

Weiterentwicklung der Finite-Temperature Lanczos Methode

Burkhard Schmidt, Ivica Zerec und Peter Thalmeier

Überblick

Wir haben unsere Implementierung der Finite-Temperature Lanczos Methode (FTLM) verbessert und erweitert. Die FTLM ist eine numerische Methode zur Berechnung von temperaturabhängigen Eigenschaften von Modell-Hamiltonoperatoren für stark korrelierte Elektronensysteme. Dies umfasst die Berechnung von thermodynamischen Größen wie der Wärmekapazität oder magnetischen Suszeptibilität wie auch beliebiger statischer Korrelationsfunktionen, zum Beispiel der statischen Spin-Strukturfunktion. Wir können Modellsysteme von kleinen Clustern in einer oder zwei Raumdimensionen behandeln. Die Methode selbst ist auf den Lanczos-Algorithmus [1] aufgebaut, eine Methode zur iterativen Diagonalisierung großer Matrizen. Die FTLM wurde eingeführt und zuerst angewendet auf das $t - J$ -Modell von Jaklič und Prelovšek [2,3].

Ziel unserer Implementierung ist es, ein flexibles Programmpaket zu erstellen, das leicht an neue Probleme und die dazugehörigen Modelle angepasst werden kann. Dies wurde erreicht durch einen hohen Modularisierungsgrad des gesamten Codes und durch Definition einer klaren Trennung zwischen Code-Modulen, welche den rein numerischen Teil der FTLM darstellen, und denjenigen, die ein bestimmtes Modell implementieren. Wir benutzen hierbei konsistente Schnittstellen zwischen den einzelnen Programmteilen, die es erleichtern, die Funktionalität unserer FTLM-Implementierung zu erweitern, sei es durch Hinzufügen eines neuen Modells, neuer thermodynamischer Funktionen, oder das Umschalten zwischen verschiedenen Diagonalisierungsprozeduren. Beispielsweise ist das Modul, welches das Cluster, die Basis und den Hamiltonoperator der aktuellen Rechnung beschreibt, der einzige Teil des gesamten Codes, der modifiziert werden muss, sollte man einen neuen Hamiltonoperator hinzufügen wollen, zum Beispiel für Spin eins anstelle von 1/2.

Um nicht die Übersicht zu verlieren, benutzen wir das GNU Autoconf, Automake und Libtool

System. Für die Versionskontrolle wird das *Concurrent Versions System* (CVS) eingesetzt. Aus Geschwindigkeits- und Kompatibilitätsgründen wird hauptsächlich Fortran 77 als Programmiersprache eingesetzt.

Diese Entscheidungen und die Bemühungen, die Qualität des Quellcodes so hoch wie möglich zu halten haben sich auszbezahlt, als wir in den Jahren 2004/2005 zu neuer Hardware und zu einem neuen Betriebssystem unseres Compute-Clusters übergegangen sind. Im Jahr 2005 haben wir unsere Programme parallelisiert, so dass eine einzige Rechnung im Prinzip das gesamte Cluster nutzen kann. Dafür haben wir unseren Code an die *Local Area Multicomputer*-Implementierung des Message-Passing-Interface-Standards (LAM/MPI) angepasst. (Serielle Jobs auf dem Cluster werden von dem Wartelisten-System *Sun N1 Grid Engine* verwaltet.)

Modell-Hamiltonoperatoren

Wir haben zunächst zwei Typen von Modellen implementiert: Das erweiterte Hubbard-Modell, vielfach verwendet zur Beschreibung elektronischer Eigenschaften stark korrelierter Elektronensysteme, und das verallgemeinerte Spin-1/2-Heisenbergmodell zur Beschreibung frustrierter Spinsysteme. Diese Modelle sind wichtig zur Beschreibung der physikalischen Eigenschaften der Vanadate [4-8] und Manganate.

In der jüngeren Vergangenheit haben wir Modelle hinzugefügt, die zusätzliche lokale Spin-Freiheitsgrade aufweisen: Das Kondo-Gitter-Modell und das Kondo-Necklace-Modell.

Die Modelle aus der Klasse der erweiterten Hubbard-Modelle haben einen Hamiltonoperator der Form

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} V_{ij} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} , \quad (1)$$

Further Development of the Finite-Temperature Lanczos Method

Burkhard Schmidt, Ivica Zerec, and Peter Thalmeier

Overview

We have extended and enhanced our implementation of the finite-temperature Lanczos method (FTLM). FTLM is a numerical method for the calculation of temperature dependent properties of model Hamiltonians for strongly correlated electron systems. This includes the evaluation of thermodynamic quantities like the heat capacity or magnetic susceptibility as well as arbitrary static correlation functions, for example the static spin structure factor. The model systems which can be treated are based on small clusters in one and two spatial dimensions. The method itself builds on the Lanczos algorithm [1] which is used to iteratively diagonalize the Hamiltonian matrix for the cluster considered. FTLM was originally introduced and applied to the $t - J$ model for the cuprates by Jaklič and Prelovšek [2,3].

Our goal in implementing the FTLM was to create a flexible program package which can easily be adapted to new problems and corresponding models. We have achieved this by highly modularizing the code and defining a clear-cut distinction between code modules implementing the purely numerical, model-independent part of the FTLM and modules implementing a particular model. We use a consistent interface between the individual routines which makes it easy to extend the functionality of our FTLM implementation, be it adding modules describing a new model, adding new thermodynamic functions, or switching between different core diagonalization procedures. For example, the module used to describe the cluster, the Hamiltonian, and the basis for the current calculation is the *only* part of the code which needs to be modified in case one wants to implement a new Hamiltonian, e.g., for spin one instead of 1/2.

To keep the source code organized and portable, we use the GNU Autoconf, Automake, and Libtool system. Version control is done using the *Concurrent Versions System* (CVS). For the sake of speed and portability, Fortran 77 is the main programming language used.

