DOI:10.19789/j.1004-9398.2015.05.006

自旋轨道耦合体系 Mott 相变的团簇动力学平均场理论研究

张 新 纪安春*

(首都师范大学物理系,北京 100048)

摘 要

Mott 相变一直是凝聚态物理广泛研究的前沿问题,对于理解高温超导有重要意义. 在描述 Mott 相变中 Hubbard 模型处于核心的位置. 在该模型中,强电子-电子相互作用使巡游电子局域化,从而使体系发生 Mott 相变. 目前,在很多材料中发现电子具有自旋-轨道耦合,所以自旋轨道耦合引起了人们很大的兴趣. 本文研究具有自旋-轨道耦合正方晶格的 Mott 转变,得到了体系在参数空间下的相图. 我们发现,当考虑自旋轨道耦合,它对传统的 Hubbard 模型会产生重要的影响.

关键词: Mott 相变,自旋-轨道耦合,动力学平均场,最大熵.

中图分类号: O469

0 引 言

Mott 金属-绝缘转变是由来已久的强关联问题,它的物理原型之一是 Cr 掺杂的 V_2O_3 体系,单带 Hubbard 模型通常作为描述这一转变的基本模型[1,2]. Hubbard 模型是在研究巡游铁磁性的时候提出的,它是由有电子的跃迁动能和在位相互作用能两部分组成,这个看似简单的模型在凝聚态物理中占有核心的地位,它不仅能解释反铁磁的起因也能给出高温超导的 d-wave 序参量,其实高温超导的母体就是未经掺杂的 Mott 绝缘体[3-5]. 在 Hubbard 模型中,当电子的在位相互作用远大于带宽的时候可以使电子产生局域化,最终产生金属-绝缘转变,使体系变成 Mott 绝缘体,所以研究这个过程有重要的意义.

但是在很多实际材料(如 $LaAlO_3/SrTiO_3$ 的界面)具有很强的自旋-轨道耦合相互作用,通过自旋-轨道耦合可以获得附加的相因子,从而获得磁通-粒子的绑定[6,7]. 在自旋-轨道耦合存在的情况下可能得到和传统 Hubbard 模型在正方格子上不同的 Mott 金属-绝缘相变图像,尤其在自旋-轨道耦合极限情况下金属-绝缘转变的图像不再是从费米液体到 Mott 绝缘体的经典图像,而是 Dirac 液体随相互作用的演化,所以费米液体的图像不能完全成立[8]. 研究 Dirac 液体随相互作用的演化不仅对于理解金属-绝缘转变有重要的意义,同时可以促进自旋-轨道耦合材料的应用.

然而对于量子多体问题,除了一些特殊系统外,人们是无法找到一般解的,求解多体系统,各种解析的办法已经无能为力,为此人们发展出了各种数值的办法来解决这些问题. 对于零维和一维的问题,NRG/DMRG 可以很好的解决[9,10],在超出一维的多体系统中,我们往往更多地使用量子蒙特卡洛算法,然而由于众所周知的负符号问题,它只能处理半满和无阻挫的问题[11,12]. 动力学平均场理论(dynamical mean field theory,DMFT)正是在这种背景下产生的,它解决了二维和三维强关联问题中量子蒙特卡洛无法求解的问题. DMFT 基于局域自能近似,在自能泛函理论的框架下,通过建立一组基于两点关联函数(格林函数)的 DMFT 方程组,将原始强关联问题映射为一个单格点或少量格点的 Anderson 杂质模型[13,14]. 使用数值的方法(比如严格对角化、量子蒙卡等)来求解这个大大简化的 Anderson 杂质模型,我们就可以得到对应物理系统的某些性质[15].

1 模型和方法

本文考虑二维正方格子上具有 Rashba 相互作用的费米子 Hubbard 模型,哈密顿量具有如下形式

收稿日期:2014-11-05

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

$$H = -t\sum_{\langle ij\rangle}\sum_{\sigma\sigma'}c^{\dagger}_{i\sigma}R_{ij}c_{j\sigma'} + \text{H.c.}) + U\sum_{i}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + \mu\sum_{i}n_{i} \quad (1)$$

其中 t 是跃迁强度,$c_{i\sigma}$($c^{\dagger}_{i\sigma}$)是第 i 格点的费米子湮灭(产生)算符,跃迁矩阵元为 $R_{ij} = \exp\left[\mathrm{i}\vec{A}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_j)\right]$,其中 $\vec{A} = (\alpha\sigma_x, \beta\sigma_y, 0)$ 是非阿贝尔的规范场,本文中取 $\beta = -\alpha$,这时体系成为 rashba 自旋-轨道耦合. U 是在位排斥相互作用,μ 是化学势,调节 μ 使的体系保持半满状态.

