

ANALISIS EXACTO Y DE MONTE CARLO DEL MODELO DE HUBBARD UNIDIMENSIONAL EN REDES FINITAS

L. Braunstein, R. Deza y A. Mijovilovich.

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad Nacional de Mar del Plata, Deán Funes 3350, 7800 Mar del Plata.*

Realizamos para el modelo de Hubbard unidimensional (una banda, repulsión en el sitio solamente) en los casos de banda semi- y cuarto- llena, un estudio detallado de las frecuencias con que cada estado en representación de sitio aparece en el "estado fundamental" para redes de hasta 8 sitios (que obtenemos con el "método de poblaciones", versión del Monte Carlo proyector), tanto a través de las distribuciones de impulsos y funciones de correlación de espines como (para las redes más pequeñas) por comparación directa con el cuadrado del módulo de las amplitudes correspondientes calculadas explícitamente a partir del ansatz de Bethe, luego de encontrar numéricamente los autovalores k y Λ . Se estudia la tendencia al límite termodinámico a través de las "densidades de estados" para redes finitas.

INTRODUCCION

Este trabajo es para nosotros la continuación del iniciado el año pasado [1]; sin embargo, durante el último año hemos visto renacer a nivel mundial [2-6] el interés por el análisis del modelo de Hubbard unidimensional y precisamente en el caso de redes finitas que había motivado independientemente nuestra curiosidad. También durante este año se instaló en nuestra universidad una microVax II con la que hemos realizado todos los cálculos de este trabajo. Por una parte, logramos realizar los cálculos esbozados en [1] para redes de hasta 100 sitios, logrando histogramas de la distribución de autovalores k y Λ que se comparan muy bien con las densidades de estados del límite termodinámico (los resultados son presentados en la Sección 1). Por la otra, implementamos programas de simulación basados en el método de poblaciones (una versión del Monte Carlo proyector) [8-9] con los que obtuvimos para redes de hasta 10 sitios valores bastante precisos de la energía del estado fundamental como función de la repulsión U en el sitio, y que se comparan muy bien con los exactos. Pero sin duda nuestra motivación fue desde el principio lograr por el método de Monte Carlo buenas estimaciones de la función de onda del estado fundamental (es por eso que nos abocamos el año pasado al análisis del ansatz de Bethe): tras los resultados obtenidos (que se muestran en la Sección 2) nos asiste la satisfacción de haber logrado nuestro objetivo para redes no extremadamente pequeñas. Antes de pasar a los resultados, repasemos brevemente las nociones básicas expuestas en [1]: el modelo

de Hubbard unidimensional (una banda, repulsión en el sitio solamente) está definido por el siguiente hamiltoniano en segunda cuantización: $H = -t \sum_{j,s} (C_{j+1,s}^\dagger C_{j,s} + C_{j,s}^\dagger C_{j+1,s}) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$, que supone N electrones (M de ellos con espín \downarrow) en un anillo de N_s sitios, en aproximación de ligadura fuerte. Es éste el modelo más tradicional de magnetismo itinerante y aunque su solución formal se conoce desde hace mucho tiempo [7] el interés se ha centrado siempre en el límite termodinámico, expresándose en el caso $N/N_s = 1$, $M/N_s = 1/2$ en términos de las siguientes densidades de estados:

$$\sigma(\Lambda) = 1/2\pi \int_0^\infty \cos(\omega\Lambda) J_0(\omega) d\omega / \cosh(1/4\omega U)$$

$$p(k) = 1/2\pi + 1/\pi \cos k \int_0^\infty \cos(\omega \sin k) J_0(\omega) d\omega / [1 + \exp(1/2\omega U)]$$

donde J_0 es una función Bessel; se encontró así una transición de Mott como función de repulsión U . Dado que nuestro objetivo no es deducir propiedades físicas sino probar métodos de Monte Carlo cuya limitación principal es siempre el tamaño de la red, necesitamos resolver las ecuaciones de Lieb y Wu en su forma original, discreta. Estas son:

$$F_i = N_s k_i - \sum_{\beta=1}^M \theta[2(\sin k_i - \Lambda_\beta)] - 2\pi I_i = 0, \quad i=1, \dots, N$$

con

$$-\pi \leq \theta(p) \equiv -2 \arctg(2p/U) \leq \pi$$

$$G_\alpha = \sum_{\beta=1}^M \theta(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta) - \sum_{j=1}^N \theta[2(\Lambda_\alpha - \text{scnk}_j)] - 2\pi J_\alpha = 0, \quad \alpha=1, \dots, M$$

