

UN METODO PARA CALCULAR LAS SOLUCIONES DEL MODELO DE HUBBARD UNIDIMENSIONAL EN EL CASO DE UN NUMERO FINITO DE SITIOS

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

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata, Deán Funes 3350, 7600 Mar del Plata

Presentamos aquí los primeros resultados de un esquema de cálculo que permite resolver numéricamente las conocidas ecuaciones trascendentes de Lieb y Wu (que determinaron los valores de $k_1, \dots, k_N, L_1, \dots, L_M$ que hacen a una función de onda de la forma conjeturada por Bethe un autoestado del hamiltoniano de Hubbard unidimensional, para cualquier valor de la repulsión electrostática, U en un mismo sitio y de los números N_s de sitios, N de electrones y M de espines hacia abajo) sin pasar al límite $N_s \rightarrow \infty$ con N/N_s y M/N_s fijos. El interés de este cálculo está en obtener números "exactos" con los cuales contrastar resultados de Monte Carlo cuántico. El método implementado es del tipo Newton-Raphson, que se encuentra que no converge para ningún valor de U , al menos en el caso $N_s = N = 2M = 2$. No obstante podemos encontrar los autovalores que corresponden al estado fundamental con precisión arbitraria, observando la tendencia de las "soluciones" del método luego de unas pocas iteraciones a partir de un conjunto propuesto de valores. Estos autovalores y la energía del estado fundamental obtenida a partir de ellos se comparan con los resultantes de una diagonalización exacta en el caso mencionado.

INTRODUCCION

El estudio del estado fundamental y excitaciones más bajas de diversas extensiones del modelo de Hubbard en 1, 2 y 3 dimensiones, como así también de su límite para $U \rightarrow \infty$ en banda semillena (el modelo cuántico de Heisenberg) ha cobrado nuevo impulso por el interés en explicar el mecanismo que da origen a la superconductividad a temperaturas superiores a 100 K en perovskitas que contienen óxidos de cobre.

Esta superconductividad de alta temperatura crítica parece ser de tipo singulete como en el caso BCS y se ha asociado con la presencia de cierta estructura magnética (posiblemente antiferromagnética, aunque más probablemente corresponda a un estado menos ordenado, tipo RVB). También se ha observado que la falta de estequiometría de oxígeno tiene un rol importante dado que las vacancias de este elemento introducen una cierta concentración de huecos, y se piensa que la clave del mecanismo está en la dinámica de estos huecos en los planos CuO_2 de la perovskita. Para estudiar esta dinámica se han propuesto diversas extensiones del modelo de Hubbard en 2 dimensiones.

Si bien es cierto que la simulación directa de sistemas fermiónicos en 2 y 3 dimensiones ha tenido poco éxito hasta el momento (una excepción es el caso de 2 cadenas³), no está probado que sea imposible, y es nuestra intención dedicarnos a la aplicación de técnicas de Monte Carlo cuántico para sis-

temas fermiónicos en más de 1 dimensión apenas se instale el sistema MICROVAX 2 en Mar del Plata. En este programa, y considerando el interés del modelo de Hubbard, conviene tener números "exactos" con los que podamos probar nuestros métodos de Monte Carlo en 1 dimensión.

LAS ECUACIONES DE LIEB Y WU

Aunque la solución formal del modelo de Hubbard unidimensional se conoce desde hace mucho tiempo¹, el interés se ha centrado siempre en el límite termodinámico, expresándose la solución en términos de densidades de estados por todos conocidas, al menos en el caso $N/N_s = 1, M/N_s = 1/2$. 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:

$$F_i \equiv N_i k_i - \sum_{\beta=1}^M \theta [2(\text{sen } k_i - \Lambda_\beta)] - 2\pi l_i = 0,$$

$$i = 1, \dots, N \quad \text{con } -\pi \leq \theta(p) \equiv 2 \arctan(2p/U) \leq \pi$$

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

donde $\{I_j\}$ y $\{J_\mu\}$ 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_μ resultan de exigir ciertas condiciones de consistencia a la solución (que vienen de la condición de contorno periódica y del carácter fermiónico de las partículas inerteactantes, y se traducen en relaciones entre los coeficientes $[Q, R]$). Los Λ_μ tienen la interpretación de estados con espín definido (por ejemplo, hacia abajo), como es fácil comprobar en el límite termodinámico.

Se ha probado² que para el estado fundamental los números I_j van desde $(1 - N) / 2$ hasta $(N - 1) / 2$ y los J_μ 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,

$$\sum k_j = (\sum I_j + \sum J_\mu) / N_s = 0.$$

En el caso simple $N_s = N = 2, M = 1$, la solución para cualquier valor de U se obtiene de resolver $\cos k = 4 / U \cdot \text{sen}^2 k$. Esto será una buena guía para probar el método.

DESCRIPCION DEL METODO

Como hemos anticipado, el método utilizado para la resolución de este sistema de ecuaciones trascendentes es el de Newton-Raphson, con resolución en cada iteración del sistema lineal:

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

por el método de eliminación de Gauss con pivoteo total. Los elementos de la matriz Jacobiana son:

$$\partial F_i / \partial k_j = \left\{ N_s + \sum_{\beta=1}^M 8U \cos k_\beta \left[U^2 + 16 (\text{sen } k_i - \Lambda_\beta)^2 \right] \right\} \delta_{ij}$$

$$\partial F_i / \partial \Lambda_\beta = -8U \left[U^2 + 16 (\text{sen } k_i - \Lambda_\beta)^2 \right]$$

$$\partial G_\mu / \partial k_j = -8U \cos k_j \left[U^2 + 16 (\text{sen } k_i - \Lambda_\mu)^2 \right]$$

$$\partial G_\mu / \partial \Lambda_\beta = \left\{ \sum_{j=1}^N 8U \left[U^2 + 16 (\text{sen } k_j - \Lambda_\mu)^2 \right] \right\} \delta_{\mu\beta} +$$

$$- \sum_{\alpha=1}^M 4U \left[U^2 + 4 (\Lambda_\mu - \Lambda_\alpha)^2 \right] \delta_{\mu\alpha} +$$

$$+ 4U \left[U^2 + 4 (\Lambda_\mu - \Lambda_\beta)^2 \right] (1 - \delta_{\mu\beta})$$

Usando $\sum k_j = 0$ planteamos el vector de soluciones conteniendo $N - 1$ k 's y Λ 's. Hemos cuidado en cada iteración de reducir los k 's incrementados al intervalo $-\pi \leq k \leq \pi$.