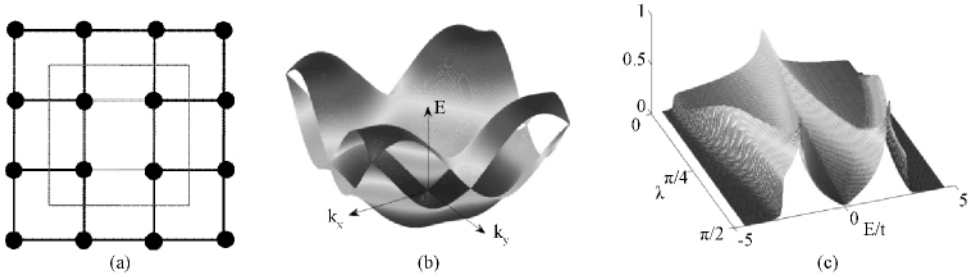


图 1 (a)正方晶格中选取的 2x2 团簇,延 x 方向的跃迁为 σ_y(蓝线),延 x 方向的跃迁为 σ_x(红线). (b)自旋-轨道耦合强度 $\alpha = 10\pi/3$ 下的能谱 (c)无相互作用下不同自旋-轨道耦合的态密度.

对于二维正方晶格,由于量子涨落很强必须采用团簇扩展的动力学平均场理论(CDMFT),CDMFT 包含了局域的量子涨落和部分空间关联,使得 CDMFT 成为比 DMFT 更加精确的方法[16-18]. CDMFT 首先通过 Weiss 函数 g(iω)把原始的格点模型映射到一个量子团簇杂质模型上,这个团簇模型可以通过迭代得到. 首先猜出一个团簇自能 Σ(iω),g(iω)可以通过粗粒化的 Dyson 方程得到

$$g^{-1}(\mathrm{i}\omega) = \left[\sum_{k}\frac{1}{\mathrm{i}\omega + \mu - t(K) - \Sigma(\mathrm{i}\omega)}\right]^{-1} + \Sigma(\mathrm{i}\omega) \quad (2)$$

其中 t(K)是超晶格的色散关系,对于 2x2 的团簇是一个 4x4 的矩阵,波矢 K 是超晶格约化布里渊区,μ 是化学势. 得到 Weiss 函数后就可以通过数值的办法(本文利用 Hirsch-Fye 量子蒙特卡洛)作为杂质求解器求解团簇的格林函数 G(iω),然后利用 Dyson 方程$\Sigma(\mathrm{i}\omega) = g^{-1}(\mathrm{i}\omega) - G^{-1}(\mathrm{i}\omega)$重新计算团簇的自能$\Sigma(\mathrm{i}\omega)$,通过如此自洽迭代循环直到自能收敛就可以得到精确的团簇格林函数.

对于方程(1)所描述的体系,由于自旋-轨道耦合破坏了系统原有的 SU(2)对称性使原有的自旋简并解除,体系的能带被劈裂成两个 Rashba 带,出现自旋翻转项,上下自旋被耦合在一起,必须用旋量来重新定义体系的格林函数,

$$\langle\psi(\tau_i)\psi^{V}(\tau_j)\rangle = \begin{bmatrix} G_{\uparrow\uparrow}(\tau_i - \tau_j) & G_{\uparrow\downarrow}(\tau_i - \tau_j) \\ G_{\downarrow\uparrow}(\tau_i - \tau_j) & G_{\downarrow\downarrow}(\tau_i - \tau_j)\end{bmatrix} \quad (3)$$

同时定义 Weiss 函数为 $g(\mathrm{i}\omega) = \begin{pmatrix} g_{\uparrow\uparrow} & g_{\uparrow\downarrow} \\ g_{\downarrow\uparrow} & g_{\downarrow\downarrow}\end{pmatrix}$,$G_{\sigma\sigma'}(\mathrm{i}\omega)$和 $g_{\sigma\sigma}(\mathrm{i}\omega)$为 4x4 矩阵,其中 $g_{\sigma\sigma'}(\mathrm{i}\omega)$为非对角相,$g^{-1}(\mathrm{i}\omega)$扩展为为 8x8 矩阵.