donde $\{I_j\}$ y $\{J_\alpha\}$ son conjuntos de números cuánticos que identifican al estado, que es tal que en cada región definida por $1 \leq x_{Q1} \leq \dots \leq x_{QN} \leq N$, la amplitud correspondiente a espines hacia abajo en los sitios x_1, \dots, x_M y hacia arriba en los x_{M+1}, \dots, x_N (antisimetrizada en las primeras M y en las últimas N-M variables) es de la forma

$$f(x_1, \dots, x_M | x_{M+1}, \dots, x_N) = \sum_R [Q, R] \exp(i \sum k_{Rj} x_{Qj})$$

(conjetura de Bethe); aquí Q y R son permutaciones del conjunto $(1, \dots, N)$ y $[Q, R]$ son coeficientes.

Estas ecuaciones y los números I_j, J_α resultan de exigir a la solución ciertas condiciones de consistencia (que vienen de la condición de contorno periódica y del carácter fermiónico de las partículas interactuantes, y se traducen en relaciones entre los coeficientes $[Q, R]$); los Λ_α tienen la interpretación de estados con espín definido (por ejemplo, hacia abajo), como es fácil comprobar en el límite termodinámico. Se ha probado [7] que para el estado fundamental los números I_j van desde $(1-N)/2$ hasta $(N-1)/2$ y los J_α desde $(1-M)/2$ hasta $(M-1)/2$ (y serán enteros o semienteros dependiendo de si N o M son impares o pares): en este caso,

$$\sum_j k_j \equiv (\sum_j I_j + \sum_\alpha J_\alpha) / Ns = 0.$$

El método utilizado para la resolución de este sistema de ecuaciones trascendentes es el de Newton-Raphson, con resolución en cada iteración y por el método de eliminación de Gauss con pivoteo total del sistema lineal:

$$[\text{matriz Jacobiana}] \cdot [\text{variación del vector de soluciones}] = - [\text{función evaluada en la solución}].$$

Los elementos de la matriz Jacobiana son:

$$\partial F_i / \partial K_j = \{N_s + \sum_{\beta=1}^M 8U \cos k_j / [U^2 + 16(\text{scnk}_i - \Lambda_\beta)^2]\} \delta_{ij};$$

$$\partial F_i / \partial \Lambda_\beta = -8U / [U^2 + 16(\text{scnk}_i - \Lambda_\beta)^2];$$

$$\partial G_\alpha / \partial k_j = -8U \cos k_j / [U^2 + 16(\text{scnk}_j - \Lambda_\alpha)^2];$$

$$\partial G_\alpha / \partial L_\beta = \left\{ \sum_{j=1}^N 8U / [U^2 + 16(\text{scnk}_j - \Lambda_\alpha)^2] - \sum_{\gamma=1}^M 4U / [U^2 + 4(\Lambda_\alpha - \Lambda_\gamma)^2] \right\} \delta_{\alpha\beta} + 4U / [U^2 + 4(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta)^2] (1 - \delta_{\alpha\beta}).$$

1. Resolución numérica de las ecuaciones de Lieb y Wu y cálculo de las “densidades de estados”: Como dato ilustrativo sobre la primera incluimos gráficos de la variación de los autovalores k y Λ para $0 \leq U \leq 20$ en el caso $N_s = N = 2M = 10$ (Figs.1 y 2).

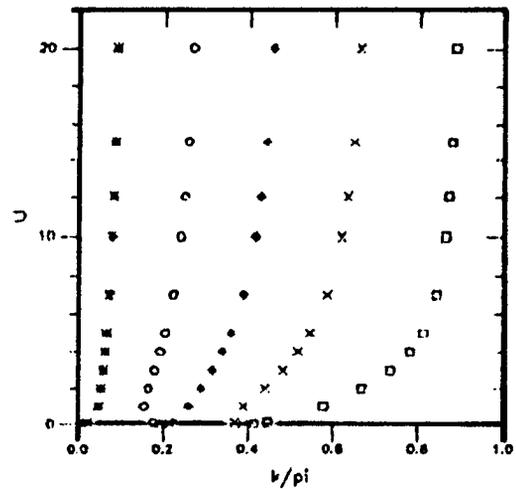


Fig. 1: k como función de U para 10 sitios. Resultados exactos obtenidos de las ecuaciones de Lieb y Wu.

