

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

二維哈伯模型之自洽場研究

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2112-M-034-002-

執行期間：91年08月01日至92年07月31日

執行單位：中國文化大學物理學系

計畫主持人：蔣幼齡

計畫參與人員：郭淑貞

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 10 月 30 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫

成果報告
期中進度報告

二維哈伯模型之自洽場研究

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC 91 - 2112 - M - 034 - 002 -

執行期間： 91年 8月 1日至 92年 7月 31日

計畫主持人：蔣幼齡

共同主持人：

計畫參與人員：郭淑貞

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告 完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

赴國外出差或研習心得報告一份

赴大陸地區出差或研習心得報告一份

出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份

國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、
列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

執行單位：中國文化大學物理系

中 華 民 國 92 年 10 月 30 日

二維哈伯模型之自洽場研究

Study on the self-consistent field of two-dimensional Hubbard model

計畫編號：NSC 91-2112-M-034-002

執行期限：91 年 8 月 1 日至 92 年 7 月 31 日

主持人：蔣幼齡 中國文化大學物理系

計畫參與人員：郭淑貞 中國文化大學物理系

摘要

以我們提出的哈伯模型之廣義自洽場(GSCF)近似理論,以數值方法計算零溫度下二維無限方格子在任意電子濃度、任意的關連強度(吸引或排斥)在外加磁場下主要的物理量—系統總能、化學勢、雙佔有結點濃度及序參數等。本計劃之二維廣義自洽場研究,將對在哈伯模型中從弱耦合到強耦合的跨越問題以及費米液體理論中的自旋電荷分離問題的深入理解有很大幫助。一般相信,廣義自洽場方法將可提供一個很好的機會以了解高溫超導之機制與材料中區域電子對之波色凝聚情況。

關鍵詞：二維哈伯模型；廣義自洽場；零溫度；磁場

Abstract

We propose a generalized self-consistent field (GSCF) approach of Hubbard model in the presence of magnetic field by introducing the inhomogeneous correlation parameters. In two-dimensional case, we will solve numerically the GSCF approach results for the main physical quantities in the presence of magnetic field and at zero temperature for a wide range of magnitude of all electron concentration and on-site interaction strength. The continuum model of electrons interacting via attractive potential displays a crossover from the strong coupling extreme of tightly bound weakly interacting local Bose pairs (composite bosons) to the weak coupling limit of relatively large overlapping Cooper pairs. We believe that the results will provide an opportunity for investigation of the interplay and the crossover between the itinerant superconductivity and Bose condensation of local pairs in novel high temperature superconductors.

Keywords: two-dimensional Hubbard model ; self-consistent field ; zero temperature ; magnetic field

一、 前言

在凝態物理裡，哈伯模型(Hubbard model)用最簡潔的理論框架描述晶格中關連的電子。它僅包含兩個部分：電子在晶格中跳躍的動能項 (t -hopping term) 和自旋相反電子在同一格點中的相互作用項 (吸引性的 $U < 0$ 或排斥性的 $U > 0$)。電子關連長度和配對的特性可以藉改變相互作用參數 U (大小和符號)，磁場 h 和電子濃度 n 來調節。使哈伯模型可以用來說明涵蓋從金屬性到絕緣體、從磁性到超導性的各種特性。目前哈伯模型在多體物理領域中佔有很重要的地位，幾乎所有的凝態理論已知的方法都可用到它的分析，它不只為強關連多體系統提供了一個一般的內在的數學的結構範例，而且描述了許多新奇電子材料的實驗行為。

從 1996 年開始研究 Hubbard 模型以來，我們用精確的 Bethe-ansatz 方程式和提出一個廣義自洽場 (generalized self-consistent field) 方法，陸續完成了一維吸引力及排斥性哈伯模型 (電子濃度 $0 \leq n \leq 1$, 交互作用強度 $-\infty < U < \infty$) 在外加磁場作用下的各主要基態物理量之數值計算並加以比較。探討了因外磁場之作用，系統在三個不同相 ($s=0$, $s \neq 0$, $s=n/2$) 的性質、吸引力哈伯模型中似 BCS 區域與 BC (Bose condensation) 區域的過渡情形。在一維的情形下並利用微擾理論修正廣義自洽場方法之結果，得到與精確結果更符合之物理特性。在有限溫度 ($T > 0$) 的情形也已完成一維吸引力哈伯模型的計算。以上的成果皆已發表在 SCI 的期刊 [1]-[14] 及一份博士論文 [15] 和兩份碩士論文 [16, 17] 中。

