Low Temperature Lanczos Method und Anwendung auf Cluster Perturbation Theory

M. Aichhorn, M. Daghofer, H.G. Evertz, W. von der Linden

Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Graz, Petersgasse 16, A-8010 Graz, Austria

Motivation

Bei numerischen Studien von stark korrelierter Elektronensystemen spielt neben vielen anderen Methoden die Exakte Diagonalisierung eine große Rolle. Die **Finite Temperature Lanczos Method** (FTLM), vorgeschlagen von Jaklič und Prelovšek[2], stellt eine Erweiterung der Grundzustandsmethoden auf die Berechnung von thermodynamischen Größen dar und wurde sehr erfolgreich auf verschiedene Modell in Kupraten, Vanadaten, etc. angewandt. Allerdings sind tiefe Temperaturen nur mit hohem Aufwand zugänglich, was die Anwendbarkeit vor allem für die Berechnung von dynamischen Korrelationsfunktionen einschränkt. Wir präsentieren Modifikationen der Methode für tiefe Temperaturen und neben Beispielrechnungen für das eindimensionale Hubbard Modell auch die Anwendung des Algorithmus auf **Cluster Perturbation Theory (CPT)**[3].

Finite Temperature Lanczos Method für statische Erwartungswerte

Bestimmung einer vollständigen Eigenbasis des Hamiltonian unmöglich ($N \gg 1$) $\Rightarrow$ andere Auswertung.
Thermodynamischer Erwartungswert eines Operators $\mathcal{O}$ durch **random sampling**:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_R = \frac{1}{Z}\frac{1}{R}\sum_r^R \langle r|\mathcal{O}e^{-\beta H}|r\rangle, \quad Z_R = \frac{1}{R}\sum_r^R \langle r|e^{-\beta H}|r\rangle \tag{1}$$

Einschieben einer Lanczos Eigenbasis berechnet mit Startvektor $|r\rangle$ $\Rightarrow$ FTLM-Approximation:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_R = \frac{1}{Z}\frac{1}{R}\sum_r^R\sum_i^M e^{-\beta\varepsilon_i^{(r)}}\langle r|\Psi_i^{(r)}\rangle\langle\Psi_i^{(r)}|\mathcal{O}|r\rangle, \tag{2a}$$

$$Z_R = \frac{1}{R}\sum_r^R\sum_i^M |\langle r|\Psi_i^{(r)}\rangle|^2 e^{-\beta\varepsilon_i^{(r)}} \tag{2b}$$

R ... Anzahl der Zufallsvektoren.
M ... Anzahl der Lanczos Iterationen.

Grenzfälle – FTLM

Statistischer Fehler bei random sampling:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_R = \langle \mathcal{O} \rangle + O(1/\sqrt{RN_{\text{eff}}}) \tag{3}$$

N_{eff} ... Anzahl der Zustände, die effektive zu den Erwartungswerten beitragen.

Hohe Temperaturen: N_{eff} groß($N_{\text{eff}} = N$ für $T = \infty$)
$\Rightarrow$Bereits mit wenigen Zufallsvektoren auskonvergierte Resultate.

Tiefe Temperaturen, $T \to 0$: Nur Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ trägt bei in Gleichung (2a):

$$\langle \mathcal{O} \rangle_R = \frac{\sum_r^R \langle\Psi_0|\mathcal{O}|r\rangle\langle r|\Psi_0\rangle}{\sum_r^R \langle\Psi_0|r\rangle\langle r|\Psi_0\rangle} \tag{4}$$

Exaktes Resultat $\langle\Psi_0|\mathcal{O}|\Psi_0\rangle$ erst für $R \to \infty$, erst dann ist die Summe über $|r\rangle$ identisch zum Einheitsoperator!

Tiefe Temperaturen nur schwer erreichbar!

ABER: Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ wird für jedes $|r\rangle$ exakt berechnet!

Modifikation für tiefe Temperaturen – LTLM Approximation

Ausgangspunkt: Symmetrisierter Erwartunswert:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_R = \frac{1}{Z}\frac{1}{R}\sum_r^R \langle r|e^{-\frac{1}{2}\beta H}\mathcal{O}e^{-\frac{1}{2}\beta H}|r\rangle. \tag{5}$$

Einschieben zweier Lanczos Eigenbasen $\Rightarrow$ LTLM-Approximation:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_R = \frac{1}{Z}\frac{1}{R}\sum_r^R\sum_{i,l}^M e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_i^{(r)}+\varepsilon_l^{(r)})}\times \langle r|\Psi_l^{(r)}\rangle\langle\Psi_l^{(r)}|\mathcal{O}|\Psi_i^{(r)}\rangle\langle\Psi_i^{(r)}|r\rangle \tag{6}$$

mit der Zustandssumme Z aus Gleichung (2b).

Grenzfälle – LTLM

Hohe Temperaturen: Gleiches Verhalten wie bei FTLM.

