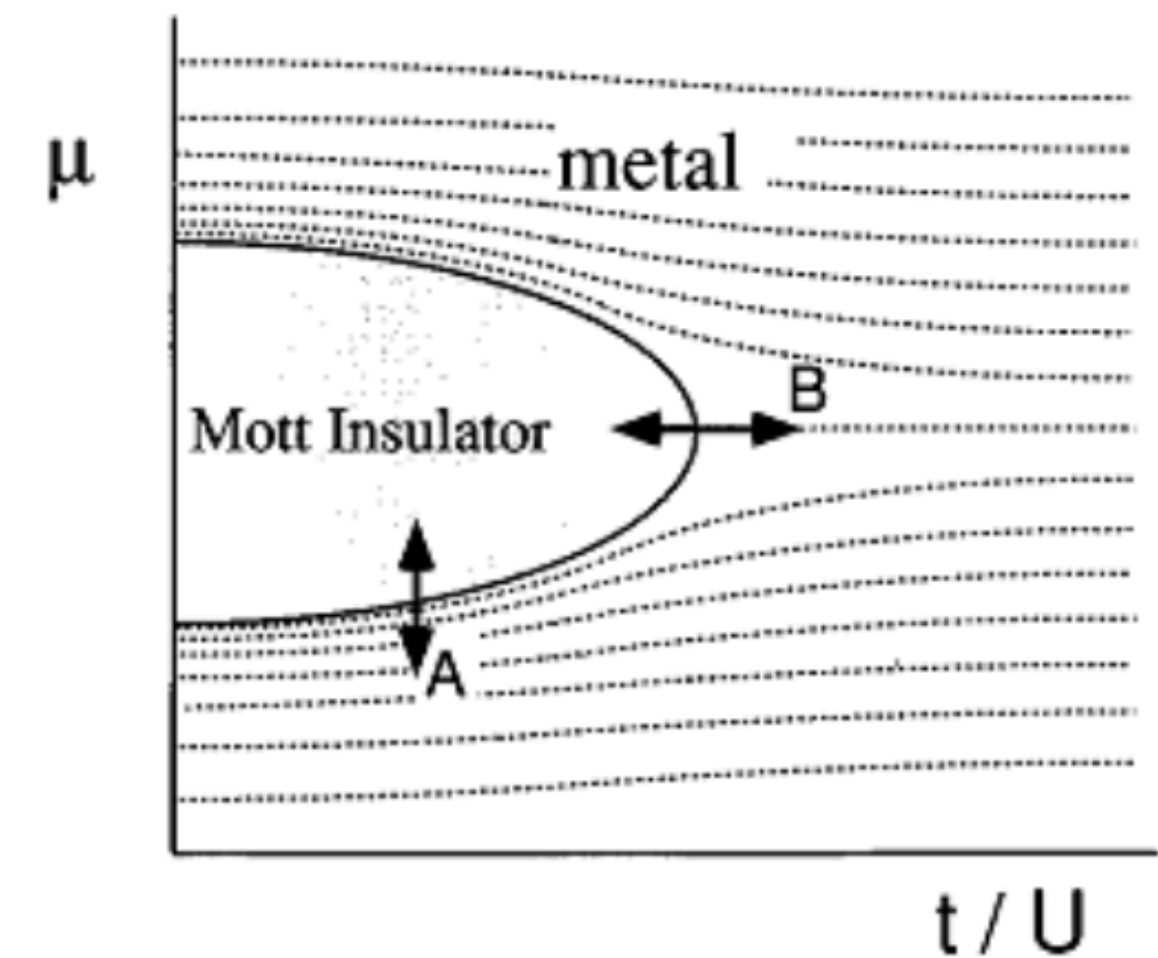


t-J model

- 如果相互作用非常大 $U \gg t$ 可以将模型用 t/U 作为小参数展开。 t/U 的二阶微扰论就是 t-J 模型。
- $$H_{t-J} = - \sum P_d (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) P_d + J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

两类金属绝缘体相变

- Hubbard model的金属绝缘体相变有两种类型：填充控制相变（FC-MIT）以及带宽控制相变（BC-MIT）。
- FC-MIT是改变电子浓度或者化学势 μ/U 。BC-MIT是改变电子跃迁能量或者带宽 t/U 。