二、 研究目的和文獻探討

因為哈伯模型只有在一維有精確解 [18]，在我們過去的研究工作中已將精確解中主要之基態物理量準確的數值結果作了有系統的研究。有限溫度下我們研究一維近似理論，亦得到很完整的各種物理量與磁場和溫度之關係。近年來很多的超導或有趣的磁性材料皆為準二維的層狀結構材料。哈伯模型是固態物理中很基本的一個模型，一般相信 [19, 20] 哈伯模型在低維系統對電子關連的局部相互作用與配對之描述可用來研究金屬的鐵磁性、金屬-絕緣體轉變 (Mott 轉變) 和高溫超導等。為了考慮實際的情形 (被認為是高溫超導材料最重要的銅氧面之電子結構)，研究二維哈伯模型實是一重要課題，因為除一維有精確解外，二維以上哈伯模型僅在某些極限情況下有精確解。所以哈伯模型近似的理論中不同平均場近似 [21]-[25] 經常被用來在質或量上討論許多不同的物理現象，例如磁力和超導性。

三、 研究方法

哈伯模型由 Hamiltonian

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}$$

定義。在外磁場 h 作用下及加入化學勢 μ 以固定電子濃度 n ，我們提出一個廣義自洽場近似，對於吸引力 ($U < 0$) 哈伯模型假設

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} &\approx \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ \rangle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ - \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ \rangle \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \\ &\quad + \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} + \langle c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle \end{aligned}$$

而排斥性 ($U > 0$) 哈伯模型假設

$$c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \approx \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} + \langle c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle \\ - \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow} - \langle c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow} \rangle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} + \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow} \rangle$$

引入序參數 $\Delta_i^{(-)} \equiv \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle$ ($U < 0$) 與 $\Delta_i^{(+)} \equiv \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle$ ($U > 0$) 加上電子濃度

$n = \frac{1}{N_{latt}} \left\langle \sum_i (c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow}) \right\rangle$ 與平均自旋 $s = \frac{1}{N_{latt}} \left\langle \sum_i (c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow}) \right\rangle$ ，討論能帶方便起見將上述各量轉換到動量空間，並引入 ω 以描述序參數的不均勻性。

$$\Delta_j^{(-)} = \frac{1}{2U} \sum_{\vec{q}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_j) \Delta_{\vec{q}}^{(-)}$$

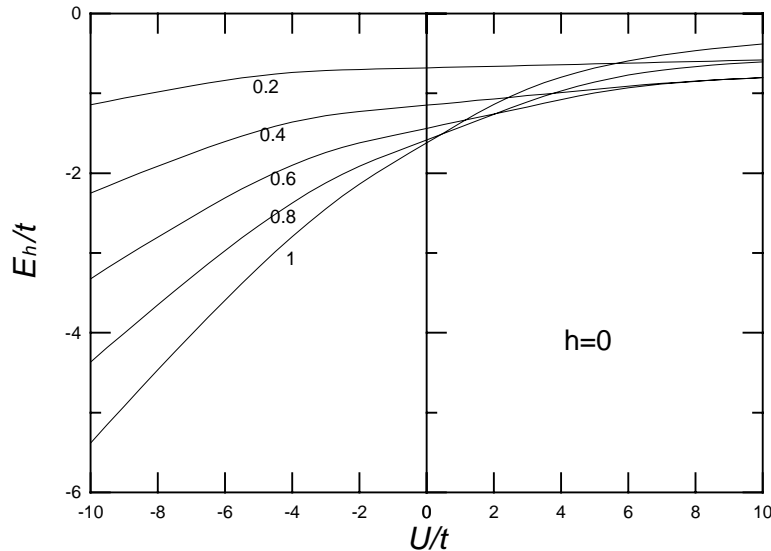
$$\Delta_j^{(+)} = -\frac{1}{2U} \sum_{\vec{q}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_j) \Delta_{\vec{q}}^{(+)}$$