These decisions and the effort spent on keeping the code quality as high as possible have been worth the trouble when we were switching to new hardware and a new operating system of our compute cluster in 2004/2005. In 2005 we have parallelized our code such that a single calculation can utilize the full cluster. We have adapted our code to the *Local Area Multicomputer* implementation of the message passing interface standard (LAM/MPI). (Serial jobs on the cluster are managed by the *Sun N1 Grid Engine* queuing system.)

Model Hamiltonians

We have originally implemented two types of models: The extended Hubbard models, being widely used to describe electronic properties of strongly correlated electron systems, and generalized spin-1/2 Heisenberg models for the description of frustrated spin systems. These models are important for the physics of the vanadates [4-8] and manganites. More recently, we have developed the implementation of models having additional local spin degrees of freedom, i.e., the Kondo lattice model and the Kondo necklace model. The models of the extended Hubbard type have a Hamiltonian of the form

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} V_{ij} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}, \quad (1)$$

where $\langle ij \rangle$ indicates a sum over bonds which are not necessarily connecting only nearest-neighbor orbitals. The parameters t_{ij} and V_{ij} denote the hopping integral and the Coulomb energy between orbitals i and j , respectively. ε_i is the on-site energy, and U_i the Coulomb repulsion on site i . All interactions can depend on the indicated site indices, i.e., arbitrary cluster geometries and interactions can be realized. The price to be paid for this generality is the loss of spatial (translational and point-group) symmetries, leading to a reduction of

wobei $\langle ij \rangle$ die Summation über Bindungen zwischen Orbitalen bezeichnet, die nicht notwendigerweise nächste Nachbarn sein müssen. Die Parameter t_{ij} und V_{ij} stehen für das Überlapp-Integral beziehungsweise die Coulomb-Energie zwischen den Orbitalen i und j , ε_i ist ein lokales Potential, und U_i die Coulomb-Abstoßung am Platz i . Alle Wechselwirkungen können von den angegebenen Indices abhängen, das heißt, es können beliebige Cluster-Geometrien und Wechselwirkungen realisiert werden. Der Preis dafür ist der Verlust räumlicher Symmetrien (Translations- und Punktsymmetrien), also eine Reduzierung der maximal möglichen Clustergröße, die noch mit vertretbarem Aufwand an Zeit und anderen Ressourcen behandelt werden kann.

Auf die gleiche Art und Weise haben wir Spin-1/2-Modelle implementiert, beschrieben durch einen Hamiltonoperator der allgemeinen Form

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha\beta} S_i^\alpha J_{ij}^{\alpha\beta} S_j^\beta. \quad (2)$$

In diesem Fall kann die Matrix J_{ij} eine platzabhängige uniaxiale Anisotropie und auch einen antisymmetrischen Anteil enthalten, die Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung. Wiederum bezeichnen i und j nicht notwendigerweise nächste Nachbarn, was uns ermöglicht, ohne zusätzlichen Aufwand frustrierte Spinsysteme wie zum Beispiel den zweidimensionalen frustrierten Heisenberg-Antiferromagneten zu betrachten.

Das Kondo-Necklace-Modell wurde ursprünglich von Doniach [9] eingeführt; hierbei werden die Leitungselektronen des eindimensionalen Kondo-Gitter-Modells abgebildet auf wechselwirkende Pseudospins. Wir betrachten das verallgemeinerte Kondo-Necklace-Modell in zwei Dimensionen, das die Ladungsfluktuationen im Kondo-Gitter-Modell vernachlässigt. Das Modell kann strikt vom Kondo-Hubbard-Gitter-Modell im Grenzfall großer lokaler Coulomb-Abstoßung (Hubbard- U) für die Leitungselektronen abgeleitet werden. In diesem Fall ist der Hamiltonian gegeben durch

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha\beta} \tau_i^\alpha J_{ij}^{\alpha\beta} \tau_j^\beta + \sum_i \sum_{\alpha\beta} \tau_i^\alpha J_{Ki}^{\alpha\beta} S_i^\beta. \quad (3)$$

Der erste (Heisenberg) Term beschreibt die Wechselwirkung zwischen den „itineranten“ Spins τ_i , der zweite Term beschreibt die lokale Kondo-Wechselwirkung zwischen den „itineranten“ und den lokalisierten Spins S_i .

Auch für das volle Kondo-Hubbard-Gitter-Modell haben wir den entsprechenden FTLM-Code entwickelt. Der Hamiltonian ist hier gegeben durch

$$H_{KL} = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right), \\ + \sum_i \sum_{\alpha\beta} \tau_i^\alpha J_{Ki}^{\alpha\beta} S_i^\beta + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (4)$$

Hierbei ist t_{ij} das Überlappintegral, J_{Ki} die Kondo-Wechselwirkung zwischen den lokalisierten Spins S_i und den itineranten Spins τ_i ist die lokale Coulomb-Abstoßung zwischen zwei Leitungselektronen mit entgegengesetztem Spin.

Im folgenden wird die FTLM beschrieben am Beispiel einer beliebigen statischen Observablen A bei endlichen Temperaturen, gegeben durch

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | e^{-\beta H} A | n \rangle}{\sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle}. \quad (5)$$

Für alle bisher implementierten Modelle haben wir eine generische Darstellung des Operators A bezüglich der elementaren Operatoren des betrachteten Systems verwendet, die keinerlei Beschränkungen bezüglich der Form von A enthält.

Schematische Beschreibung der Methode

Wie man Gleichung 5 entnehmen kann, erfordert die Spur über den statistischen Operator im Prinzip die Kenntnis *aller* Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamiltonoperators. Die Anzahl dieser steigt exponentiell mit der Clustergröße und skaliert zum Beispiel wie $N_{st} \propto 4^N$ für das Hubbard-Modell oder $N_{st} \propto 8^N$ für das Kondo-Gitter-Modell, wobei N die Zahl der Orbitale des Clusters ist. N_{st} kann um einen Faktor reduziert werden, der bestenfalls proportional zu N^2 ist, berücksichtigt man Spin- und räumliche Symmetrien.