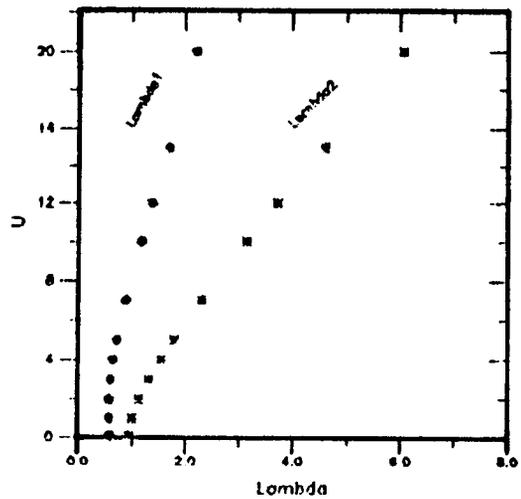
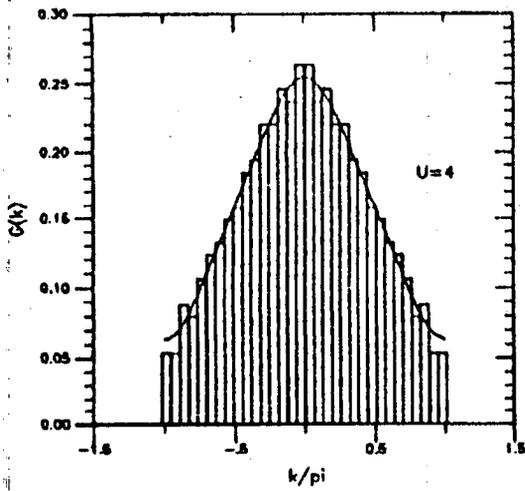
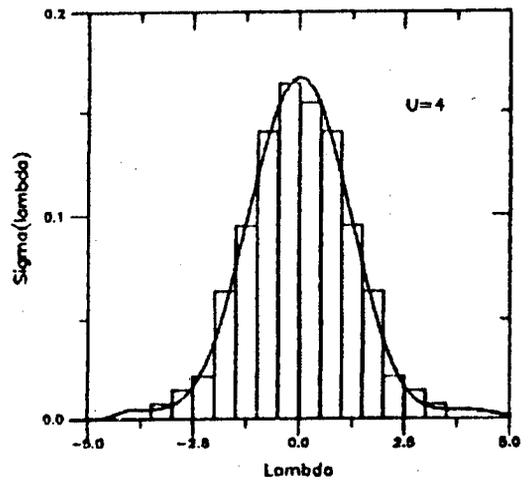


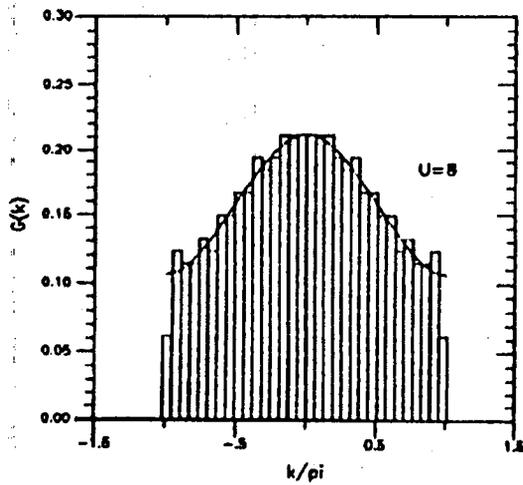
Fig. 2: Lambda como función de U para 10 sitios. Resultados exactos obtenidos de las ecuaciones de Lieb y Wu.



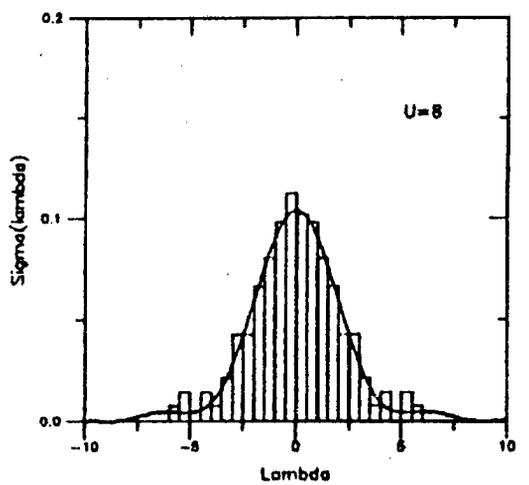
(a)



