

Mean-Field Solution of Single-Layer Graphene

REF

hwave-tool

Stdface-tool

[1]Magnetism of finite graphene samples: Mean-field theory compared with exact diagonalization and quantum Monte Carlo simulations, Hélène Feldner, et al, PHYSICAL REVIEW B 81, 115416 (2010)

[2]Mean-field solution of the Hubbard model: the magnetic phase diagram,Y Claveau et al, 2014 Eur. J. Phys. 35 035023

[3]Semi-Metal-Insulator Transition of the Hubbard Model in the Honeycomb Lattice,S. Sorella and E. Tosatti 1992 EPL 19 699

平均场原理

在实空间中，Hubbard模型的哈密顿量为：

$$\begin{aligned} H_0 &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{h.c.} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \\ H_U &= U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned} \quad (1)$$

可以选取相互作用四费米子项中的 $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ 与 $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ 作为平均场参数，认为其偏离平衡值的变化为小量，相互作用的等效哈密顿量为：

$$H_U^{MF} = U \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma} \langle n_{\alpha,-\sigma} \rangle - U \sum_{\alpha} \langle n_{\alpha\uparrow} \rangle \langle n_{\alpha\downarrow} \rangle \quad (2)$$

对角化这些二费米子算符，得到用平均场参数表示的新基矢下的本征能量，利用基矢变换反解原先的 $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ 与 $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ ，从而完成自洽求解。

在 k 空间中，Hubbard模型的哈密顿量为：

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\vec{k}} \left(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu \right) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \\ H_U &= U \sum_{\vec{q}} \rho_{\vec{q},\uparrow} \rho_{-\vec{q},\downarrow} \\ \rho_{\vec{q},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} \end{aligned} \quad (3)$$

可以选取相互作用四费米子项中的 $\langle \rho_{\vec{q},\sigma} \rangle$ 作为平均场参数，认为其偏离平衡值的变化为小量，相互作用的等效哈密顿量为：

$$H_U^{MF} = U \sum_{\vec{q}} \left\langle \rho_{\vec{q},\uparrow} \right\rangle \rho_{-\vec{q},\downarrow} + \rho_{\vec{q},\uparrow} \left\langle \rho_{-\vec{q},\downarrow} \right\rangle - \left\langle \rho_{\vec{q},\uparrow} \right\rangle \left\langle \rho_{-\vec{q},\downarrow} \right\rangle \quad (4)$$

按照之前的方法自洽求解即可。

H-wave 程序包求解平均场

H-wave是一个求解平均场的程序包，本质上做的是实空间的Hartree-Fock近似。先利用Stdface程序输入作用量的形式与体系的几何参数，比如对于单层石墨烯而言，输入：单层石墨烯的几何参数，transfer项，onsiteU项，平均场参数，得到：

Input

```

build > src > ≡ stan.in
1  model = "Hubbard"
2  lattice = "Honeycomb"  石墨烯晶格
3  W = 4
4  L = 4
5  t = 1.0                引入t,U项
6  U = 1.0
7  exportall = 0
8  calcmode = "uhfk"      在k空间对角化

```

Output

```

MFgraphene > try1 > ≡ transfer.dat
1  Transfer in wannier90-like format for uhfk
2  2
3  9
4  1 1 1 1 1 1 1 1 1
5  -1 0 0 1 2 -1.000000000000 -0.000000000000
6  0 -1 0 1 2 -1.000000000000 -0.000000000000
7  0 0 0 1 2 -1.000000000000 0.000000000000
8  0 0 0 2 1 -1.000000000000 -0.000000000000
9  0 1 0 2 1 -1.000000000000 0.000000000000
10 1 0 0 2 1 -1.000000000000 0.000000000000

```

两个格点相对位置 A, B 子格 transfer项的实部与虚部

Output

```

CoulombIntra in wannier90-like format for uhfk
2
1
1
0 0 0 1 1 1.000000000000 0.000000000000
0 0 0 2 2 1.000000000000 0.000000000000

```

两格点相对位置 A, B子格 onsiteU实部与虚部

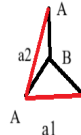
Output

```

MFgraphene > try1 > ≡ geom.dat
1  1.000000000000 0.000000000000 0.000000000000
2  0.500000000000 0.866025403784 0.000000000000 石墨烯晶格矢量
3  0.000000000000 0.000000000000 1.000000000000
4  2 两个orbit
5  0.000000000000e+00 0.000000000000e+00 0.000000000000e+00
6  3.333333333333e-01 3.333333333333e-01 0.000000000000e+00
7