在得到 $g^{-1}(\mathrm{i}\omega)$后使用 Hirsch-Fye 量子蒙特卡洛(HFQMC)求解 G(iω),首先利用 Trotter 分解把双粒子算符和单粒子算符分开

$$z + \mathrm{Tr}e^{-\beta H} \approx \mathrm{Tr}\prod_{l=1}^{L}e^{-\Delta\tau H_0}e^{-\Delta\tau H_i} \quad (4)$$

然后通过 Ising 型 Hubbard-Stratonovich 辅助场把双粒子算符化成单粒子算符

$$e^{-\Delta\tau U\left(n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}n_{i\uparrow} - \frac{1}{2}n_{i\downarrow}\right)} = \frac{1}{2}\sum_{si=\pm1}e^{\lambda s_i(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})} \quad (5)$$

其中 $\cosh\lambda = e^{-\Delta\tau U}$,这样就把复杂的多体问题转化为经典 Ising 问题,通过经典蒙特卡洛抽样求解 Ising 模型就可以得到原始格点的物理性质. Hirsch-Fye 量子蒙特卡洛可以很方便处理各种尺寸,各种温度以及各种相互作用的量子团簇问题[12,19]. 在本文中每次蒙特卡洛循环采用 96 000 次抽样.

2 结果与讨论

本文利用 CDMFT + HFQMC 的方法研究了具有 Rashba 自旋轨道耦合的正方格子体系的金属-绝缘转变,本文通过选取 2x2 的团簇作为杂质模型,利用 CDMFT 的方法得到体系的格林函数,用最大熵的方法得到体系的态密度[20],进而得到体系的能隙,最后给出体系的相图.

方程(1)中 α 的不同取值会给出不同的图像,当方程(1)中 $\alpha = 0$ 时体系变成传统的 Hubbard 模型,如图 1(a)所示在相互作用增加的过程中体系会发生从费米液体到 Mott 绝缘体的转变[14],高温超导的母体 La_2CuO_34 正是具有正方晶格的 Mott 绝缘体,在此基础上进行空穴掺杂,由于破坏了费米面的

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

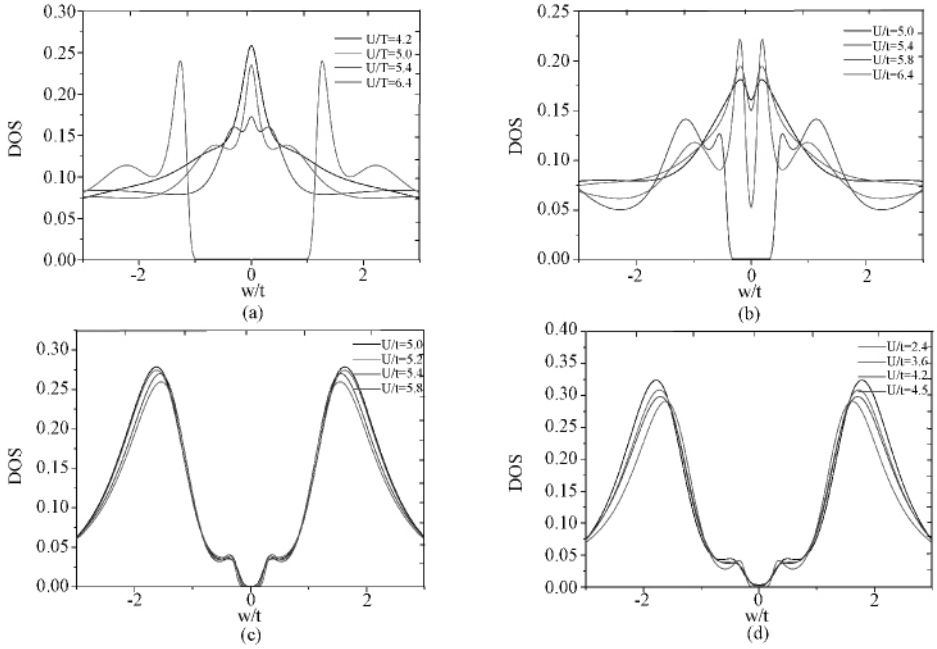


图 2　正方格子具有 Rashba 自旋 - 轨道耦合体系在 2x2 团簇下 CDMFT 方法得到的体系的态密度
(a) α = 0 时不同相互作用强度下的态密度; (b) α = 0. 6 时不同相互作用强度下的态密度;
(c) α = 1. 54 时不同相互作用强度下的态密度; (d) α = π/2 时不同相互作用强度下的态密度

"嵌套",自旋涨落增强,所以自旋涨落驱动使体系进入超导状态,所以研究这个过程对于理解高温超导有重要的意义.

