



Exact solutions for strongly correlated electron systems

Egzakt megoldások erősen korrelált elektronrendszerekre

Ph.D. értekezés tézisei

Kovács Endre

Debrecen, 2005

Készült:

A Debreceni Egyetem Elméleti Fizikai Tanszékén

Témavezető:

Dr. Gulácsi Zsolt

1. Introduction

A quantum-mechanical many-particle system - if the range of the energy-scale is meV-10eV and therefore belongs to the field of solid-state physics - can be described by the Schrödinger equation. However, in the great majority of the cases, the precise solution is possible only in principle, because the many-particle Schrödinger equation can be solved analytically for only a few system, so approximations must often be applied. For this the interactions and correlation-effects generally have to be weak. At the same time there are physically interesting systems, where the interactions are not weak at all and the correlation-effects are significant. In these cases the approximations often unreliable and they may provide contradictory results. But in modern condensed-matter physics the strongly interacting and strongly correlated systems are studied most intensively, as in these systems extremely interesting phenomena were observed like high-temperature superconductivity, heavy-fermions, metal-insulator transitions, etc.

Although due to the rapid development of computers the approximation and simulation methods give more and more precise results in some areas of the phase-diagram, exact solutions are still very important, because these serves as guidelines for the evaluation of the models, to test simulation programs, to examine the thermodynamical limit (which can hardly be treated numerically) to detect qualitative changes of the behaviour. Furthermore there is an increasing variety of experimental situations when describing small number of particles is very important to evaluate experimental results (quantum dots, nanophysics and optical lattices, etc...).

However, the majority of known exact methods to solve strongly correlated systems can be applied only in one dimension (e.g. Bethe Ansatz).

Starting from these facts, my thesis introduce nontraditional, model-independent methods with which new results are deduced without any approximation for strongly correlated systems.

2. Summary of results and conclusions

My results can be summarized in the following points:

- I found a new method that is based on an explicitly given unitary transformation which allows the rigorous deduction of new phase diagram domains starting from known ground state solutions of a given model. The method is not model-dependent and can be applied for arbitrary dimensions.
- I applied this method to find new stable spin-density wave, charge-density wave, ferromagnetic and a paramagnetic insulator domains of different extended Hubbard type of models.
- I found an other new method which allows the exact deduction of ground state wave functions for few particles in lattice models. The method is in principle model-independent and based on the symmetry features of the ground state, the procedure drives the description into a small subspace of the full Hilbert-space, where the ground state is located.
- By this method I obtained exact results for the ground state of the t-J model in one dimension for small number of particles. In case of $N_p = 2$ particles I gave the ground state energy and wave function for arbitrary values of the coupling constant $J/t = j \geq 0$ and arbitrary lattice size, which means that I gave an algorithm to write the algebraic equation system which gives the solution. In the general Hilbert space if the number of sites is N , the number of equations would be N^2 , but using my method there are only $N/2$ equations. I got some interesting informations about the two-particle case: The $j = 2$ point is a very special point in the phase diagram since in this point the one dimensional model can be solved by Bethe Ansatz. In this

point the contribution of the local particle configurations in the ground state wave function are all the same, i.e. independent from the distances of the particles. Outside the $j = 2$ point an effective interaction appears, which is attractive if $j > 2$ and repulsive if $j < 2$.

- I gave the description of a system of four electrons up to eight sites. In the $j > 2$ case an effective attraction appears between the particles, but it creates not electron-pairs but groups of four particles, so it suggest phase-separation. If j is large, the ground state of the t-J model is totally different from the Hubbard model's ground state, because in case of the Hubbard model any kind of phase separation was not observed

- I applied my method to solve the problem of an arbitrary large two-leg Hubbard ladder taken with periodic boundary conditions and containing $N_p = 4$ electrons. The method leads for the singlet state to nine analytic linear and coupled closed system of equations which provides the ground state wave function and ground state energy. I presented how the ground state energy depends on the interaction and calculated several correlation functions for a ladder consist of $N = 28$ lattice sites. In this case the dimension of the full Hilbert space is 142884, but with our method we had to treat only an 1446 dimensional subspace.

- I presented exact analytical results describing the ground state of the two dimensional Hubbard model taken on an $L \times L = N = 16$ square lattice (and periodic boundary conditions in both directions), containing $N_p = 4$ particles. The full Hilbert space of this problem has 14400 dimension but I managed to write a closed system of 85 linear equations, whose solution provides the ground state energy and wave-function as well as some excited states. The deduced explicit eigenstates characterize also other properties of the spectrum: i) The large number of eigenstates which remain eigenstates also of the non-interacting

Hamiltonian shows why weak coupling expansions often provide a good approximation for the Hubbard model at intermediate coupling. ii) Zero energy eigenstates of the kinetic energy term which are eigenstates of the Hamiltonian as well show how energy increasing double occupancies can be avoided providing a possible support for the kinetic energy driven superconductivity. iii) Low energy eigenstates of the kinetic energy term which completely avoid double occupancy emphasize potentially new pairing possibilities in the low energy part of the spectrum in the context of the kinetic energy driven superconductivity.