在零溫度下利用平衡條件在二維無限方格子情況時可以得到一組自治方程。將二維哈伯模型廣義自治場的各物理量在零溫度與外加磁場下的結果與作一完整系列的計算，這些結果可與量子蒙地卡羅和變分蒙地卡羅的模擬計算作比較。

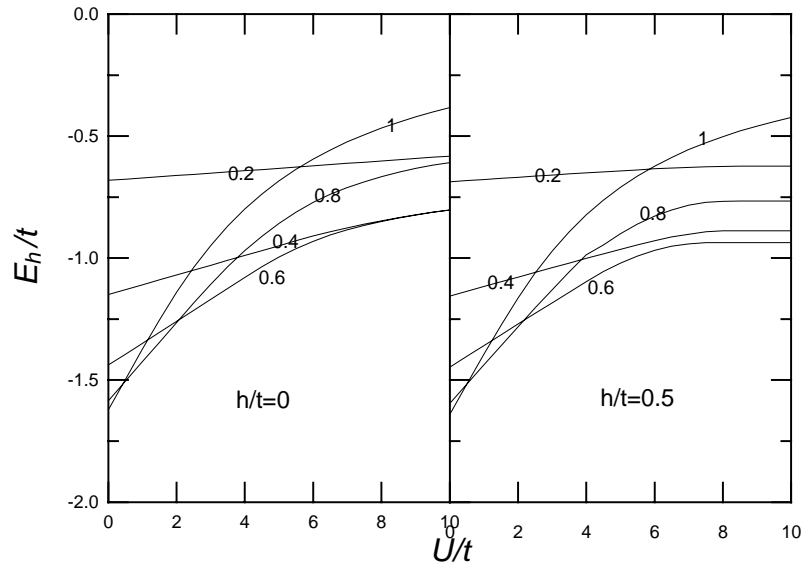
四、 結果與討論

系統總能在吸引及排斥情形各為 $E_h \equiv \frac{\langle H_{GSCF}^{(-)} \rangle}{N_{latt}} + \mu n$ ， $E_h \equiv \frac{\langle H_{GSCF}^{(+)} \rangle}{N_{latt}}$ 。基本上

二維情形下，能量對關連強度(U)、電子濃度(n)或磁場(h)間的關係，在性質上與一維的情形是相似的，但是在同一條件下相比，二維的能量明顯較一維時為低 [2, 11, 15]。