而当方程(1)中 α = π/2 时体系进入另一个状态,体系等价于正方晶格上加交错的 π 磁通[21],这时在无相互作用时体系的低能色散关系为线性,出现类似于六角格子的 Dirac 锥,体系为半金属状态,在相互作用增加时体系逐渐产生能隙,如图 2(d)所示体系的态密度从半金属过渡到绝缘体. 这种特殊的色散结构使体系处于金属和绝缘体之间,从而使得这个材料可能用来制作纳米器件或量子器件.

当方程(1)中 α 在 0 和 π/2 之间时本文也研究了体系在不同相互作用强度下的态密度,图 1(b)和图 1(c)分别是 α = 0. 6 和 α = 1. 54 时体系在不同相互作用情况下的态密度,在相互作用增强时体系的能隙打开,给出了体系从金属进入绝缘体的图像.

通过分析态密度,我们给出了体系在 λ 和 U 参数空间下的相图,整个相图分成三部分,金属相、半金属相和 Mott 绝缘体相,这个相图给出了这个体系丰富的物理图像,可能对理解高温超导和量子器件的应用提供理论基础.

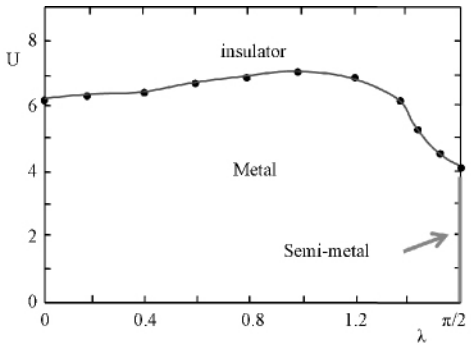


图 3　体系在 λ 和 U 参数空间下的相图,
分为金属相、半金属相和 mott 绝缘体相

3　总　结

本文利用 CDMFT + HFQMC 的方法研究了正方格子上具有 Rashba 自旋 - 轨道耦合的体系的金属 - 绝缘转变,通过最大熵的办法研究了体系的态密度并且给出了体系在 λ 和 U 参数空间下的相图. 这个相图和没有自旋 - 轨道耦合的正方晶格是有差别的,除了给出从费米液体到 Mott 绝缘体的图像外,还在自旋 - 轨道耦合极限的情况下给出了 Dirac 液体到 Mott 绝缘体的转化图像,这个体系给出了丰富的物理性质并且存在巨大的应用前景.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

参 考 文 献

[1] Imada M,Fujimori A,Tokura Y. Metal-insulator transitions [J]. Rev Mod Phys,1998,70(1039):1040 - 1263.

[2] McWhan D B,Rice T M. Critical Pressure for the Metal-Semiconductor Transition in V2O3 [J]. Phys Rev Lett,1969,22(887):887 - 890.

[3] Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands [J]. Proc Roy Soc A, 1963, 276(238):238 - 257.

[4] Kanamori J. Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals [J]. Prog Theor Phys, 1963, 30(275):275 - 289.

[5] Anderson P W. The resonating valence bond state in La2CuO4 and superconductivity [J]. Science, 1987, 235(6): 1196 - 1198.

[6] Banerjee S, Erten O, Randeria M. Ferromagnetic exchange, spin-orbit coupling and spiral magnetism at the LaAlO3/SrTiO3 interface [J]. Nature phys, 2013, 9(626):626 - 630.

[7] Kane C L, Mele E J. Quantum Spin Hall Effect in Graphene [J]. Phys Rev Lett, 2005, 95(226801).

[8] Wu W, Chen Y H, Tao H S, et al. Interacting Dirac fermions on honeycomb lattice [J]. Phys Rev B, 2010, 82(245102).

[9] White S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups [J]. Phys Rev Lett, 1992, 69(2863):2863 - 2866.

[10] Schollwock U. The density-matrix renormalization group [J]. Rev Mod Phys, 2005, 77(259).