Lamentablemente, el método resultó no convergente en el caso simple mencionado en la sección anterior para todos los valores de U probados. De todos modos, fuimos capaces de extraer resultados significativos apelando a la siguiente estrategia, utilizada por uno de los autores en otros contextos⁴: observando el flujo de las soluciones en unas pocas iteraciones a partir de distintas condiciones iniciales es posible encontrar la solución con tanta precisión como se desee (o como sea necesaria, de acuerdo a la violencia con que la "solución" de Newton-Raphson se aleje de la condición inicial en las cercanías de la solución verdadera). Por ejemplo, se encuentra que para $U \sim 2$ la sensibilidad a condiciones iniciales es mayor que para $U \rightarrow \infty$ ó 0 , luego es necesario acotar la solución con mayor precisión.

RESULTADOS PARA $N_s = N = 2, M = 1$: ENERGIA DEL ESTADO FUNDAMENTAL

En la tabla 1 registramos los valores obtenidos para $k = k_2 = -k_1$ como función de U ($\Lambda = 0$), comparados con los k' que resultan de resolver $\cos k' = 4 / U \cdot \text{sen}_2 k'$ con una precisión de 0,001. También en dicha table comparamos los valores obtenidos por nuestro método para la energía del estado fundamental: N

$$E = -2 \sum_{j=1}^N \cos k_j$$

con los que resultan de la formula

$$E' = 1/2 [U \cdot \sqrt{U^2 + 64}].$$

Esta última se obtiene de la resolución del modelo en representación de sitio, sin usar la conjetura de Bethe. Los dígitos entre paréntesis en E son aquellos que difieren de los de E' .

U	k	k'	E	E'
100,0	1,53085	1,530	-0,15974 (28)	-0,1597448
20,0	1,37701	1,377	-0,7703 (029)	-0,7703296
12,0	1,26319	1,263	-1,2111 (128)	-1,2111026
7,0	1,099808	1,100	-1,8150 (689)	-1,8150729
4,0	0,904555	0,905	-2,4721 (419)	-2,4721360
3,4	0,847895	0,848	-2,6462 (525)	-2,6462628
2,8	0,782035	0,782	-2,83792 (36)	-2,8379240
2,0	0,6748889	0,675	-3,123105 (5)	-3,1231056
1,9	0,659471335	0,660	-3,1612650	-3,1612650
1,6	0,609728	0,609	-3,279215 (2)	-3,2792156
0,9	0,4650297	0,465	-3,57523 (30)	-3,5752329
0,8	0,439446	0,439	-3,619950 (0)	-3,6199502
0,5	0,349771	0,350	-3,757804 (8)	-3,7578049
0,1	0,157782	0,158	-3,950312 (9)	-3,9503125
0,01	0,049989	0,050	-3,995003 (2)	-3,9950031
0,002	0,02236	0,022	-3,9990001	-3,9990001

TABLA 1

CONCLUSIONES

Los resultados presentados en las secciones anteriores permiten albergar esperanzas de que, aunque el método de Newton-Raphson tampoco converja en otros casos, podamos sin embargo obtener cifras confiables con un alto grado de precisión, cual es el objetivo de este trabajo.

Obtenidos los valores de k en función de U , el siguiente paso es conocer las diferentes amplitudes usando la forma de Bethe. Para ello debemos calcular los coeficientes $[Q, R]$ a los que hicimos referencia en la segunda sección. Estos obedecen ciertas relaciones, dictadas por las condiciones de consistencia entonces aludidas (en el caso que estamos analizando, tanto Q como R pueden ser sólo la identidad I o la permutación P del conjunto $\{1, 2\}$), a través de las cuales podemos poner los restantes en función de uno solo, que se determina por normalización. Estas relaciones son funciones de los k y los Λ que en el caso $N_s = N = 2, M = 1$ hemos determinado para el estado fundamental. También es de interés calcular la energía y amplitudes para estados excitados $N = 3$ y $N = 1$, obteniendo la "brecha de corriente": $E(N = 3) + E(N = 1) - 2E(N = 2)$.

AGRADECIMIENTOS

Todos los cálculos fueron realizados en una PC AT propiedad del Analista de Sistemas Sr. Carlos Buntnix, quien además nos brindó solícitamente asesoramiento y auxilio en materia computacional. Los autores deseamos agradecer su invaluable colaboración. Agradecemos también la colaboración de los numerosos colegas que nos consiguen usualmente artículos en Bs. As., La Plata, Bariloche, etc.

REFERENCIAS

1. E. Lieb y F. Y. Wu: Physical Review Letters **20**, 1445 (1968).
2. C.N. Yang : Physical Review Letters **19**, 1312 (1967).
3. R. Blankenbecler, D. Dahl, D. Kung, R. Deza y J. Fulco : Physical Review **B.32**, (1985).
4. R. Deza y L. Masperi: Nuclear Physics **B 119** (1979); R. Deza, J. Goity y L. Masperi: Preprint Centro Atómico Bariloche (1980) (no publicado)