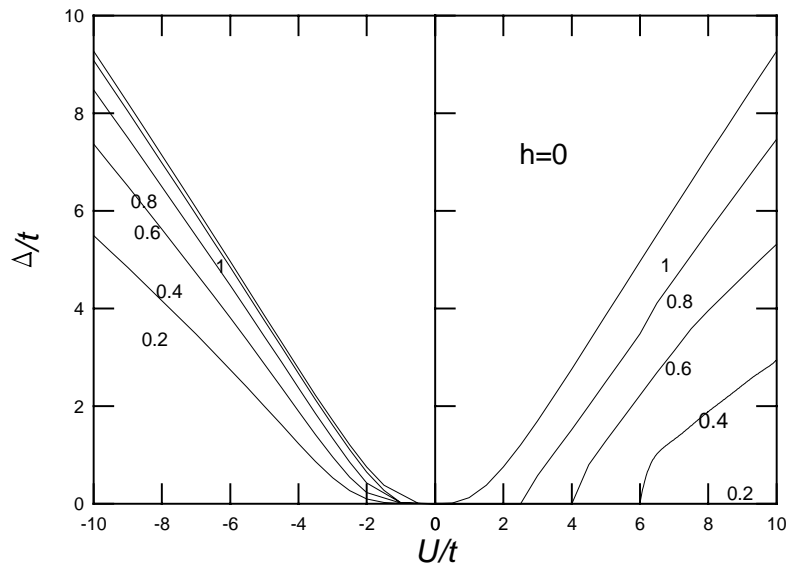
圖一、在無磁場下，能量對關連強度(吸引與排斥)關係圖。



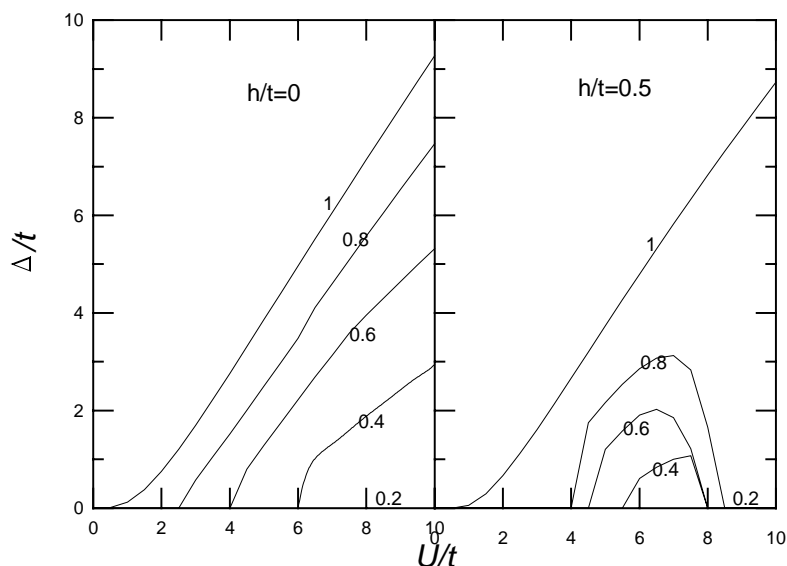
圖二、在不同磁場下，能量對關連強度(排斥性)關係圖。

序參數(Δ ，即文中之 $\Delta_q^{(+)}$)是解自洽方程式之重要參數，它除了與準粒子能帶間之能隙有密切關係外，經由分析參量 q 造成序參數 Δ 在動量空間中的不均勻分布，更可以將吸引或排斥性哈伯模型在不同關連強度時分成不同的態 [14, 16]。

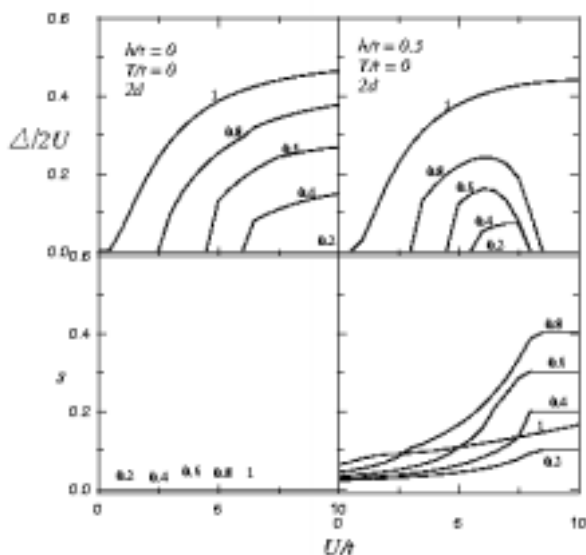
圖五比較了在二維時。排斥性哈伯模型橫向自旋 $S_{\perp} = \sqrt{S_x^2 + S_y^2} = \frac{|\Delta_q^{(+)}|}{2U}$ 與總平均自旋的結果。



