

DISS. ETH NO. 23724

# **SERIES EXPANSION METHODS FOR QUANTUM LATTICE MODELS**

A thesis submitted to attain the degree of  
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH  
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

ANDREAS ROLAND HEHN

Dipl.-Phys., Universität Stuttgart

born on 19.02.1985

citizen of  
Germany

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. Matthias Troyer, examiner  
Prof. Dr. Simon Trebst, co-examiner

2016

# Abstract

In this thesis we study strongly correlated quantum many-body systems on regular lattices by means of high-order series expansions. We developed a C++ library which allows easy implementation of computer programs calculating high-temperature series and perturbative series at  $T = 0$  for quantum magnets, bosonic and fermionic lattice models.

We present a high-temperature series expansion code for spin-1/2 Heisenberg models on arbitrary lattices. As an example we demonstrate how to use the computer programs for an anisotropic triangular lattice with two independent couplings  $J_1$  and  $J_2$  and compute the high-temperature series of the magnetic susceptibility and the static structure factor up to 12<sup>th</sup> and 10<sup>th</sup> order, respectively. We show how to extract effective coupling constants for the triangular Heisenberg model from experimental data on  $\text{Cs}_2\text{CuBr}_4$ .

For the Bose-Hubbard model we implemented a perturbative  $T = 0$  series expansion code, which enables us give quantitative estimates for the phase boundaries of the Mott phases in the ground state of the system on arbitrary lattices. Here we consider the triangular lattice, the square lattice and the honeycomb lattice, as well as, weakly coupled stacked layers of those lattice geometries. We calculate the 12<sup>th</sup> order ground state energy series of the  $n = 1$  Mott state about the atomic limit. Furthermore, we calculate effective Hamiltonians for a single particle excitation and a single hole excitation from the Mott state up to 12<sup>th</sup> order. The same series expanded quantities are obtained for the  $n = 2$  Mott state up to 8<sup>th</sup> order.

As these series expansion techniques rely heavily on high-precision integer and polynomial arithmetic, we also present a high-performance computing (HPC) library which performs the required operations efficiently on today's supercomputers.

# Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit ist die Untersuchung von stark korrelierten Vielteilchensystemen auf regelmäßigen Gittern durch Reihenentwicklung. Wir haben eine C++ Bibliothek entwickelt, die eine einfache Implementation von Computer Programmen zur Berechnung von Hochtemperaturreihen und Störungsreihen am absoluten Nullpunkt für Quantenmagnete, sowie bosonische und fermionische Gittermodelle ermöglicht.

Wir präsentieren einen Programmcode zur Bestimmung von Hochtemperaturreihen für das Spin-1/2 Heisenberg Modell auf beliebigen Gittern. Als Beispiel demonstrieren wir, wie mithilfe des Programms für das anisotrope Dreiecksgitter mit zwei unabhängigen Kopplungen  $J_1$  und  $J_2$  die Hochtemperaturreihe der magnetischen Suszeptibilität und der statische Strukturfaktor bis zur einschliesslich 12. Ordnung bzw. 10. Ordnung berechnet werden kann. Desweiteren zeigen wir, wie die effektive Kopplungskonstanten für das Heisenberg Modell von Experimentdaten für  $\text{Cs}_2\text{CuBr}_4$  extrahiert werden können.

Für das Bose-Hubbard Modell haben wir einen Programmcode zur Entwicklung von Störungsreihen am absoluten Nullpunkt implementiert, welcher es uns ermöglicht, quantitative Abschätzungen für die Phasengrenze der Mottphase im Grundzustand des Systems für beliebige Gitter erhalten zu können. An dieser Stelle betrachten wir das Dreiecksgitter, das Quadratgitter und das Honigwabengitter, sowie schwach gekoppelte Stapel dieser Gittergeometrien. Wir berechnen die Grundzustandsreihe des  $n = 1$  Mottzustands bis zur 12. Ordnung um den atomaren Grenzfall. Desweiteren berechnen wir effektive Hamiltonoperatoren für ein einzelnes Teilchen und ein einzelnes Loch bezüglich des Mottzustands bis zur einschliesslich 12. Ordnung. Die selben Größen werden für den  $n = 2$  Mottzustand bis zur 8. Ordnung bestimmt.

Da die Reihenentwicklungsmethoden hauptsächlich auf Arithmetik mit Integern von hoher Genauigkeit und Polynomen beruht, präsentieren wir auch eine Programmbibliothek für zur effizienten Hochleistungsrechnung auf modernen Supercomputern.