Auf der anderen Seite ermöglicht die exponentielle Kleinheit des Boltzmann-Faktors im Erwartungswert, die Summation in Gleichung 5 auf „wenige“ niedrigliegende Eigenwerte und die dazugehörigen Eigenvektoren, die das „größte“ Gewicht in der Summe haben, zu beschränken. (Die Bedeutung der Anführungszeichen wird später klar werden, wenn wir Abschätzungen der Parameter angeben, die die Begriffe „wenig“ und „am größten“ quantifizieren.) Deswegen ist der Lanczos-Algorithmus ein

the largest cluster size which can be handled within a fair amount of time and other computational resources. In the same way we have implemented spin-1/2 models, described by a Hamiltonian of the general form

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha\beta} S_i^\alpha J_{ij}^{\alpha\beta} S_j^\beta. \quad (2)$$

In this case, the matrix J_{ij} can have a site-dependent uniaxial anisotropy as well as an antisymmetric (Dzyaloshinskii-Moriya) exchange interaction. Again, i and j do not necessarily label nearest-neighbor sites which enables us to study frustrated spin systems like, e.g., the two-dimensional frustrated Heisenberg antiferromagnet without any additional effort.

The Kondo necklace model was originally invented by Doniach [9], where the charge fluctuations of the one-dimensional Kondo lattice model are mapped onto the interacting pseudospins. We consider the generalized Kondo necklace model in two dimensions, where we neglect the charge degrees of freedom of the Kondo lattice model. The model can strictly be derived from the Kondo-Hubbard lattice model in the limit of large on-site correlations (Hubbard- U) for the conduction electrons. In this case, the model Hamiltonian reads:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha\beta} \tau_i^\alpha J_{ij}^{\alpha\beta} \tau_j^\beta + \sum_i \sum_{\alpha\beta} \tau_i^\alpha J_{Ki}^{\alpha\beta} S_i^\beta. \quad (3)$$

The first (Heisenberg) term describes the intersite interaction of the “itinerant” spins, τ_i , while the second term describes the on-site Kondo interaction between the “itinerant” and localized spins, S_i .

We have implemented the FTLM code also for the full Kondo-Hubbard lattice model. The Hamiltonian reads:

$$H_{KL} = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + \sum_i \sum_{\alpha\beta} \tau_i^\alpha J_{Ki}^{\alpha\beta} S_i^\beta + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (4)$$

Here, t_{ij} is the hopping integral, J_{Ki} is the on-site Kondo interaction between the localized, S_i , and itinerant, τ_i , spins, and U_i is the on-site Coulomb repulsion between the conduction electrons of opposite spins.

In what follows, the FTLM is described for the case of the expectation value of an arbitrary static operator A at finite temperatures,

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | e^{-\beta H} A | n \rangle}{\sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle}. \quad (5)$$

For all models implemented thus, we used a truly generic parameterization for the operator A in terms of the elementary operators of the system considered which imposes no restrictions on the type of A .

Outline of the method

As is seen from Equation 5, the trace over the statistical operator in principle requires the knowledge of all eigenvalues and eigenfunctions of the Hamiltonian. The number of these increases exponentially with the cluster size and scales for example like $N_{st} \propto 4^N$ for the Hubbard model or $N_{st} \propto 8^N$ for the Kondo lattice model, where N is the number of sites of the cluster under consideration. This number can be slightly reduced by a factor at most proportional to N^2 taking spatial and spin symmetries into account.

On the other hand, the exponential smallness of the Boltzmann factor in the expectation value, Equation 5, enables one to restrict the sum to the “few” lowest eigenvalues and their eigenvectors having the “largest” weight in the sum. (The use of the quotation marks will become clear later on, where we give estimates for the parameters quantifying “few” and “largest”.) Therefore, the Lanczos algorithm is an ideal tool since, when properly defined, it is known to generate the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of the Hamiltonian matrix. Its basic principle is to construct a hierarchy of orthonormal states starting with a normalized random vector $|\phi_1\rangle$ and applying the Hamiltonian recursively.

The key feature of the Lanczos algorithm and reason for its popularity in large-scale numerical eigenvalue problems is that at any point of the diagonalization procedure, a maximum of three arrays $|\phi_i\rangle$ needs to be stored in memory. After M iteration steps, where M is subject to some convergence criterion, the algorithm generates eigenvalues ε_j and $|\psi_j\rangle$ ($j = 1 \dots M$). For a detailed description of the algorithm, see, e.g., Reference [10].

To perform the summations in Equation 5, we expand the traces and express powers of H in terms of the previously generated Lanczos basis. Resumming the exponential leads to

ideales Werkzeug zur Berechnung der tatsächlich benötigten Eigenwerte und Eigenvektoren, da dieser bei geeigneter Definition die niedrigsten Eigenwerte und die dazugehörigen Eigenvektoren erzeugt. Prinzipiell basiert dieser Algorithmus darauf, iterativ eine Hierarchie von orthonormalen Zuständen zu erzeugen, ausgehend von einem zufällig gewählten Vektor $|\phi_1\rangle$, auf welchen rekursiv der Hamiltonoperator angewendet wird.

Das wesentliche Merkmal des Lanczos-Algorithmus, Grund für dessen Beliebtheit bei großformatigen Eigenwertproblemen, ist, dass zu einem beliebigen Zeitpunkt während der Diagonalisierung höchstens drei Vektoren $|\phi_i\rangle$ im Speicher gehalten werden müssen. Nach M Schritten, wobei M durch geeignete Abbruchkriterien festgelegt wird, erzeugt der Algorithmus Eigenwerte ε_j und Eigenvektoren $|\psi_j\rangle$ ($j = 1 \dots M$). Eine detaillierte Beschreibung des Algorithmus findet man zum Beispiel in [10].