```

用晶格矢量表示的A, B子格坐标



H-wave程序包需要输入的就是上面确定几何形状与相互作用形式的文件，再加上确定平均场参量的文件，最终用**hwave**程序执行下面的文本文件得到输出的结果。平均场参量的定义式是 $\langle C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma'} \rangle$ ，当只保留 $i = j, \sigma = \sigma'$ 时，平均场参量就是onsiteU项实空间中的参量 $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ 与 $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ ，简单的情况下该文件就可以如此定义。

MFgraphene > try4 > ≡ greenone.def

```

1  =====
2  NCisAjs 32
3  =====
4  ===== Green functions =====
5  =====
6  0 0 0 0
7  1 0 1 0
8  2 0 2 0
9  3 0 3 0
10 4 0 4 0
11 5 0 5 0
12 6 0 6 0
13 7 0 7 0
14 8 0 8 0
15 9 0 9 0
16 10 0 10 0
17 11 0 11 0
18 12 0 12 0
19 13 0 13 0
20 14 0 14 0
21 15 0 15 0
22 etc

```

定义平均场参量

sitei spin_i sitej spin_j

MFgraphene > try2 > output > ≡ green.dat

```

1  0 0 0 0 0.49994385457969803 0.0
2  0 0 1 0 0.26472197161662636 0.0
3  0 0 2 0 1.0209085543069142e-08 0.0
4  0 0 3 0 -0.027947177109293675 0.0
5  0 0 4 0 -7.380917584513079e-07 0.0
6  0 0 5 0 -0.027947129323887515 0.0
7  0 0 6 0 9.175402254768229e-07 0.0
8  0 0 7 0 0.2647215086677531 0.0
9  0 0 8 0 -1.0073510752580233e-06 0.0
10 0 0 9 0 -0.027947262531589454 0.0
11 0 0 10 0 5.942290649040572e-07 0.0
12 0 0 11 0 0.041142731593370986 0.0
13 0 0 12 0 3.76000888784074e-07 0.0
14 0 0 13 0 -0.02794792856798592 0.0
15 0 0 14 0 -1.5612285321145527e-06 0.0
16 0 0 15 0 -0.09703763204559124 0.0
17 0 0 16 0 -2.813061587767971e-07 0.0
18 0 0 17 0 -0.027947616562206547 0.0
19 0 0 18 0 -1.1703446397294784e-07 0.0
20 0 0 19 0 -0.02794708037598959 0.0
21 0 0 20 0 7.615122214601569e-07 0.0
22 0 0 21 0 0.04114291550572091 0.0
23 0 0 22 0 2.2037735206414217e-07 0.0
24 0 0 23 0 0.04114231394265085 0.0
25 0 0 24 0 1.0420519681224542e-07 0.0

```

运行结束后输出平均场参量的实部与虚部

MFgraphene > try1 > input.toml

```

1  [log]
2  print_level = 1
3  print_step = 10
4  [mode]
5  mode = "UHFk"
6  [mode.param]
7  2Sz = 0 总自旋
8  Ncond = 32 传导电子数
9  IterationMax = 10000
10 EPS = 32 截断
11 Mix = 0.5 混合前一次迭代后参数的自治求解，混合比例
12 RndSeed = 123456789
13 T = 0.0
14 CellShape = [ 4, 4, 1 ] 总粒子数
15 Subshape = [ 1, 1, 1 ]
16 [file]
17 [file.input]
18 path_to_input = ""
19 [file.input.interaction]
20 path_to_input = "." 前面定义的请多输入文件
21 Geometry = "geom.dat"
22 Transfer = "transfer.dat"
23 CoulombInter = "coulombintra.dat"
24 [file.output]
25 path_to_output = "output"
26 energy = "energy.dat" 输出
27 eigen = "eigen"
28 green = "green"

```

k空间中做对角化的平均场最终输入

这样的文本文件定义方法为之后进一步计算创造了条件。比如双层石墨烯的计算，虽然**Stdface**中只有单层的结构，但是只要通过修改几个**Stdface**的输出文件，用几何关系找到4个子格在晶格矢量下的坐标，把现在的1类改为4类**transfer**作用形式，增加1倍**onsiteU**相互作用就可以了。比如我想要向模型中加入更多的项，利用**hwave**中已经定义好的作用形式，或是找到一种可以写作四费米子相互作用的普遍形式，也是可以计算的。

Trans gives the one-body part expressed by $c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}$.

InterAll gives the generalized two-body interactions expressed by $c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4}$.

Besides, we can specify by the following keywords the interactions that are frequently used.

CoulombIntra gives the on-site Coulomb interaction expressed by $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, where $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$.