圖三、在無磁場下，序參數對關連強度關係圖。

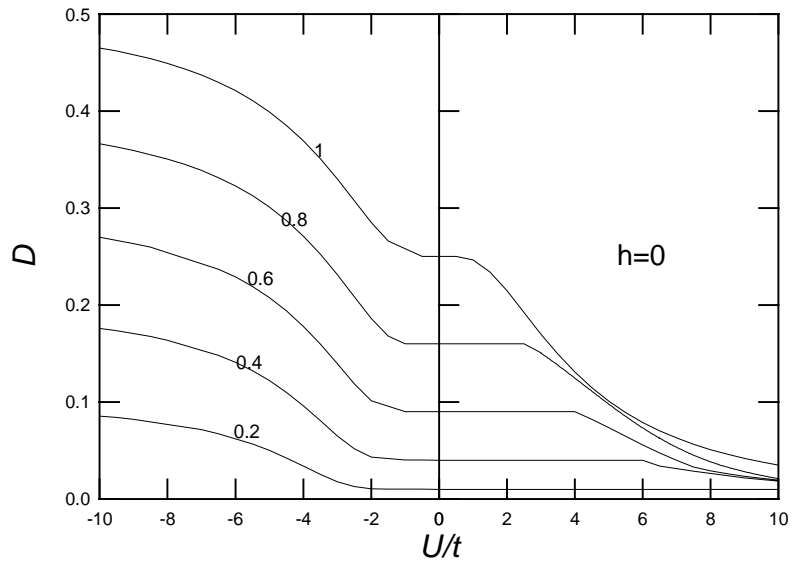


圖四、在不同磁場下，序參數對關連強度關係圖。

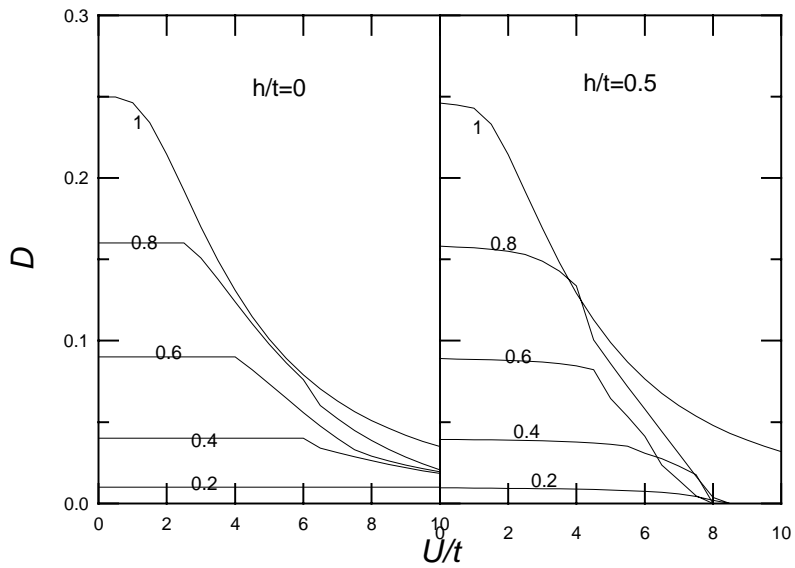


圖五、在不同磁場下，局部橫向自旋和自旋關連強度關係圖。

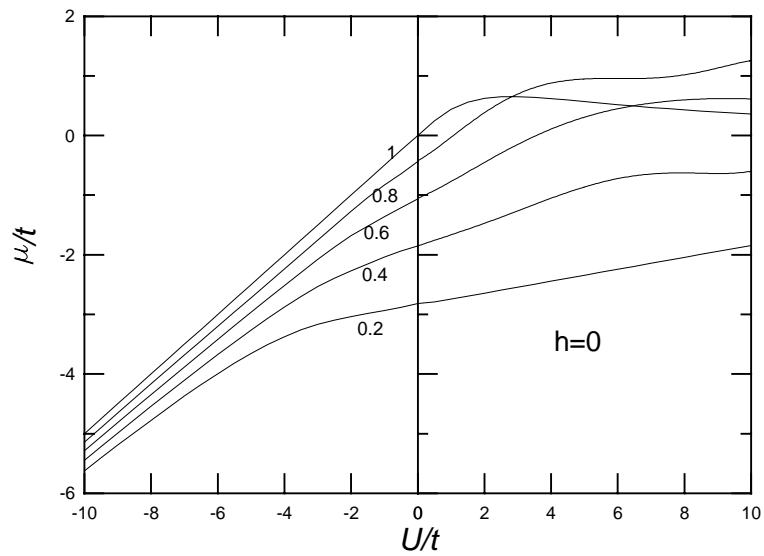
雙佔有結點濃度是每結點上同時有相反自旋電子的期望值， $D \equiv \sum_i \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle$ ，在廣義自洽場中可以用簡單的式子寫出； $D = \frac{n^2}{4} + \frac{\Delta^2}{4U^2} - s^2$ (吸引) 和 $D = \frac{n^2}{4} - \frac{\Delta^2}{4U^2} - s^2$ (排斥)。一維情形下自洽場的結果與精確解的不相符處在於， U 小的時候，自洽場的 D 呈現與 U 無關之直線；另外自洽場的 D 在 U 增加後陸續(不同的 n) 降為零，但精確結果卻是在 U 趨近無窮大時， D 才會降到零值。二維的情形，在 U 小的時候，自洽場的 D 呈現與 U 無關之範圍似乎加大了；但是在 U 增大後的 D 的趨勢也改善了。