[11] Scalapino D J, Sugar R L. Method for Performing Monte Carlo Calculations for Systems with Fermions [J]. Phys Rev Lett, 1981, 46(519):519 - 521.

[12] Hirsch J E. Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study [J]. Phys Rev B, 1985, 31(4403):4403 - 4419.

[13] Georges A, Kotliar G. Hubbard model in infinite dimensions [J]. Phys Rev B, 1992, 45(6479):6479 - 6483.

[14] Georges A, Kotliar G, Krauth W, et al. Dynamical meanfield theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions [J]. Rev Mod Phys, 1996, 68(13):13 - 125.

[15] Potthoff M. Self-energy-functional approach: Analytical results and the Mott-Hubbard transition [J]. Eur Phys J B, 2003, 36(335):429 - 436.

[16] Kotliar G, Savrasov S Y, Palsson G, et al. cellular dynamicalmean field approch to strongly correlated systems [J]. Phys Rev Lett, 2001, 87(186401).

[17] Parcollet O, Biroli G, Kotliar G. Cluster dynamical mean field analysis of the Mott transition [J]. Phys Rev Lett, 2004, 92(226402).

[18] Biroli G, Kotliar G. Cluster methods for strongly correlated electron systems [J]. Phys Rev B, 2002,65(155112).

[19] Hirsch J E, Fye R M. Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals [J]. Phys Rev Lett, 1986,56(2521): 2521 - 2524.

[20] Jarrell M, Macridin A, Mikelsons K, et al. The Dynamical Cluster Approximation with Quantum Monte Carlo Cluster Solvers [J]. AIP Conf Proc, 2007, 1014 :34 - 106.

[21] Chang C C, Scalettar R T. Quantum Disordered Phase near the Mott Transition in the Staggered-Flux Hubbard Model on a Square Lattice [J]. Phys Rev Lett, 2012, 109(026404).

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

Cluster Dynamical Mean-Field Theory Study of Mott Transition with Spin-Orbit Coupling

Zhang Xin　Ji Anchun*

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing　100048)

Abstract

The study of Hubbard model has been one of physical frontiers in the past decades for understanding the strongly correlated materials, and especially play fundamental roles in the study of high temperature superconductors. One of the intriguing features in Hubbard model is that the strong Coulomb interaction can makes electrons localized and induce the Mott transitions. Recently, spin-orbit coupling has been discovered to exist in many materials, the research on Mott transitions with spin-orbit coupling has attracted great theoretical interest. In this work, we study the Mott transitions of the Hubbard model with spin-orbit coupling in square lattice. We adopted the dynamical mean-field theory (DMFT) in this work to derive the phase diagram of whole parameter space, and find that spin-orbit coupling yields new properties beyond the traditional Hubbard model.

Key words: Mott transitions, spin-orbit coupling, dynamical mean-field theory, maximum entropy.

(上接第 12 页)

参 考 文 献

[1] 陈传理,张同君. 竞赛数学教程 [M]. 北京:高等教育出版社,2005,4:116.
[2] 陈小芳. Lucas 数列中素因子 2 的指数 [J]. 首都师范大学学报,2013,(5):6-7.
[3] 陈小芳. Lucas 数的标准分解式中素因子 3 的指数 [J]. 贵州师范大学学报,2013,(4):45-47.
[4] 陈小芳. 广义 Lucas 数列的一些求和公式 [J]. 价值工程,2011,(11):176-177.
[5] 晁晶晶. 广义杨辉三角形与 Lucas 数列的关系研究 [J]. 新乡学院学报,2011,(3):196-197.
[6] 晁晶晶. 杨辉三角与 Lucas 数列的一个关系 [J]. 长沙大学学报,2011,(2):5-6.

The Periodicity of Modular Sequence of Lucas Sequence

Chen Xiaofang

(College of Mathematics and Information Science, Weinan Normal University, Weinan　714000)

Abstract

For the Lucas sequence $\{L_n\}$ and positive integer m, the new sequence $\{b_n\}$ which composed of least non-negative residue b_n of module m on L_n is called module sequence of Lucas sequence. Based on the elementary number theory and mathematical induction, this paper proves that the modular sequence of Lucas sequence is both a periodic sequence and a simple periodic sequence.

Key words: Lucas sequence, modular sequence, periodic sequence, simple periodic sequence.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net