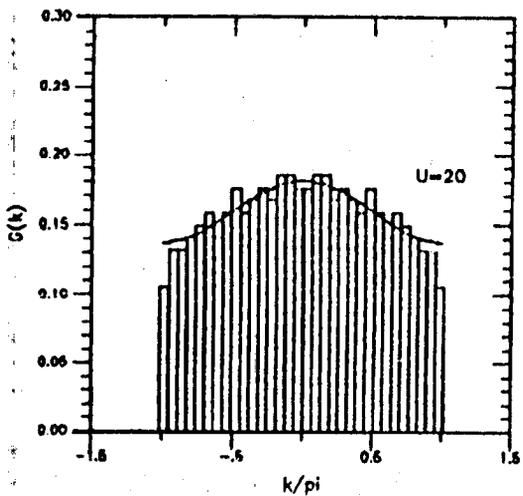
(a)



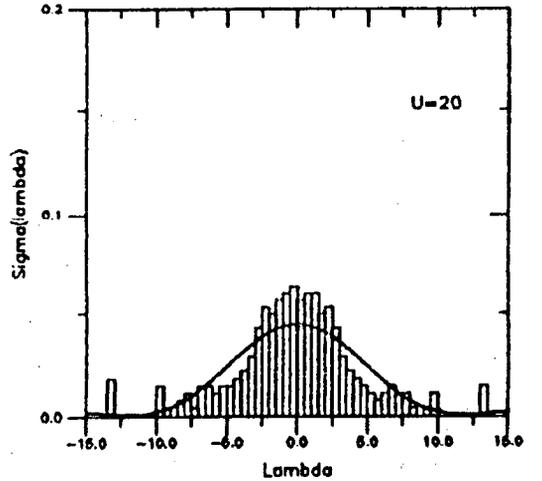
(b)



(b)



(c)



(c)

Fig. 3 a) b) y c): Densidad de estados para $U=4,6$ y 8 . Resultados discretos: histograma. Límite termodinámico: línea llena. Banda semillena.

Fig. 4 a) b) c) Densidad de estados para $U=4,6$ y 8 . Resultados discretos: histograma. Límite termodinámico. Banda semillena.

Realizamos histogramas (Figs.3 y 4) de estos autovaleores acumulando los datos obtenidos para redes con $90 \leq N_s \leq 100$, las que comparamos con las expresiones analíticas de las densidades de estados en banda semillena por Lieb y Wu [7], que ya hemos escrito.

2. Cálculo de Monte Carlo de energías y amplitudes del estado fundamental como función de U.

Primeramente daremos una breve descripción del método: 1) Dado cualquier estado de un sistema de muchos fermiones en la red (descrito por el conjunto de números de ocupación de sus diferentes variables de sitio y spin) implementamos de manera estocástica la acción de un operador de "evolución temporal" (tiempo Euclídeo) cuyo efecto para un "intervalo temporal" β suficientemente grande es proyectar el estado inicial sobre el autoestado de energía más baja. La manera en que simulamos esa evolución consiste en subdividir el intervalo $[0-\beta]$ en L "rodajas temporales" de espesor $\Delta\zeta$ tan pequeño como para aproximar $\exp(-\Delta\zeta.H) \approx \exp(-\Delta\zeta.H_1).\exp(-\Delta\zeta.H_2)$, siendo H_1 y H_2 sumas de términos mutuamente conmutantes. Para cada uno de estos términos (correspondientes a pequeños bloques) podemos calcular exactamente todos los elementos de matriz del "operador de evolución" asociado y asignar probabilidades de transición para simular la evolución completa. 2) El método estocástico se basa en la posibilidad de descomponer (bastante arbitrariamente) cualquier elemento de matriz cuántico como el producto de una probabilidad por un número que llamaremos "puntaje". Puede probarse que la distribución de probabilidad que da el mínimo error estadístico es la que asigna el mismo puntaje a todos los elementos de la matriz: esta observación es la base del llamado "método de poblaciones". En éste partimos de una dada población de estados que evolucionan individualmente de acuerdo con probabilidades de transición dadas. La población en la siguiente "rodaja temporal" será modificada como resultado de convertir a probabilidad (más propiamente, a frecuencia) el cociente entre el correspondiente puntaje y uno promedio.