Tiefe Temperaturen, $T \to 0$: Nur Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ trägt bei in Gleichung (6):

$$\langle \mathcal{O} \rangle_R = \frac{\sum_r^R \langle\Psi_0|r\rangle\langle r|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|\mathcal{O}|\Psi_0\rangle}{\sum_r^R \langle\Psi_0|r\rangle\langle r|\Psi_0\rangle} \tag{7}$$

Summe über r hebt sich exakt weg.
$\Rightarrow$Exaktes Resultat $\langle\Psi_0|\mathcal{O}|\Psi_0\rangle$ bereits mit $R = 1$!

Resultate – Statische Größen

Testmodell: 1D Hubbard Modell, 12 Plätze, $U = 8t$, $n = 1$.
Anzahl der Zufallsvektoren $R = 25$.

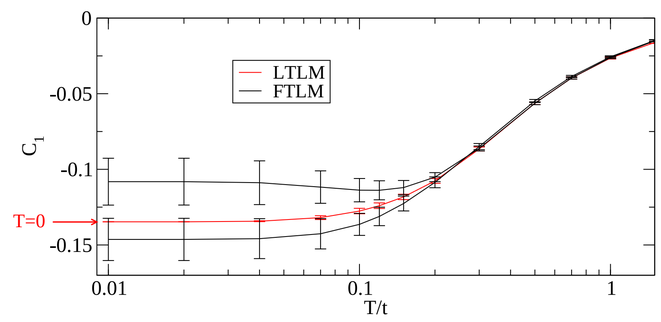

Fig.1: Spin-Spin-Korrelationsfunktion $C_1 = \langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$.

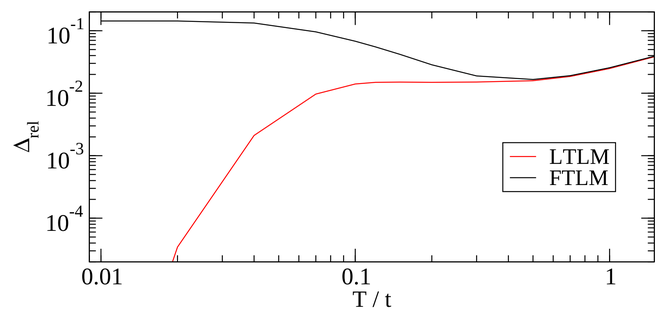

Fig.2: Relativer statistischer Fehler $\Delta_{\text{rel}} = \frac{\Delta C_1}{C_1}$. Bei $T = 0.01t$ beträgt der LTLM-Fehler $\Delta_{\text{rel}} = 10^{-8}$.
Fehler bestimmt durch **Jackknife** Analyse.

Bei hohen Temperaturen gleiches Verhalten der beiden Methoden, bei tiefen Temperaturen Konvergenz nur für LTLM.

Dynamische Korrelationen $C(t) = \langle A(t)B \rangle$

FTLM Approximation

$$C_R(t) = \frac{1}{Z}\frac{1}{R}\sum_r^R\sum_{i,j}^M e^{-\beta\varepsilon_i^{(r)}}e^{-i(\tilde{\varepsilon}_j^{(r)}-\varepsilon_i^{(r)})t}\times \langle r|\Psi_i^{(r)}\rangle\langle\Psi_i^{(r)}|A|\tilde{\Psi}_j^{(r)}\rangle\langle\tilde{\Psi}_j^{(r)}|B|r\rangle \tag{8}$$

Eigenbasis $|\tilde{\Psi}_j^{(r)}\rangle$ erzeugt mit Startvektor $|\tilde{\Phi}_0^{(r)}\rangle \propto B|r\rangle$.

Diese Wahl maximiert das Matrixelement $\langle\tilde{\Psi}_j^{(r)}|B|r\rangle$ (eine Art 'importance sampling').

Korrektes Grundzustandsresultat bei $R \to \infty$.

LTLM Approximation

Ausgangspunkt: Symmetrisierter Erwartungswert

$$C_R(t) = \frac{1}{Z}\frac{1}{R}\sum_r^R\sum_{ijl}^M e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon_i^{(r)}+\varepsilon_l^{(r)})}e^{-i(\tilde{\varepsilon}_j^{(r)}-\frac{1}{2}(\varepsilon_i^{(r)}+\varepsilon_l^{(r)}))t} \times \langle r|\Psi_l^r\rangle\langle\Psi_l^{(r)}|A|\tilde{\Psi}_j^{(r,i)}\rangle\langle\tilde{\Psi}_j^{(r,i)}|B|\Psi_i^{(r)}\rangle\langle\Psi_i^{(r)}|r\rangle \tag{9}$$

Eigenbasen $|\tilde{\Psi}_j^{(r,i)}\rangle$ erzeugt mit Startvektoren $|\tilde{\Phi}_0^{(r,i)}\rangle \propto B|\Psi_i^{(r)}\rangle$.

Korrektes Grundzustandsresultat bei $R = 1$.