1. Bevezetés

Egy kvantummechanikai sokrészecskés rendszer, ha jellemző energiaskálája meV és 10eV energiatartományba esik és ezáltal a szilárdtestfizika tárgykörébe tartozik, általában a Schrödinger-egyenlettel leírható. A pontos megoldás azonban az esetek nagy többségében csak elvi lehetőség, mivel a Schrödinger-egyenlet sok részecske jelenlétében kevés rendszerre oldható meg analitikusan, ezért igen gyakran közelítéseket kell alkalmazni. Ehhez általában az szükséges, hogy a kölcsönhatások gyengék legyenek és a korrelációs hatások ne legyenek hangsúlyozottak. Vannak viszont olyan fizikailag érdekes rendszerek, ahol a kölcsönhatások egyáltalán nem gyengék, a korrelációs hatások nagyon erősek. Ezekben az esetekben a közelítések sokszor megbízhatatlanok, előfordul, hogy egymással ellenkező eredményeket is adnak. Napjaink szilárdtestfizikájában éppen az erősen kölcsönható és erősen korrelált rendszerek a legélénkebben tanulmányozottak, mivel ezekben igen érdekes jelenségek tapasztalhatóak, például magas hőmérsékletű szupra-vezetés, nehézfermionos viselkedés, fém-szigetelő átmenet, stb. Bár az utóbbi időben a számítógépek rohamos fejlődése miatt a közelítő és szimulációs módszerek egyre pontosabb eredményeket adnak a fázisdiagram bizonyos területein, a pontos megoldásoknak még így is nagy jelentőségük van. Ennek oka az, hogy a pontos eredmények támpontot adnak modellek kiértékelésére, szimulációs programok tesztelésére, termodinamikai határeset tárgyalására (amely numerikus úton nehezen megközelíthető), továbbá kvalitásbeli viselkedésváltozás észlelésére, vagy akár olyan lényeges jellemzők kiemelésére, amelyek a numerikus feldolgozás hatékonyságát nagymértékben megnövelik. Ezenfelül mind gyakrabban találkozunk olyan kísérleti szituációkkal, amikor kis számú részecske viselkedésének pontos leírása és jellemzése a kísérletek kiértékelése szempontjából nagyon fontos

(kvantum-dotok, nanofizika, optikai rácsok, stb.). Azonban az erősen kölcsönható rendszerekre eddig ismert egzakt megoldási módszerek nagyrésze csak egy dimenzióban alkalmazható (pl. Bethe Ansatz).

Ezen megfontolásokból kiindulva az értekezés olyan nemtricionális módszereket tárgyal, amelyek segítségével közelítésmentes eredmények vezethetők le erősen kölcsönható és erősen korrelált sokrészecskés rendszerekre dimenziótól függetlenül.

2. Eredmények

Az eredményeim a következő pontokban foglalhatók össze:

- Egy konkrét, explicit megadott unitér transzformáción alapuló módszert találtunk, amely segítségével ismert alapállapot hullámfüggvényekből új alapállapot fázisdiagramm-tartományokat származtathatunk. A módszer elvileg független a modelltől és tetszőleges dimenzióban alkalmazható.
- Ezzel a módszerrel új spinsűrűség-hullám, töltéssűrűség-hullám, ferromágneses és paramágneses szigetelő tartományokat mutattam ki kiterjesztett Hubbard típusú modellek esetében.
- Egy új, a fentitől különböző, modellfüggetlen módszert dolgoztam ki sokrészecskés rendszerek alacsonykoncentrációs esetének egzakt tárgyalására. A módszer periodikus határfeltételek esetén az alapállapot szimmetria-tulajdonságainak segítségével a probléma teljes Hilbert-terének dimenziójához képest nagyságrendekkel kisebb dimenziójú altérbe szorítja be a számolást, abba az altérbe, amelyikben az alapállapot található.