Um die Summationen in Gleichung 5 ausführen zu können, entwickeln wir die Spuren und drücken Potenzen von H mit Hilfe der zuvor erzeugten Lanczos-Basis aus. Die Wiederaufsummierung der Exponentialfunktion liefert dann

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \sum_{i=1}^M e^{-\beta \varepsilon_i^n} \langle n | \psi_i^n \rangle \langle \psi_i^n | A | n \rangle, \quad (6)$$

$$Z \approx \sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \sum_{i=1}^M e^{-\beta \varepsilon_i^n} \langle n | \psi_i^n \rangle \langle \psi_i^n | n \rangle. \quad (7)$$

Diese Relationen interpolieren zwischen $T \rightarrow 0$ (dem Grundzustandsproblem) und $T \rightarrow \infty$; sie sind in beiden Grenzfällen *exakt*.

Da die Summation über die Zustände über eine exponentiell große vollständige Basis läuft, haben die Gleichungen 6 und 7 in dieser Form noch keinen Vorteil gegenüber einer vollen Diagonalisierung des Problems. Man kann allerdings die Summation über die vollständige Basis $\{|n\rangle\}$ durch eine Mittelung über R Zustände mit zufällig gewählten Koeffizienten ersetzen. Für $[H, A] = 0$ kann man zeigen, daß der dadurch eingeführte numerische Fehler sich verhält wie

$$\tilde{A} = \langle A \rangle + \mathcal{O}\left(1/\sqrt{RZ}\right), \quad (8)$$

$$\tilde{Z} = e^{\beta E_0} \sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \left\langle n \left| e^{-\beta H} \right| n \right\rangle. \quad (9)$$

Implementierung

Die Kombination der Hochtemperatur-Entwicklung, Gleichungen 6 und 7, mit der Zufalls-Mittelung liefert die endgültige Form der Näherung für den gesuchten Erwartungswert:

$$\langle A \rangle \approx \frac{N_{\text{st}}}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \varepsilon_j^r} \langle r | \Psi_j^r \rangle \langle \Psi_j^r | A | r \rangle, \quad (10)$$

$$Z \approx \frac{N_{\text{st}}}{R} \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \varepsilon_j^r} |\langle r | \Psi_j^r \rangle|^2. \quad (11)$$

Diese Gleichungen dienen uns als Grundlage für die Implementierung des Algorithmus.

Wir haben intensive Tests durchgeführt und unsere Berechnungen mit den Ergebnissen verglichen, die bereits mit anderen Methoden gewonnen wurden. Insbesondere haben wir die klassischen Resultate von Bonner und Fisher für den eindimensionalen Heisenberg-Magneten [11], die Arbeit von Shiba und Pincus zum Hubbard-Ring [12], und den Artikel von Bacci und anderen zum zweidimensionalen frustrierten Spin-1/2-Heisenberg-Modell [13] betrachtet. Aus dem Vergleich entnehmen wir die typischen Werte für unsere Parameter, die notwendig sind, um die gleiche numerische Genauigkeit zu erreichen: Für die Größe der Lanczos-Matrizen ergibt sich $M = 20 \dots 80$, und die notwendige Zahl der zufälligen Startvektoren beläuft sich auf $R = 200 \dots 1000$.

Als Beispiel ist in Abbildung 1 die Temperaturabhängigkeit der statischen Spin-Strukturfunktion des zweidimensionalen frustrierten Heisenberg-Magneten gezeigt, gegeben durch

$$S(\mathbf{q}, T) = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle. \quad (12)$$

Die Daten wurden für einen Cluster mit 16 Gitterplätzen bei drei verschiedenen Frustrationswinkeln $\phi = \tan^{-1}(J_2/J_1)$ [7] berechnet. Die Temperaturen sind in Einheiten von $J_c = \sqrt{J_1^2 + J_2^2}$ angegeben. In der kollinearen und der Néel-Phase entwickelt $S(\mathbf{q}, T)$ bei tiefen Temperaturen eine ausgeprägte Anomalie bei demjenigen Ordnungsvektor, der die Phase charakterisiert. Diese Anomalie ist der Vorläufer der Divergenz von $S(\mathbf{q}, T \rightarrow 0)$ im thermodynamischen Limes. Der asymptotische Wert für $k_B T/J_c \rightarrow \infty$ ist in allen Fällen $S(\mathbf{q}) = S(S+1) = 3/4$, wie es auch ein sollte. In der kollinearen wie auch der Néel-Phase gilt die Beziehung $S(\mathbf{Q}) > S(\mathbf{q})$, $\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}$ für den gesamten Temperaturbereich.

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \sum_{i=1}^M e^{-\beta \varepsilon_i^n} \langle n | \Psi_i^n \rangle \langle \Psi_i^n | A | n \rangle, \quad (6)$$

$$Z \approx \sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \sum_{i=1}^M e^{-\beta \varepsilon_i^n} \langle n | \Psi_i^n \rangle \langle \Psi_i^n | n \rangle. \quad (7)$$

These relations interpolate between $T \rightarrow 0$ (the ground state problem) and $T \rightarrow \infty$; they are *exact* in the two limiting cases.

Equations 6 and 7 are still of no practical advantage compared to full-diagonalization schemes, since the sampling over the states involves an exponentially large complete basis set. In practice, it is sufficient to replace the summation over the full basis $\{|n\rangle\}$ by a sampling over R states with randomly chosen coefficients where $R \ll N_{\text{st}}$. For $[H, A] = 0$, one can show that in this case the computational error introduced behaves like

$$\tilde{A} = \langle A \rangle + \mathcal{O}\left(1/\sqrt{RZ}\right), \quad (8)$$

$$\tilde{Z} = e^{\beta E_0} \sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle. \quad (9)$$

Implementation

Merging the high-temperature expansion, Equations 6 and 7 and the random sampling yields the final approximations for the desired expectation value:

$$\langle A \rangle \approx \frac{N_{\text{st}}}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \varepsilon_j^r} \langle r | \Psi_j^r \rangle \langle \Psi_j^r | A | r \rangle, \quad (10)$$

$$Z \approx \frac{N_{\text{st}}}{R} \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \varepsilon_j^r} |\langle r | \Psi_j^r \rangle|^2. \quad (11)$$

These equations form the basis for our implementation of the algorithm.