Reduktion des numerischen Aufwands bei LTLM:

Bei tiefen Temperaturen Einschränkung auf tiefstliegende M_{cut} Zustände unterhalb der cut-off Energie E_{cut}:

$$e^{-\beta_{cut}(E_{cut}-E_0)} < \varepsilon_{cut} \tag{10}$$

Einschränkung der Summen über i und l in Gleichung (9) auf M_{cut}.
$\Rightarrow$Nur M_{cut} zweite Lanczos-Läufe notwendig anstatt M.

Resultate – Dynamische Größen

1D Hubbard Modell, 12 Plätze, $U = 6t$, $n = 1$.
Optische Leitfähigkeit:

$$\sigma^{reg}(\omega) = \frac{1-e^{-\beta\omega}}{\omega}\text{Re}\int_0^\infty dt\, e^{i\omega t}\langle j(t)j\rangle, \tag{11}$$

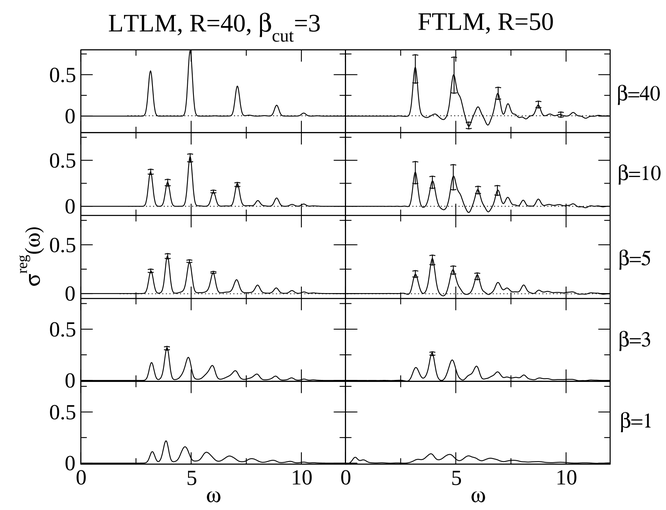

Fig.3: Optische Leitfähigkeit für verschiedene Temperaturen. Abweichung bei $\beta = 1$ wegen systematischem Fehler von LTLM ($\beta_{cut} = 3$)

Cluster Perturbation Theory

- Berechnung von $G_{ij}(\omega)$ im für alle Paare (i, j) im Cluster.
- Kopplung der Cluster in Strong Coupling Perturbation Theory.

Viele Berechnungen bei großen Hilberträumen notwendig.
Kombination FTLM+LTLM ermöglicht diese Rechnungen.

Resultate in 1D

Cluster mit 8 Plätzen, $U = 4t$, $n = 1$.

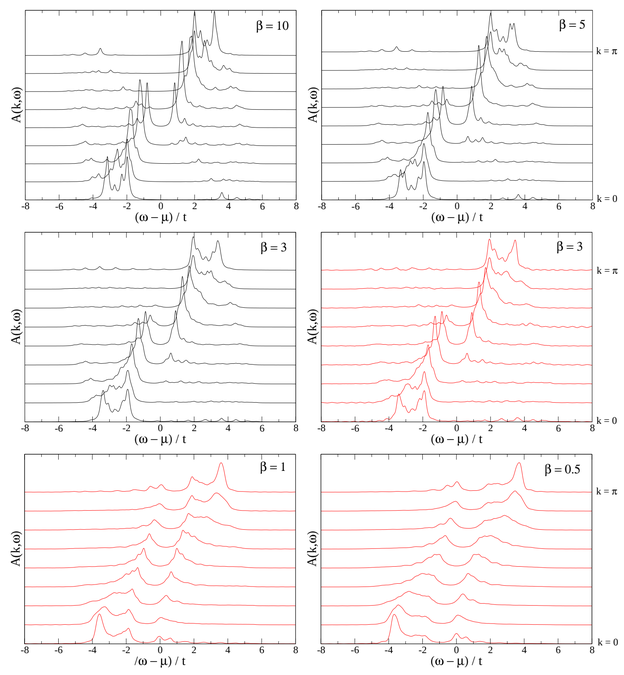

Fig.4: Spektralfunktion $A(k, \omega)$ für verschieden Temperaturen.
Schwarze Plots: LTLM Algorithmus
Rote Plots: FTLM Algorithmus
Bei $\beta = 3$ liefern beide Algorithmen dasselbe Spektrum (Überlappbereich).

Zusammenfassung

- LTLM ermöglicht schnelle Berechnungen von statischen und dynamischen Größen bei tiefen Temperaturen.
- Kombination LTLM+FTLM ermöglicht Berechnungen bei jeder beliebigen Temperatur mit geringem numerischen Aufwand.

Referenzen

[1] M. Aichhorn, M. Daghofer, H.G Evertz, and W. von der Linden, cond-mat/0211165.

[2] J. Jaklič and P. Prelovšek, Phys. Rev. B **49**, 5065 (1994); for a review see Adv. Phys. **49**, 1 (2000).

[3] D. Sénéchal, D. Pérez, and M. Pioro-Ladrière, Phys. Rev. Lett. **84**, 522 (2000); D. Sénéchal, D. Pérez, and D. Plouffe, Phys. Rev. B **66**, 075129 (2002).