CoulombInter gives the inter-site Coulomb interaction expressed by $n_i n_j$, where $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$.

Hund gives the Hund interaction expressed by $n_{i\uparrow}n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}$.

PairHop gives the pair-hop interaction expressed by $c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}$.

Exchange gives the exchange interaction expressed by $S_i^+ S_j^-$.

Ising gives the Ising interaction expressed by $S_i^z S_j^z$.

PairLift gives the pair-lift interaction expressed by $c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}$.

Result and Discussion part 1

MODEL :

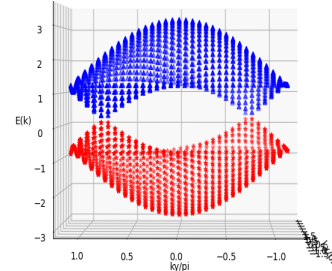
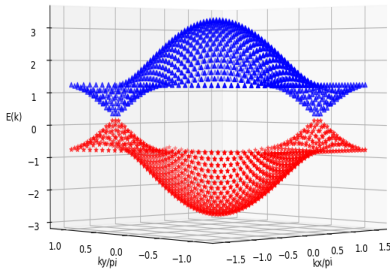
$$H_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{h.c.} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \quad (1)$$

$$H_U = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

LATTICE :

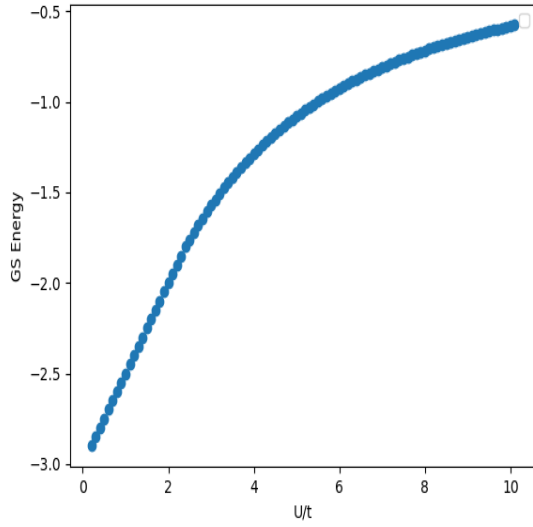
SINGLE-LAYER GRAPHENE

Energy Band

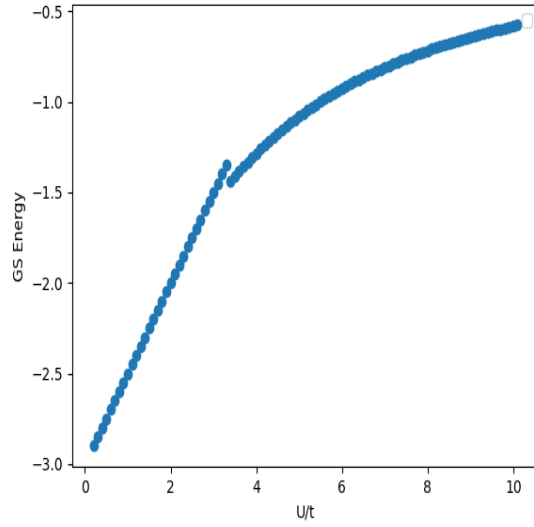


Half-Filling, $S_z = 0$, $N = [32, 32, 2]$, $U = t = 1$, $T = 0$

Ground State Energy



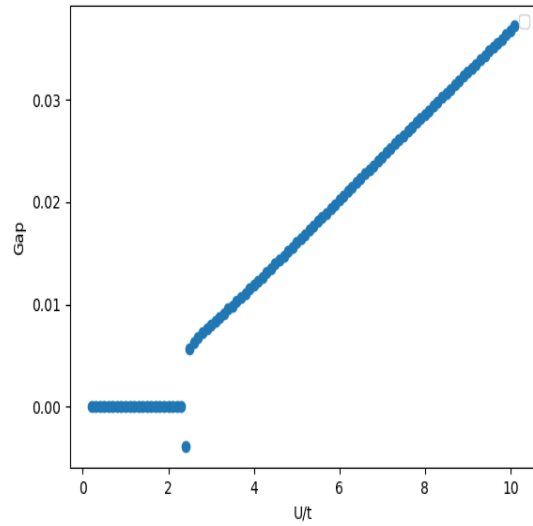
Half-Filling, $S_z = 0$, $N = [16, 16, 2]$, $T = 0$, $EPS = -8$