- A bemutatott módszerrel először az egydimenziós t-J modell alapállapotára kaptam egzakt eredményeket. Két részecske esetében megadtam az alapállapotot, azaz egy algoritmust, amellyel tetszőleges rácsméretre fel lehet írni az alapállapotot szolgáltató lineáris egyenletrendszer, és az a teljes $J/t = j \geq 0$ paraméterterben érvényes lesz. Általánosan N rácspontra ez az egyenletrendszer N^2 darab egyenletből állna, azonban a módszeremmel a feladat megoldásához elég $N/2$ egyenletet kezelni. Már a kétrészecskés esetben is érdekes eredményeket kaptam: a $j = 2$ pontban, ahol az egydimenziós t-J model a Bethe-Ansatz-al is megoldható, a különböző lokális részecske-konfigurációk járuléka az alapállapoti hullámfüggvényben egyforma, azaz nem függ a részecskék távolságától. A $j = 2$ ponton kívül egy effektív kölcsönhatás tapasztalható, amely a $j > 2$ esetben vonzó, a $j < 2$ esetben pedig taszító jellegű.
- Négy elektronra nyolc rácspontig adtam meg a t-J modell megoldását. A $j > 2$ esetben vonzó effektív kölcsönhatás figyelhető meg az elektronok között, de ez nem elektron-párokat hoz létre, hanem egy helyre csoportosítja az összes elektront, ami fázisszeparációra utal. Ebből is látható, hogy nagy j -re a t-J modell alapállapota teljesen különbözik a Hubbard modellétől, mert utóbbi esetében semmiféle fázisszeparációt nem figyeltek meg.
- A módszert a kétszárú Hubbard-létrára alkalmaztam abban az esetben, amikor az elektronok száma négy. Erre a rendszerre sikerült felírni egy kilenc lineáris egyenletből álló csatolt zárt egyenletrendszert, amely legkisebb energiájú megoldása szolgáltatja az alapállapoti energiát és hullámfüggvényt. Egy $N = 28$ rácspontból álló létrára kiszámítottam, hogy függ az alapállapoti energia a csatolási állandótól, majd korrelációs függvényeket

számoltam. Ebben az esetben a teljes Hilbert tér 142884 dimenziós, de a módszerem segítségével az alapállapotot egy 1446 dimenziós altérbe sikerült beszorítani.

- Új eredményeket kaptam a négy részecskét tartalmazó két dimenziós Hubbard modellre egy $L \times L = N = 16$ rácspontot tartalmazó négyzet alakú rácstra. A teljes Hilbert tér 14400 dimenziós lenne, ezzel szemben a fentebb említett módszerrel felírtunk egy 85 egyenletből álló egyenletrendszert, amely tartalmazza az alapállapotot, továbbá gerjesztett állapotokat is szolgáltat. Az explicite megadott sajátállapotok segítségével jellemeztem a spektrumot: i) Az a tény, hogy nagyszámú olyan sajátállapot van, amely egyben a nemkölcönható Hamilton operátornak is sajátállapota, megmagyarázza, hogy miért olyan jók a csatolási állandók kis értékeire felírt sorfejtések azok közepesen nagy értékeire a Hubbard modell esetében. ii) A kinetikus energia azon nulla sajátértékű sajátállapotai, amelyek a teljes Hamilton operátornak is sajátállapotai egyben, azt mutatják meg, hogyan kerülhetők el az energiaigényes duplán betöltött csomópontok, ez pedig a kinetikus energia által vezérelt szupravezetést (kinetic energy driven superconductivity) támaszthatja alá. iii) A kinetikus energia olyan alacsony energiájú sajátállapotai, amelyekben egyáltalán nincsenek duplán betöltött csomópontok, egy új párképződési mechanizmust jelenthetnek a spektrum alacsony energiájú részén a kinetikus energia által vezérelt szupravezetés területén.

3. List of publications

A tézisek alapjául szolgáló közlemények

1. Endre Kovács, Zsolt Gulácsi, Phase diagram regions deduced for strongly correlated systems via unitary transformation, Phil. Mag. B, **81** (2001) 341-358.
2. Endre Kovács, Zsolt Gulácsi, Study of the t-J model in the low-density limit Phil. Mag. B, **81**, (2001) 1557-1564
3. Endre Kovács, Zsolt Gulácsi, Exact ground states for the four electron problem in a Hubbard ladder, Phil. Mag. B, közlésre elfogadva
4. Endre Kovács, Zsolt Gulácsi, Exact ground states for the four electron problem in a two-dimensional finite Hubbard square system, Phil. Mag. B, közlésre elfogadva
5. Endre Kovács, Zsolt Gulácsi, Four electrons in a two-leg Hubbard ladder: Exact ground states, elküldve: J. Phys. A: Math. Gen.

Posters

Poszterek

1. "Exact wave functions for four electrons in the Hubbard ladder"
Third Research Workshop and Graduate School on Physics and Chemistry of Quantum Systems (Debrecen, Hungary, 14-18 May. 2001).

2. “ $T = 0$ solutions of the Hubbard model “ Third Summer School in Strongly Correlated Electron Systems (Debrecen, Hungary, 5-11 Sept. 2004.)