圖六、在無磁場下，雙佔有結點濃度對關連強度關係圖。



圖七、在不同磁場下，雙佔有結點濃度對關連強度關係圖。



圖八、在無磁場下，化學勢對關連強度關係圖。

化學勢在計算的過程中是很重要的物理量。自洽場近似中，吸引力哈伯模型裡平均自旋守恆，但是電子濃度是不守恆的，必須引入化學勢以固定電子濃度。而在排斥性哈伯模型裡，平均自旋不守恆，但電子濃度是守恆的，則可以由填充準粒子之最高能階得到化學勢。在吸引的情形下，化學勢看來隨吸引強度降低而單調的增加；在排斥的情形下，除了 $n=1$ 在 $U/t=2$ 附近有極大值外， $n=0.8$ 時，化學勢隨排斥增大的特性也不是單調增加的。這些結果依過去一維的經驗看來，吸引力與精確解特性可能較相似，但排斥性與精確解的行為應該是不一樣的。當然有待進一步與量子蒙地卡羅和變分蒙地卡羅的模擬計算作比較方可斷定。

五、 計劃成果自評

計劃已完成在二維哈伯模型方格子所提出之廣義自洽場主要的物理量隨電子關連強度 U 、電子濃度 n 及外加磁場 h 改變的性質。成果預計可於近期中投稿於期刊中發表。計劃主持人在執行計劃期間亦有相關論文[26]-[29]在研討會議及期刊中發表。

六、 參考文獻

- [1] A. N. Kocharian, C. Yang, Y. L. Chiang, N. Kioussis, "Crossover in attractive one-dimensional Hubbard model for general electron concentrations", *Physica B*, 259-261, 739 (1999).
- [2] A. N. Kocharian, C. Yang, Y. L. Chiang, "Self-consistent and exact studies of pairing correlations and crossover in one-dimensional attractive Hubbard Model", *Physical Review B*, 59, 7458 (1999).
- [3] A. N. Kocharian, C. Yang, Y. L. Chiang, "Bose Condensation and Electron Pairing in One-dimensional Hubbard Model", *International Journal of Modern Physics B*, 13, 3538 (1999).
- [4] C. Yang, A. N. Kocharian, Y. L. Chiang, "Exact Ground-state Properties of One-dimensional Hubbard Model in Magnetic Field", *International Journal of Modern Physics B*, 13, 3573 (1999).
- [5] C. Yang, A. N. Kocharian, Y. L. Chiang, "Exact Magnetic Phase diagram of the One-dimensional Hubbard Model", *Physica B*, 281 & 282, 831 (2000).
- [6] C. Yang, A. N. Kocharian, Y. L. Chiang, "Phase transitions and exact ground-state properties of the one-dimensional Hubbard model in magnetic field", *J. Phys. Cond. Matt*, 12, 7433 (2000).
- [7] A. N. Kocharian, C. Yang, Y. L. Chiang, "The Phase Diagram and Inhomogeneous Superconductivity in the One-Dimensional Attractive Hubbard Model", *Physica C*, 341-348, 253 (2000).
- [8] C. Yang, A. N. Kocharian, Y. L. Chiang, "Exact Magnetic Ground-State Properties of the One-Dimensional Hubbard Model", *Physica C*, 341-348, 245 (2000).
- [9] A. N. Kocharian, C. Yang, Y. L. Chiang, "Pairing, Crossover and Inhomogeneous Superconductivity in the Attractive Hubbard Model", *International Journal of Modern Physics B*, 14, 3514 (2000).
- [10] C. Yang, A. N. Kocharian, Y. L. Chiang, "Exact Ground-state Properties and Phase Transitions within One-dimensional Hubbard Model in Magnetic Field", *International Journal of Modern Physics B*, 14, 3771 (2000).
- [11] A. N. Kocharian, C. Yang, Y. L. Chiang, "Phase diagram and BCS-Bose condensation crossover in 1d and 2d Hubbard models", *Physica C*, 364-365, 131 (2001).
- [12] C. Yang, A. N. Kocharian, Y. L. Chiang, "Induced magnetization and inhomogeneous superconductivity in presence of external magnetic field", *Physica C*, 364-365, 155 (2001).
- [13] A. N. Kocharian, C. Yang, Y. L. Chiang, T.Y. Chou "Superconductivity, magnetism and mapping between the attractive and repulsive Hubbard models", *J. Phys. Soc. Jpn. vol. 71 Suppl.*, 223-224 (2002).