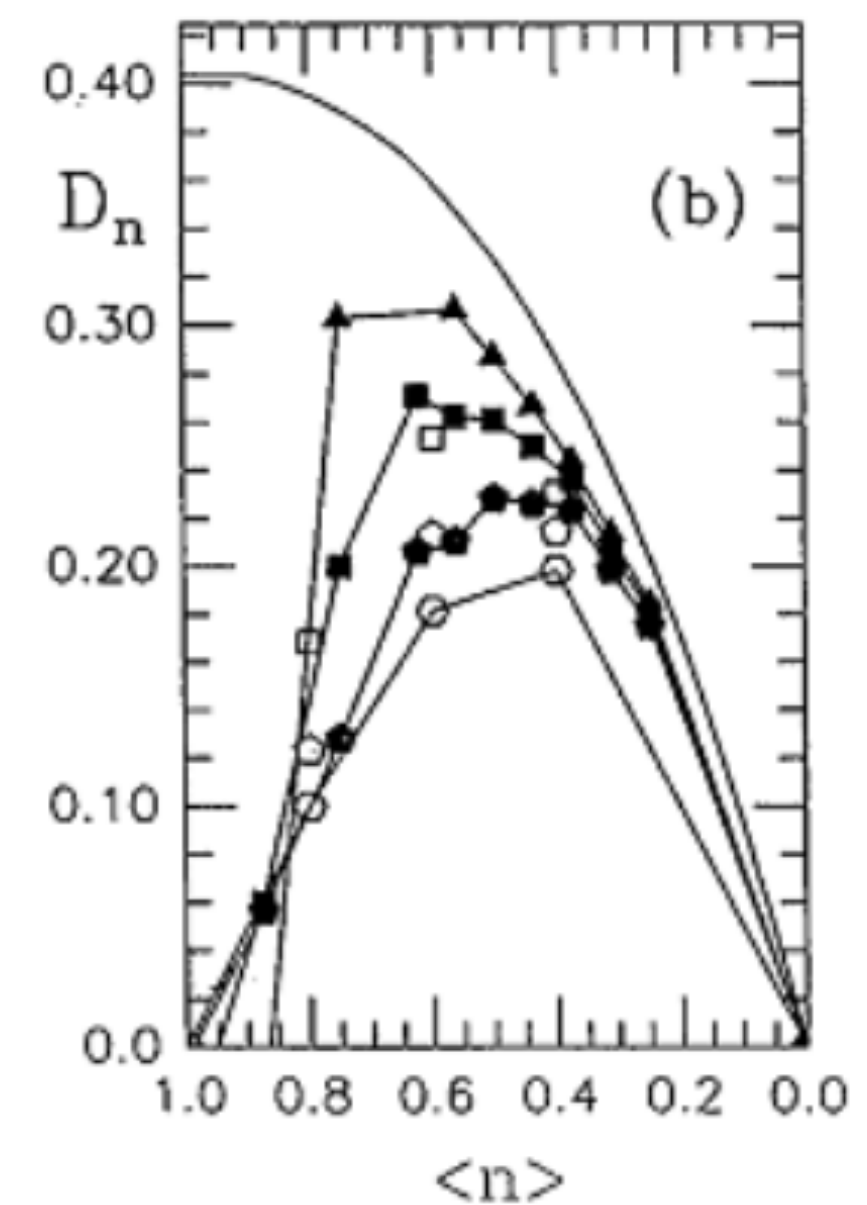


金属绝缘体相变的标度行为

- $\xi \sim |\Delta|^{-\nu}$
- $\Omega \sim \xi^{-z} \sim |\Delta|^{z\nu}$
- 这里 Δ 是控制参数，测量到临界点的距离，FC-MIT中是 μ ，BC-MIT中是 t 。
- z 称为动力学指数。这里除了关联长度之外存在 Ω 是因为我们是在处理量子相变，因此时间维度不像空间维度的行为。在通常的相变中我们只有空间维度，仅仅引入关联长度就足够了，因为我们处在热力学平衡因此没有时间尺度。
- 在 $Hyperscaling$ 假设之下，自由能密度 f_s 有如下形式
$$f_s(\Delta) \sim \Delta^{\nu(d+z)}$$
- 有限长度为 L ，温度为 β 情形下，存在一个有限尺寸标度函数： $f_s(\Delta) \sim \Delta^{\nu(d+z)} F(\xi/L, \Omega/\beta^{-1})$

两个相关量：Drude 权重

- Hubbard model下讨论金属绝缘体相变有两个最相关的量：Drude 权重和电荷压缩
- Drude 权重表征金属绝缘体相变最明显的量是电导率，因为金属导电而绝缘体不导电。Drude权重是频率依赖的电导率 $\sigma(\omega)$ 的奇异部分
- $\sigma(\omega) = D\delta(\omega) + \sigma_{reg}(\omega)$
- 数值计算表明Hubbard model下Drude 权重在半满填充消失
- 这代表转变成Mott绝缘体。



两个相关量：电荷敏感性 (charge susceptibility)

- 与Drude权重消失不同，在半填充时电荷激发能隙打开。电荷敏感性定义为 $\chi_c = n^2 \kappa = \frac{\partial n}{\partial \mu}$
- 这里 κ 是电荷压缩率
- 当我们接近临界点，Drude权重和电荷压缩率的标度行为是
- $D \sim \Delta^\zeta$ $\kappa \sim \Delta^{-\alpha}$ $\zeta = \nu(d+z-2)$ $\alpha = \nu(z-d)$
- 然而标度律对于FC-MIT和BC-MIT并不总是相同的
- 定义掺杂浓度 $\delta = -\frac{\partial f_s}{\partial \mu} = -\frac{\partial f_s}{\partial \Delta}$
- 标度律为 $\delta \sim \Delta^{\nu(d+z)-1}$

两个普适类

- 对于FC-MIT我们有如下标度律

$$\xi \sim \delta^{-1/d}$$

$$\Delta \sim \delta^{z/d}$$

$$\kappa \sim \delta^{1-z/d}$$

$$D \sim \delta^{1+(z-2)/d}$$

- 对于BC-MIT (1D Hubbard Model) 我们有不同的标度律

$$D \sim \delta$$

$$\chi_c \sim \delta^{-1}$$