We have done intensive tests and compared our calculations with results determined by other means, in particular Bonner's and Fisher's classical results for one-dimensional Heisenberg magnets [11], Shiba's and Pincus' work on the Hubbard ring [12], or Bacci et al. for the two-dimensional frustrated spin-1/2 Heisenberg model [13]. Typical values needed to achieve the same numerical accuracy as in the literature cited are: for the Lanczos matrix size $M = 20 \dots 80$, and for the number of random starting vectors $R = 200 \dots 1000$.

As an example, Figure 1 shows the temperature dependence of the static spin structure factor of the two-dimensional frustrated $S=1/2$ Heisenberg magnet given by

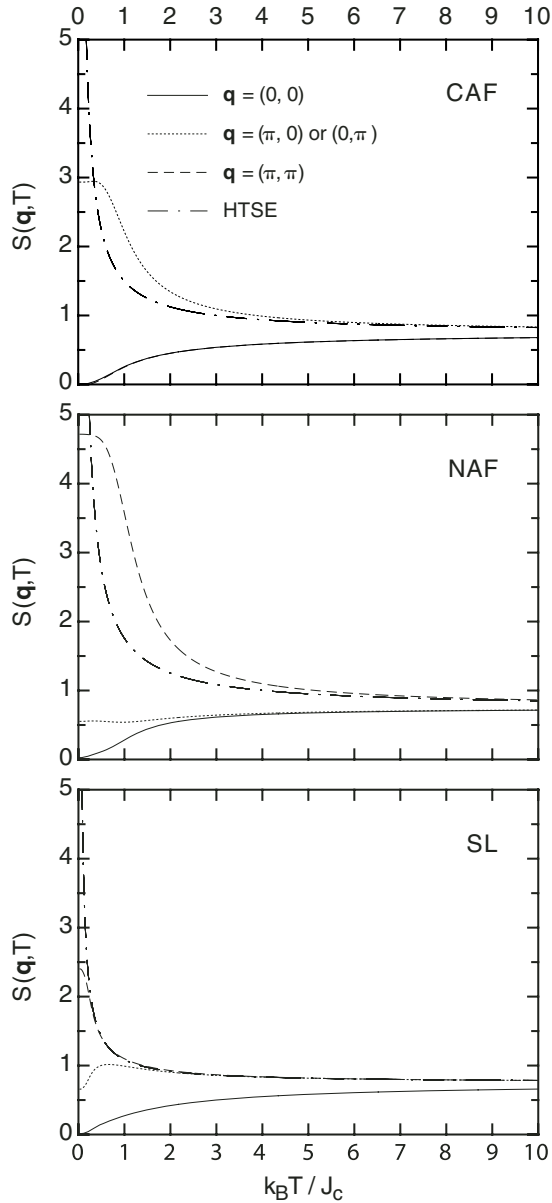
$$S(\mathbf{q}, T) = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle. \quad (12)$$

The data are taken on a 16-site cluster for three different frustration angles $\phi = \tan^{-1}(J_2/J_1)$ [7]. Temperatures are measured in units of $J_c = \sqrt{J_1^2 + J_2^2}$. In the collinear and the Néel phase, at low temperatures, $S(\mathbf{q}, T)$ develops a pronounced anomaly at the ordering vector $\mathbf{Q}$ characterizing the phase. This anomaly is the precursor of a divergence of $S(\mathbf{q}, T \rightarrow 0)$ for the infinite system. The asymptotic value for $k_B T/J_c \rightarrow \infty$ is $S(\mathbf{q}) = S(S+1) = 3/4$ in each case, as it should be.

In the collinear as well as in the Néel phase, the relation $S(\mathbf{Q}) > S(\mathbf{q})$, $\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}$ holds for all temperatures, while for the spin liquid regime this is qualitatively different: Here, the value of $S(\mathbf{q}, T)$ is approximately the same for $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ and $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ or $(0, \pi)$ at temperatures $k_B T > J_c$ and always larger than the value for $\mathbf{q} = 0$, which is an additional indicator for the strong frustration in that phase. The approximate equality of $S(\mathbf{q}, T)$ values for different wave vectors also supports the picture that close to the spin liquid phase domains of the collinear phase may easily form inside the Néel phase and vice versa.

As a second example, we consider the Kondo necklace model. We have calculated static correlation functions and thermodynamic properties for 8-site two-dimensional cluster [14]. The specific heat, on-site and intersite correlation functions are shown in Figure 2. The specific heat reveals a two peak structure in the weak coupling regime, for small J_K/J . The peak at higher temperatures corresponds to the crossover to the antiferromagnetically correlated state of the "itinerant" spins, due to the Heisenberg term in Equation 3. The lower peak is connected with the local spin degrees of freedom. The analysis of the correlation functions shows that in the weak coupling regime the intersite correlations dominate, which may be associated with the RKKY interaction. As J_K/J is increased, the two peaks in the specific heat merge and the on-site correlations start to dominate. The localized spins become locally screened due to the Kondo interaction.

Eventually, a phase diagram may be constructed with the crossover temperatures obtained from the specific heat maxima and inflection points of correlation function. This is shown in Figure 3. For weak coupling, the crossover temperature is pro-



In der Spin-Flüssigkeitsphase ist dies qualitativ unterschiedlich: Hier ist bei Temperaturen $k_B T > J_c$ der Wert von $S(\mathbf{q}, T)$ ungefähr gleich für $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ und $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ oder $(0, \pi)$ und immer größer als der Wert für $\mathbf{q} = 0$, zusätzlicher Hinweis auf die starke Frustration in dieser Phase. Diese ungefähre Gleichheit von $S(\mathbf{q}, T)$ bei verschiedenen Wellenvektoren unterstützt auch die Vorstellung von sich in der Nähe des Spin-Flüssigkeitsbereichs leicht bildenden Bereichen der kollinearen Phase innerhalb der Néel-Phase und umgekehrt.