- [14] C. Yang, A. N. Kocharian, Y. L. Chiang, T.Y. Chou "Phase diagram and magnetic correlations in one-dimensional repulsive Hubbard model with magnetic field", J. Phys. Soc. Jpn. vol. 71 Suppl., 193-195 (2002).
- [15] Y. L. Chiang, 'Main Properties of the One-dimensional Hubbard Model in an External Magnetic Field', the dissertation of PHD (2000).
- [16] 周庭瑜, "一維排斥哈伯模型磁基態性質之廣義自洽場研究", 碩士論文(2001).
- [17] 魯崇磊, "一維哈伯模型廣義自洽場結果之微擾修正", 碩士論文(2002).
- [18] E. H. Lieb, F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. 20, 1445 (1968).
- [19] The Hubbard Model A Peprint Volume, edited by Arianna Montorsi, ISBN 981-02-0585-6.
- [20] Peter Brusov, Mechanisms of high temperature superconductivity, Rostov on Don :Rostov State University Publishing,c1999.
- [21] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [22] L. P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP 7, 505 (1958).
- [23] W. Langer, M. Plischke, D. Mattis, Phys. Rev. Lett. 23, 1448 (1969).
- [24] D. R. Penn, Phys. Rev. 142 350 (1990).
- [25] J. Luo, N. Bickers, Phys. Rev. B 48, 15983 (1993).
- [26] L. Y. Chen, **Y. L. Chiang**, C. Yang, A. N. Kocharian, "Second order perturbation approach about self-consistent field theory in one dimensional Hubbard model", 2003 中華民國物理學會年會, 物理雙月刊, v. 25, no. 1, pp. 141-142. - NSC-91-2112M034002.
- [27] **Y. L. Chiang**, C. Yang, A. N. Kocharian, "Thermodynamic Properties and the phase diagram of the Hubbard Model in one-dimension", 2003 中華民國物理學會年會, 物理雙月刊, v. 25, no. 1, pp. 142. - NSC-91-2112M034002.
- [28] C. Yang, A. N. Kocharian, **Y. L. Chiang**, "Thermodynamic Properties of One-Dimensional Hubbard Model at Finite Temperatures", Intern Journal of Modern Physics B, vol. 17, Nos. 18-20, 3354-3358 (2003)
- [29] A. N. Kocharian, C. Yang, **Y. L. Chiang**, "Perturbation Theory About Self-Consistent Field Solution in One-Dimensional Hubbard Model", Intern Journal of Modern Physics, vol. 17, Nos. 18-20, 3363-3366 (2003)