

High-temperature series expansions for lattice systems

Doctoral Thesis

Author(s):

Körner, Mathias

Publication date:

2005

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005062471>

Rights / license:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

Diss. ETH No. 16087

High-Temperature Series Expansions for Lattice Systems

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZÜRICH
(ETH Zürich)

for the degree of
Doctor of Natural Science

presented by

MATHIAS KÖRNER

Dipl. Phys. ETH
born January 15, 1974
German citizen

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. M. Troyer, examiner
Prof. Dr. M. Sigrist, co-examiner

2005

Abstract

The aim of the first part of this thesis is to study strongly-correlated quantum lattice models arising in the description of the copper oxide superconductors with the help of high-temperature series expansions. After a review of the high-temperature series expansion and the methods of analytic continuation that we use to analyze the series, we first study a static nonmagnetic impurity in a quantum critical bilayer antiferromagnet. We examine how the high-temperature series of the susceptibility of a static nonmagnetic impurity can be calculated and determine the low-temperature effective spin of this impurity, which has been predicted to be fractionalized using field theoretical methods. The data obtained from the series expansion is compared to data from quantum Monte Carlo simulations, and both simulation methods yield a non-fractionalized value of the impurity spin. Next, the normal-state properties of the t - t' - J model are studied to gain a better understanding of the asymmetry of this model for different signs of the next-nearest neighbor hopping t' , which corresponds to different types of doping experimentally. We confirm that a positive t' enhances the antiferromagnetism in the system and leads to a free electron-like Fermi-surface satisfying Luttingers theorem. A negative t' on the other hand suppresses antiferromagnetism and leads to a complex behavior that can be explained by the presence of a flat band in the dispersion.

In the second part of the thesis we apply techniques used in the construction of the high-temperature series expansion to combine cluster updates with multicanonical updates in the Monte Carlo simulation of continuous spin models. Combining both methods can reduce the critical slowing down of the multicanonical updates and we demonstrate this on two example system. The last part of this thesis studies the limiting form of the ground-state energy distribution of a spin glass. For mean-field spin glasses the limiting distribution is found to be non-Gaussian, while non-mean-field spin glasses are found to have a Gaussian limiting distribution.

Kurzfassung

Das Ziel des ersten Teils dieser Dissertation ist die Untersuchung stark korrelierter Quantensysteme auf Gittern, die in der Beschreibung der Kupferoxid Supraleiter vorkommen, mit Hilfe von Hochtemperaturreihenentwicklungen. Nach einem Überblick über die Hochtemperaturreihenentwicklung und die Methoden der analytischen Fortsetzung, die wir verwenden um die Reihen zu analysieren, studieren wir zuerst eine statische, nichtmagnetische Verunreinigung in einem quantenkritischen Zweischichten-Antiferromagneten. Wir untersuchen wie die Hochtemperaturreihe der Suszeptibilität einer solchen Verunreinigung berechnet werden kann und untersuchen das Tieftemperaturverhalten des effektiven Spins dieser Verunreinigung, für den mit Hilfe feldtheoretischer Methoden eine Fraktionalisierung vorhergesagt wurde. Wir vergleichen die Resultate der Reihenentwicklung mit Quanten Monte Carlo Simulationen und beide Simulationsmethoden ergeben einen nichtfraktionalisierten Wert für den effektiven Spin der Verunreinigung. Als nächstes untersuchen wir die Eigenschaften des $t-t'-J$ Modells im Normalzustand, um ein besseres Verständnis der Asymmetrie dieses Modells bezüglich unterschiedlicher Vorzeichen von t' , die experimentell unterschiedlichen Typen von Doping entsprechen, zu erreichen. Wir bestätigen, dass ein positives t' zum einen den Antiferromagnetismus verstärkt und zum anderen zu einer freien-Elektronen-artigen Fermifläche führt, die den Satz von Luttinger erfüllt. Auf der anderen Seite unterdrückt ein negatives t' den Antiferromagnetismus und führt zu einem komplexen Verhalten, das durch die Anwesenheit eines flachen Bandes in der Dispersion erklärt werden kann.

Im zweiten Teil der Dissertation wenden wir Techniken, die wir zur Konstruktion der Hochtemperaturreihe benutzten, an um Cluster Updates mit Multikanonischen Updates für die Monte Carlo Simulation von kontinuierlichen Spin Modellen zu kombinieren. Die Kombination beider Methoden führt zu einer Reduzierung der kritischen Verlangsamung, und wir illustrieren dies an zwei Beispielsystemen. Der letzte Teil dieser Dissertation untersucht die Grenzverteilung der Grundzustandsenergie eines Spinglases. Für mean-field Spingläser ist diese Grenzwertverteilung eine nicht-Gaussche Verteilung und für nicht-mean-field Spingläser eine Gaussche Verteilung.