Ein weiteres Beispiel ist das Kondo-Necklace-Modell. Hierfür haben wir statische Korrelationsfunktionen sowie thermodynamische Eigenschaften auf einem Cluster mit acht Plätzen berechnet [14].

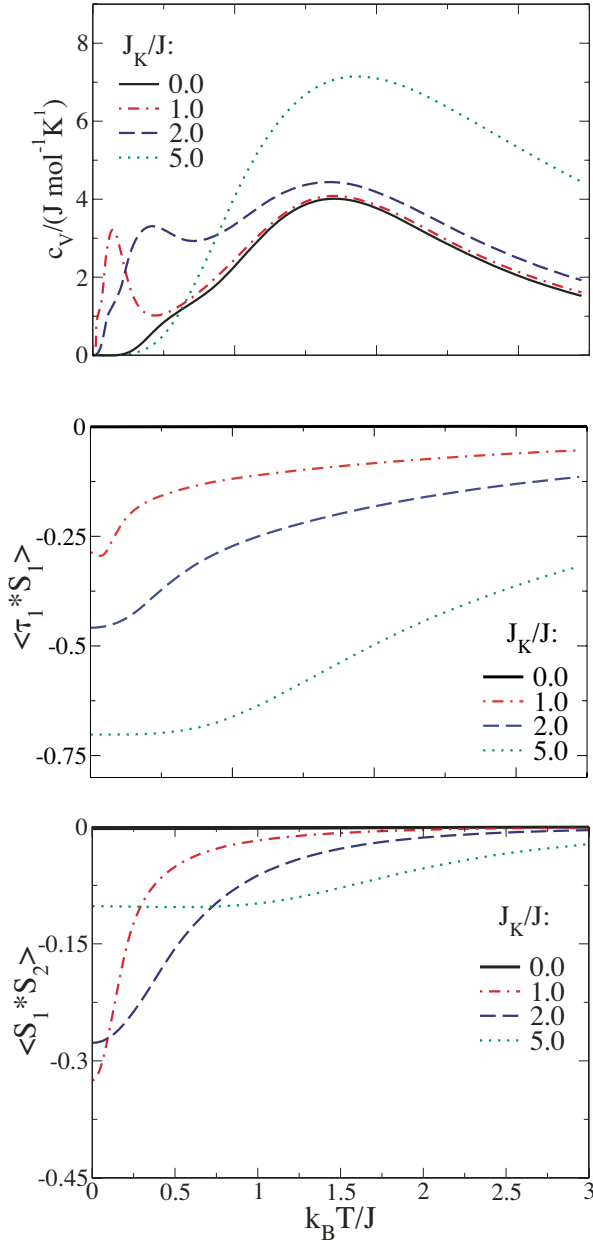
Abb. 1: Statische Spin-Strukturfunktion $S(\mathbf{q}, T)$ als Funktion der Temperatur für $\mathbf{q} = (0, 0)$ (durchgezogene Linie), $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ oder $(0, \pi)$ (gepunktete Linie), und $\mathbf{q} = \pi, \pi$ (gestrichelte Linie) für drei verschiedene Frustrationswinkel $\phi = \pi/2$ (kollineare Phase, oben), $\phi = \tan^{-1}(-1/2)$ (Néel-Phase, Mitte) und $\phi = \tan^{-1}(1/2)$ (Spin-Flüssigkeitsphase, unteres Teilbild) des zweidimensionalen Heisenberg-Modells auf 16 Gitterplätzen. In der kollinearen Phase bei $\phi = \pi/2$ entkoppeln die beiden antiferromagnetischen Untergitter, und es gilt $S(\mathbf{q} = (\pi, \pi), T) = S(\mathbf{q} = (0, 0), T)$. Die strichpunktierte Kurve in jedem der drei Teilbilder bezeichnet die Hochtemperaturentwicklung (HTSE) der Strukturfunktion an demjenigen Punkt $\mathbf{q}$, bei welchem $S(\mathbf{q}, T \rightarrow 0)$ divergiert, also, von oben nach unten, $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ für den kollinearen Antiferromagneten, $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ für die Néel-Phase und $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ oder (π, π) im Spin-Flüssigkeitsbereich.

Fig. 1: Static spin structure factor $S(\mathbf{q}, T)$ as a function of temperature for $\mathbf{q} = (0, 0)$ (solid line), $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ or $(0, \pi)$ (dotted line), and $\mathbf{q} = \pi, \pi$ (dashed line) for three different frustration angles $\phi = \pi/2$ (collinear phase, top), $\phi = \tan^{-1}(-1/2)$ (Néel phase, middle), and $\phi = \tan^{-1}(1/2)$ (spin liquid phase, bottom figure) of the two-dimensional frustrated $S=1/2$ Heisenberg magnet on a 16-site square. For the collinear phase at $\phi = \pi/2$, the two antiferromagnetic sublattices decouple and we have $S(\mathbf{q} = (\pi, \pi), T) = S(\mathbf{q} = (0, 0), T)$. The dash-dotted lines in each of the three panels denote the high-temperature expansions $\mathbf{q}$ of the structure factor at the respective value for $\mathbf{q}$ where $S(\mathbf{q}, T \rightarrow 0)$ diverges, i.e., from top to bottom $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ for the collinear antiferromagnet, $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ for the Néel phase, and $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ or (π, π) in the spin liquid regime.

Wärmekapazität, lokale Korrelationen und Korrelationsfunktionen auf verschiedenen Gitterplätzen sind in Abbildung 2 wiedergegeben.