Como ilustración sobre la precisión y exactitud de nuestros resultados de Monte Carlo comparamos la energía del estado fundamental por sitio (Fig.5) como función de U para $N_s=10$ con la que surge de evaluar para los k y Λ de la Fig.1 la expresión:

$$-(2/N_s) \sum_{j=1}^N \cos k_j.$$

Para evaluar la bondad de la aproximación obtenida a la función de onda del estado fundamental hemos calculado la distribución en impulsos y la función de correlación de espines para $N_s = 2, 4, 6, 8$ en el caso de banda semillena y para $N_s = 4$ y 8 en el cuarto llena (Figs.6 y 7). Incluimos con propósitos de comparación estimaciones de dichas magnitudes extraídas de las referencias [2-6]. El tiempo de CPU máximo utilizado (8 sitios, banda semillena, ~5000 estados, población inicial = 2000 config.) fue de aproximadamente 3 horas.

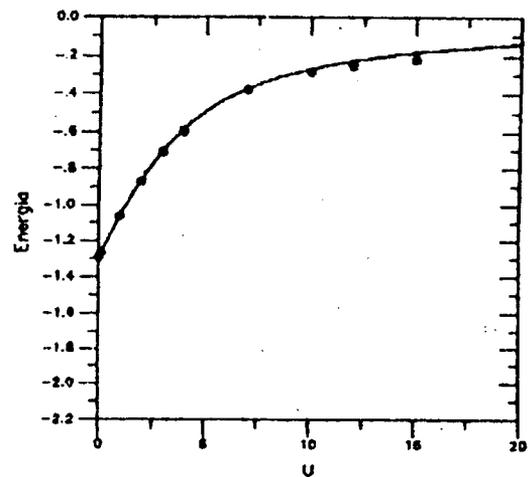


Fig. 5: Energía por sitio como F(U) para 10 sitios. Resultado exacto obtenido por el método de Lieb y Wu (línea llena) comparada con nuestros resultados de QMC (círculos cruzados).

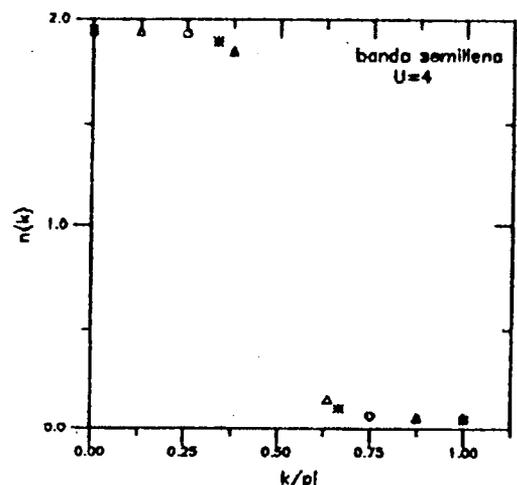


Fig. 6: Distribución de momentos. Triángulo lleno, círculo abierto, estrella, triángulo abierto: 2, 4, 6 y 8 sitios respectivamente.