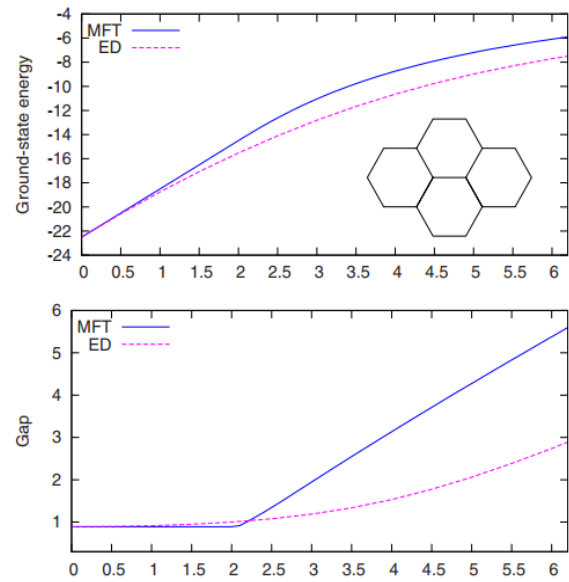
Half-Filling, $S_z = 0$, $N = [16, 16, 2]$, $T = 0$, $EPS = -6$

Charge Gap

$E(N+1)-E(N)-(E(N)-E(N-1))$



(Left) Half-Filling, $S_z = 0$, $N = [16, 16, 2]$, $T = 0$, $EPS = -8$



(Right) PHYS.REV.B, 81,115416 (2010) $N = 16$

由于计算精度所限，可以认为在 $U = 2.3t$ 附近发生了相变，更为精确的石墨烯Hartree-Fock平均场应当在 $U = 2.23t$ 左右，这实际上是Hubbard模型的Hubbard-Mott相变，使得单层石墨烯从半金属态变为反铁磁绝缘体态。在原本的狄拉克锥上对于A, B两个子格石墨烯存在重合的能带，石墨烯A,B子格共计提供两个价电子，重合的能带需要四个电子填满，半满的带呈现金属性。随着onsite U 作用的增强，如果仍然用能带理论近似去看的话，如果石墨烯所呈现的反铁磁性质，其会打开带隙。具体来说，原本无相互作用的低能有效石墨烯哈密顿量， $H = \vec{q}\vec{\sigma}$ 不会对A,B子格做出选择，加入反铁磁作用后相当于取定 z 方向自旋，加入的相互作用使得Half-filling $\langle n_{iA\uparrow} \rangle + \langle n_{iA\downarrow} \rangle = 1$ 下， $\langle n_{iA\uparrow} \rangle > 1/2$ 与 $\langle n_{iA\downarrow} \rangle < 1/2$ ，以及 $\langle n_{iB\uparrow} \rangle < 1/2$ 与 $\langle n_{iB\downarrow} \rangle > 1/2$ ，写在矩阵中：

$$\begin{pmatrix} 1/2 > & & & \\ & < 1/2 & & \\ & & < 1/2 & \\ & & & > 1/2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

求解能带，打开带隙，准粒子描述下的电子需要带隙的能量 $E(N+1) - E(N)$ 才会被激发，charge gap非零，并且原本重合的能带产生差距，从而两个价电子填满能带呈绝缘体。

求解量子磁性（未完成）

想要画出的相图应当是 FM, PM, AFM 指标在不同 filling , U/t 下面的值, [Y Claveau et al (2014)][3] (*Hubbard, Square*)得到的相图为:

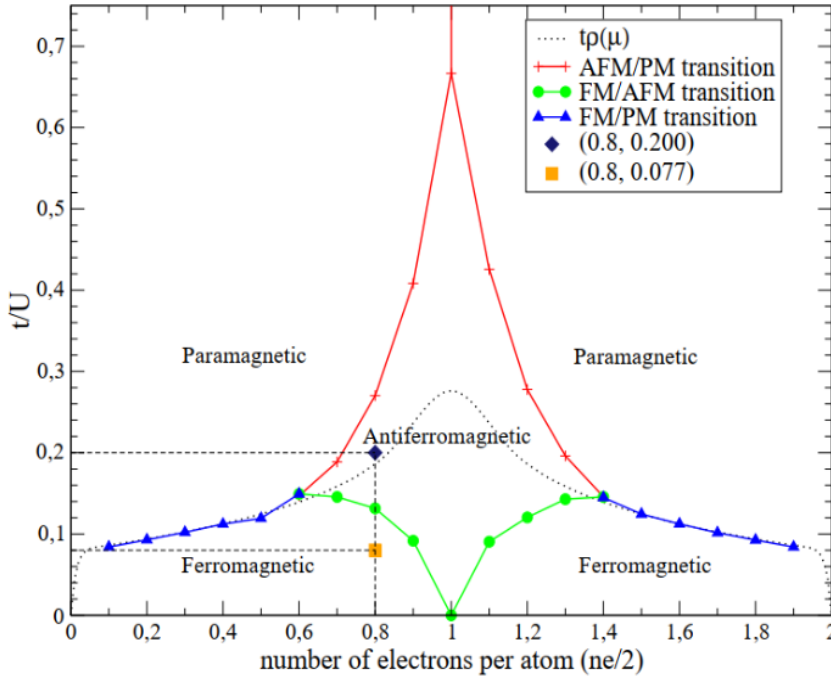


FIG. 6: Ground-state phase diagram of the Hubbard model on a square lattice as a function of the ratio t/U and of the electron filling. The physical relevance of the curve $tp(\mu)$ is detailed in the text. We used an inverse-temperature value $\beta = 0.03t$ in the equations. The two points (0.8, 0.077) and (0.8, 0.2) correspond to the band structure depicted in figure 3.

上文所述, 平均场参量的定义式是 $\langle C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma'} \rangle$, 当只保留 $i = j, \sigma = \sigma'$ 时, 平均场参量就是onsite U 项实空间中的参量 $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ 与 $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ 。我们知道顺磁, 铁磁与反铁磁可以通过动量空间平均场参数 $\langle \rho_q \rangle$ 来表示:

$$\begin{aligned} PM: \langle \rho_{\vec{q}=0, \sigma} \rangle &= \langle \rho_{\vec{q}=0, -\sigma} \rangle = m \\ PM: \langle \rho_{\vec{q}=0, \sigma} \rangle - \langle \rho_{\vec{q}=0, -\sigma} \rangle &\neq 0 \\ AFM: \langle \rho_{\vec{q}=(\pi, \pi), \sigma} \rangle - \langle \rho_{\vec{q}=(\pi, \pi), -\sigma} \rangle &\neq 0 \end{aligned} \quad (6)$$

并且, 实空间与动量空间的平均场参数有关联:

$$\langle \rho_q \rangle = \sum_i \langle n_i \rangle e^{iqr_i} \quad (7)$$

因此平均场可以做如下计算, 设定 $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ 与 $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ 为平均场参量, 自洽求解之后得到最终的值, 利用关系求解 $\langle \rho_q \rangle$, 利用上面的关系得到相图。

如果可以以 $\langle \rho_q \rangle$ 自然最好, 但是 $\mathbf{H}$ -wave并不支持这样的定义方法。实际上, $\mathbf{H}$ -wave对角化 $\mathbf{k}$ 空间需要先将实空间哈密顿量写作二费米子的形式, 再直接利用傅里叶变换到 $\mathbf{k}$ 空间的二费米子哈密顿量:

$$H_{HF} = \sum_{k\alpha\beta\sigma\sigma'} h_{\alpha\beta\sigma\sigma'}(k) c_{k\alpha\sigma'}^{\dagger} c_{k\beta\sigma'} \quad (8)$$

这样只要对角化指标 $(\alpha\beta\sigma\sigma')$ 下的关于 k 的小矩阵就可以了, 把原先关于 N_{site} 对角化变为 N_{site} 个 $(\alpha\beta\sigma\sigma')$ 的对角化, 这大大节省了计算量。代价是需要 k 是好量子数, 即所求解的basis为 $(k_1, k_2, \dots)$, 这时候 $\langle \rho_q \rangle$ 即

$$\left\langle (k_1, k_2, \dots) \left| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{k+\vec{q}, \sigma}^{\dagger} c_{k, \sigma} \right| (k_1, k_2, \dots) \right\rangle$$

要想非零只能 $q = 0$, 也就只能解出 $\langle \rho_{\vec{q}=0, \sigma} \rangle$, 即铁磁项。

如果想要算出反铁磁项几种方法可以尝试。第一种是在实空间做, 自行设定平均场参量 $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ 与 $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ 的值, 缺点是还是要对角化 N_{site} 矩阵迭代若干次, 计算量太大格点不能取多。第二种是扩大 k 空间需对角化矩阵的维数, 使得 $\langle \rho_q \rangle$ 非零, 对于给定的 $q(\pi, \pi)$ 可以定向扩胞。第三种或许可以借助 $\mathbf{H}$ -wave中定义的InterAll, 普遍的四费米子相互作用形式 $c_{i\sigma_1}^{\dagger} c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^{\dagger} c_{l\sigma_4}$, 认为 (i, j, k, l) 就是 k 空间的坐标, 缺点是需要根据晶格的几何与作用形式自行大改前面的参数。