Die Wärmekapazität hat im Fall schwacher Kopplung für kleine Werte von J_K/J zwei Anomalien. Die Anomalie bei höheren Temperaturen entspricht dem Übergang zum antiferromagnetisch korrelierten Zustand der „itineranten“ Spins, verursacht durch den Heisenberg-Term in Gleichung 3. Das Auftreten der Anomalie bei niedrigeren Temperaturen hängt mit den lokalen Spinfreiheitsgraden zusammen. Eine Analyse der Korrelationsfunktionen zeigt, dass im Bereich schwacher Kopplung die Korrelationen zwischen den Gitterplätzen dominieren. Sobald J_K/J vergrößert wird, laufen die beiden Anomalien zusammen, und lokale Korrelationen dominieren. Die lokalisierten Spins werden lokal durch die Kondo-Wechselwirkung abgeschirmt.

Schließlich kann man aus den Übergangstemperaturen der Wärmekapazität und den Wendepunkten der Korrelationsfunktionen ein Phasen-



portional to J_K^2 , while in the strong coupling limit, a linear temperature dependence is established. In the thermodynamic limit, the quantum critical point would be expected, separating the antiferromagnetically ordered state for the weak coupling from the Kondo screened non-magnetic state for the strong coupling. We found that the crossover between the predominant intersite to the predominant on-site correlations in the ground state occurs for $J_K/J \approx 2$.

Fig. 2: Top: The specific heat of an 8-site Kondo necklace cluster. Center: The onsite correlations between the “itinerant” and localized f -spin. Bottom: The intersite correlations between the localized f -spins. The solid lines denote the results for $J_K=0$, i.e., for a system of eight independent local moments plus a Heisenberg square. The dotted lines denote the results for large $J_K=5J$, where the formation of local (“Kondo”) singlets dominates. The dash-dotted and dotted lines correspond to $J_K=J$ and $J_K=2J$, respectively.

Abb. 2: Oben: Wärmekapazität des Kondo-Necklace-Modells auf einem Cluster mit acht Plätzen. Mitte: Korrelationsfunktion zwischen den „itineranten“ Spins und den lokalisierten f -Spins. Unten: Korrelationsfunktion zweier lokalisierter f -Spins auf verschiedenen Gitterplätzen. Die durchgezogenen Linien bezeichnen die Ergebnisse für $J_K=0$, also für ein System von acht unabhängigen lokalen Momenten und einem Heisenberg-Quadrat. Gepunktete Kurven zeigen die Resultate für große $J_K=5J$, wo die Bildung lokaler („Kondo“) Singulets dominiert. Die strichpunktierten und gestrichelten Linien entsprechen den Fällen $J_K=J$ beziehungsweise $J_K=2J$.

Outlook

The development of our FTLM program package was focused on creating a flexible application which can be adapted to a new problem easily by just using different parameter files describing the Hamiltonian and the cluster considered as well as the operator for which an expectation value is desired. Additionally, the calling standard for the subroutines was designed in such a way that it is made easy to add modules for new types of Hamiltonians, for example pseudospin models.

The price we had to pay for this flexibility is that we cannot take spatial symmetries into account to either further reduce the computational resource needs or arrive at larger cluster sizes without the need for more powerful computers. (The spin symmetry $[H, S_{\text{tot}}^z] = 0$ can already be used where it applies, as well as particle number conservation in case of the Hubbard model.) This is equivalent to the replacement

$$\frac{N_{\text{st}}}{R} \sum_{r=1}^R \rightarrow \sum_s \frac{N_{\text{st}}^s}{R_s} \sum_{r=1}^{R_s} \quad (13)$$

in Equations 10 and 11, where s labels the different symmetry sectors exploited, e.g., $s=k=2\pi\ell/N$, $\ell=0\ldots(N-1)$ for a one-dimensional ring with periodic boundary conditions.

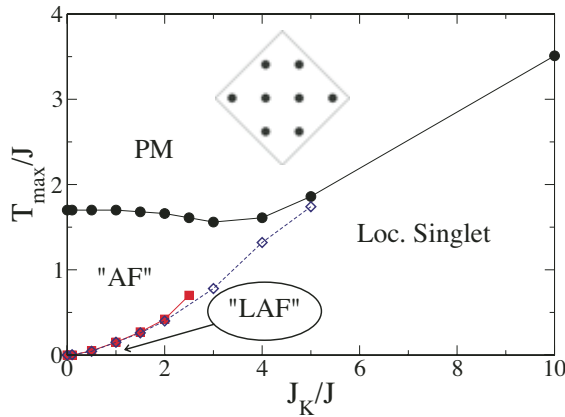


Abb. 3: Aus der Wärmekapazität und den Spin-Korrelationsfunktionen erhaltenes Phasendiagramm des Kondo-Necklace-Modells auf acht Gitterplätzen (siehe Nebenbild) mit periodischen Randbedingungen. Die mit der gestrichelten Linie verbundenen offenen Rauten sind die Wendepunkte der Korrelationsfunktion zwischen zwei Gitterplätzen. „PM“ bezeichnet den paramagnetischen Zustand, „AF“ den Zustand mit antiferromagnetisch korrelierten „itineranten“ Spins (τ), „LAF“ bezeichnet den Zustand mit antiferromagnetischen Korrelationen der lokalen Spins (S).

Fig. 3: Phase diagram of an 8-site Kondo necklace square (inset) with periodic boundary conditions obtained from the specific heat and spin correlation functions. The open diamonds connected by the dashed line are obtained from the inflection points of the inter-site correlation functions. „PM“ labels the paramagnetic state, „AF“ denotes the state with antiferromagnetic correlations of the „itinerant“ (τ) spins, „LAF“ labels a state with antiferromagnetic correlations of the local (S) spins.

diagramm konstruieren, siehe Abbildung 3. Für schwache Kopplung ist die Übergangstemperatur proportional zu J_K^2 , im Bereich starker Kopplung hingegen entwickelt sich ein linearer Verlauf. Im thermodynamischen Limes würde man einen quantenkritischen Punkt erwarten, welcher den antiferromagnetisch geordneten Zustand von dem nichtmagnetischen Zustand mit Kondo-Abschirmung trennt. Aus unseren Berechnungen folgt, dass dieser Übergang zwischen Korrelationen, die hauptsächlich zwischen den Gitterplätzen auftreten, und hauptsächlich lokalen Korrelationen bei einem Wert $J_K/J \gtrsim 2$ auftritt.