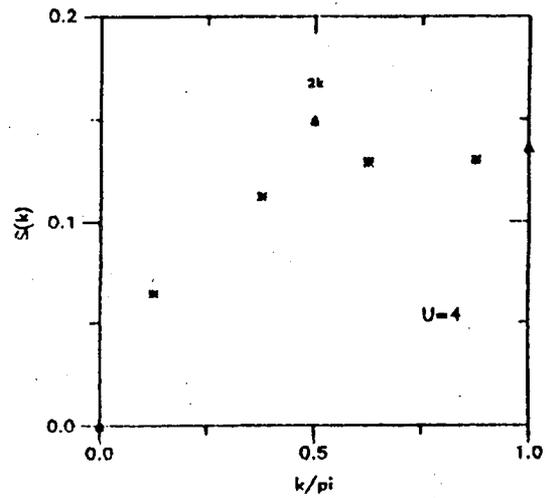
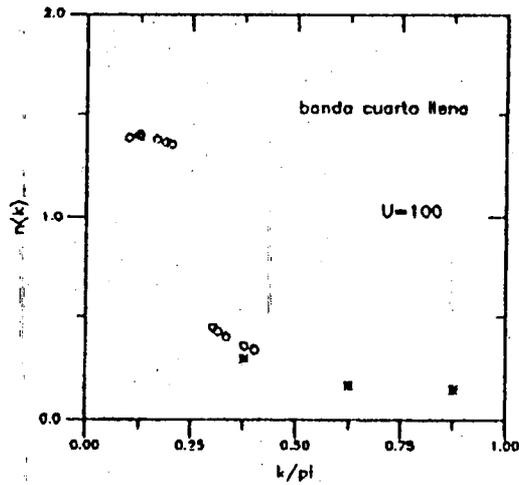
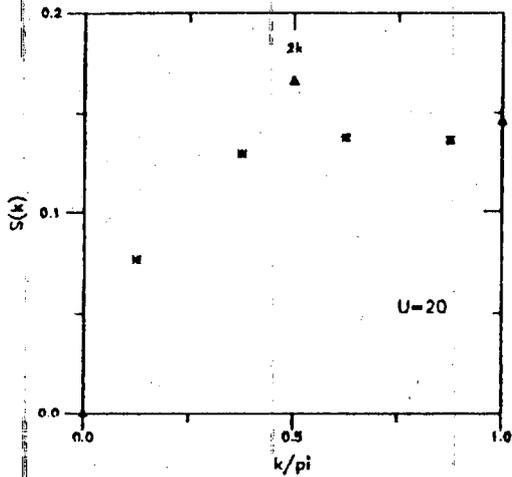
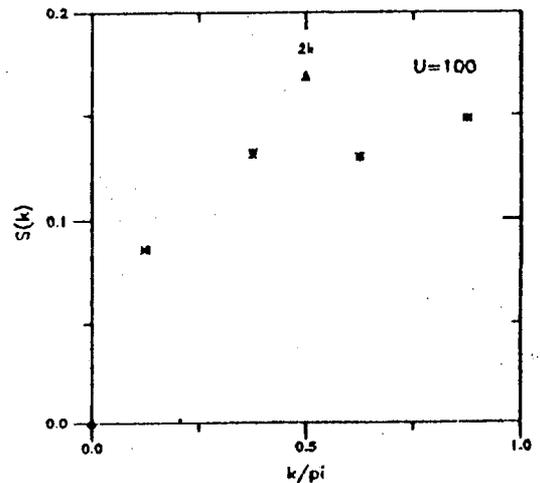


Fig. 7: Resultados obtenidos por Shiba en el límite $U \gg T$ (círculos abiertos) comparados con nuestros resultados de QMC para 8 sitios (estrellas).

(a)



(b)



(c)

Fig. 8 a) b) y c): Función de correlación de espines obtenidos con nuestros resultados de QMC en el caso de banda cuarto llena para 4 sitios (triángulos llenos) y 8 sitios (estrellas).

RECONOCIMIENTOS:

CONCLUSIONES

Los resultados de los análisis efectuados hasta el momento sobre el estado fundamental del modelo unidimensional nos han generado cierta confianza en el método usado. Intentamos por una parte incluir en esta comparación el análisis de las excitaciones más bajas (partiendo de un estado inicial ortogonal al fundamental) y por la otra abordar el análisis de modelos en más de una dimensión, comenzando por un sistema de dos cadenas [9].

Los autores deseamos agradecer al personal del Centro de Cómputos de la UNMdP y en especial a su Director por su cada vez más decidido apoyo a las actividades de investigación.

R.D. desea también agradecer al CONICET por el contrato SAPIU del que es beneficiario desde mayo de 1989, con cuyo monto solventa los gastos de fotocopias y la suscripción al Physical Review B (1ros. de mes), única manera que tenemos de estar relativamente al día en el tema (además de los pre-prints).

REFERENCIAS

- [1] L. Braunstein, R. Deza y A. Mijovilovich: Anales AFA, Vol I, 276 (1989)
- [2] J. Carmelo y D. Baeriswyl: Phys. Rev. B37, 7541(88) e Int. J. Mod. Phys. B1, 1013 (88)
- [3] S. Sorella, E. Tosatti, S. Baroni, R. Car y M. Parrinello: Int. J. Mod. Phys. B1, 993 (88)
S. Sorella, S. Baroni, R. Car y M. Parrinello: Europhys. Lett. 8, 663(89)
- [4] C. Bourbonnais, H. Néglise, A. Reid y A.M.S. Tremblay: Phys. Rev. B40, 2297 (89)
- [5] W. von der Linden, I. Morgenstern y H. de Raedt: Phys. Rev. B41, 4669 (90)
- [6] M. Ogata y H. Shiba: Phys. Rev. B41, 2326 (90)
- [7] E.L. Lieb y F.Y. Wu: Phys. Rev. Lett. 20, 1445 (68); C.N. Yang: Phys. Rev. Lett. 19, 1312 (67)
- [8] R. Blankenbecler y R. Sugar: Phys. Rev. D27, 1304 (83)
- [9] D. Kung, D. Dahl, R. Blankenbecler, R. Deza y J. Fulco: Phys. Rev. B32, 2022 (85)