Ausblick

Unser Hauptaugenmerk bei der Entwicklung des FTLM Programmpakets lag darauf, eine möglichst flexible Anwendung zu erstellen, die an neue

Problemstellungen leicht angepaßt werden kann, indem einfach verschiedene Parameterdateien benutzt werden, die den Hamiltonoperator und den betrachteten Cluster sowie den Operator beschreiben, für welchen der thermische Erwartungswert bestimmt werden soll. Weiterhin haben wir die Funktionsaufrufe dahingehend standardisiert, daß es leicht möglich ist, neue Module hinzuzufügen, die neue Hamiltonoperatoren wie zum Beispiel Pseudospin-Modelle beschreiben.

Allerdings geht durch die beschriebene Flexibilität die Möglichkeit verloren, räumliche Symmetrien auszunutzen, um entweder die benötigten Ressourcen zu minimieren oder zu größeren Clustern zu kommen, ohne größere Rechenkapazitäten zu benötigen. (Die Spin-Symmetrie $[H, S_{\text{tot}}^z] = 0$ kann verwendet werden, genauso wie die Teilchenzahlerhaltung beim Hubbard-Modell.) Formal bedeutet das „nur“ die Ersetzung

$$\frac{N_{\text{st}}}{R} \sum_{r=1}^R \rightarrow \sum_s \frac{N_{\text{st}}^s}{R_s} \sum_{r=1}^{R_s} \quad (13)$$

in den Gleichungen 10 und 11. Der Index s bezeichnet hierbei die verschiedenen Symmetriesektoren (Quantenzahlen), zum Beispiel $s = k = 2\pi\ell/N$, $\ell = 0 \dots (N-1)$ für einen eindimensionalen Ring mit periodischen Randbedingungen. Für das Kondo-Gittermodell und das Kondo-Necklace-Modell haben wir die Translationsinvarianz (periodische Randbedingungen) implementiert; für das Heisenberg-Modell ist dies noch in der Entwicklungsphase. Nächster Schritt wird eine Erweiterung der Codebasis auf die Berechnung von Spektralfunktionen sein. Dies bedeutet lediglich die Berechnung von zwei Sätzen von Lanczos-Eigen systemen für verschiedene Anfangszustände, die sich zum Beispiel um eins in ihrer Teilchenzahl oder ihrem Gesamtspin unterscheiden. Derzeit wird die Hamiltonmatrix für einen bestimmten invarianten Unterraum einmal berechnet und im Hauptspeicher abgelegt. Verglichen mit der Berechnung der Matrixelemente während der Diagonalisierung hat dies Vorteile, schränkt jedoch die maximale Größe der Hamiltonmatrix auf den auf unseren Rechnern verfügbaren Hauptspeicher ein. Um dies zu beheben, werden wir eine Option hinzufügen, die es erlaubt, Matrixelemente auch „im Flug“ zu berechnen.

The implementation of translational invariance (periodic boundary conditions) has been done for the Kondo lattice and Kondo necklace models; it is under development for the Heisenberg model. A further option would be to extend the application to the computation of spectral functions and will be the next step. This would imply generating two sets of Lanczos eigenvalues and eigenvectors for different starting states differing, e.g., by one in their particle and/or spin quantum number. Currently, the Hamiltonian matrix for a particular symmetry sector is calculated once and stored in memory. This has some advantage as compared to generating the Hamiltonian matrix elements when needed during the calculation, but restricts the maximum size of the Hamiltonian to the available main memory of the machines we have. To remedy this, an option to generate the matrix elements “on the fly” will be added.

References

- [1] *C. Lanczos*, Journal of Research of the National Bureau of Standards **45** (1950) 255.
- [2] *J. Jaklic and P. Prelovšek*, Phys. Rev. B **49** (1994) 5065
- [3] *J. Jaklic and P. Prelovšek*, Advances in Physics **49** (2000) 1.
- [4] *A. Langari, M. A. Martin-Delgado, and P. Thalmeier*, Phys. Rev. B **63** (2001) 144420.
- [5] *B. Schmidt, V. Yushankhai, L. Siurakshina, and P. Thalmeier*, Eur. Phys. J. B **32** (2003) 43.
- [6] *B. Schmidt, V. Yushankhai, L. Siurakshina, and P. Thalmeier*, J. Magn. Magn. Mater. **272-276 Supplement 1** (2004) E3673.
- [7] *N. Shannon, B. Schmidt, K. Penc, and P. Thalmeier*, Eur. Phys. J. B **38** (2003) 599.
- [8] *B. Schmidt and P. Thalmeier*, Physica B: Cond. Matter. **359-361** (2005) 1387.
- [9] *S. Doniach*, Physica B **91** (1997) 231.
- [10] *G. Grosso and P. Pastori Parravicini*, in: Memory Function Approches to Stochastic Problems in Condensed Matter IV 62, Edited by M. W. Evans, P. Grigolini, and P. Pastori Parravicini (New York John Wiley and Sons, 1985) pp. 133-181.
- [11] *J. C. Boner and M. E. Fisher*, Phys. Rev. **153** (1964) A640.
- [12] *H. Shiba and P. A. Pincus*, Phys. Rev. B **5** (1972) 1966.
- [13] *S. Bacci, E. Gagliano, and E. Dagotto*, Phys. Rev. B **44** (1991) 285.
- [14] *I. Zerec, B. Schmidt, and P. Thalmeier*, accepted for publication in Physica B, Proceedings of SCES'05.