

Théorie de champ moyen dynamique sur amas (CDMFT), amélioration de la boucle d'auto-cohérence

Antoine de Lagrave

Initiation à la recherche (PHQ662)
Département de Physique
Université de Sherbrooke

Mise en contexte

On souhaite décrire le comportement d'un électron qui se déplace dans un réseau cristallin. Les premières approches sont

On souhaite décrire le comportement d'un électron qui se déplace dans un réseau cristallin. Les premières approches sont

- ◇ La théorie des bandes (sans interaction)

On souhaite décrire le comportement d'un électron qui se déplace dans un réseau cristallin. Les premières approches sont

- ◇ La théorie des bandes (sans interaction)
- ◇ DFT (*Density functional theory*)

On souhaite décrire le comportement d'un électron qui se déplace dans un réseau cristallin. Les premières approches sont

- ◇ La théorie des bandes (sans interaction)
- ◇ DFT (*Density functional theory*)
- ◇ Développement perturbatif (*Hartree-Fock*)

On souhaite décrire le comportement d'un électron qui se déplace dans un réseau cristallin. Les premières approches sont

- ◇ La théorie des bandes (sans interaction)
- ◇ DFT (*Density functional theory*)
- ◇ Développement perturbatif (*Hartree-Fock*)
- ◇ DMFT (*Dynamical mean-field theory*), CDMFT (*Cluster dynamical mean-field theory*)...

On souhaite décrire le comportement d'un électron qui se déplace dans un réseau cristallin. Les premières approches sont

- ◇ La théorie des bandes (sans interaction)
- ◇ DFT (*Density functional theory*)
- ◇ Développement perturbatif (*Hartree-Fock*)
- ◇ DMFT (*Dynamical mean-field theory*), CDMFT (*Cluster dynamical mean-field theory*)...

Note

Les modèles comme celui de Hubbard ont tous un point commun : l'espace de Hilbert croît trop rapidement (4^L , L : nombre de sites).

Table des matières

1 Théorie

- Modèle d'impureté d'Anderson
- Formalisme de Green dans la base mixte

2 Méthodes numériques

- CDMFT
- Amélioration de l'auto-cohérence
- PyQCM

3 Résultats

4 Conclusion

Théorie

Théorie - Modèle d'impureté d'Anderson

Hamiltonien du modèle d'impureté d'Anderson ¹ :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{AIM}} = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + \\ & \sum_{i,\nu,\sigma} (\theta_{i\nu,\sigma} c_{i,\sigma}^{\dagger} a_{\nu,\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_{\nu,\sigma} \epsilon_{\nu,\sigma} a_{\nu,\sigma}^{\dagger} a_{\nu,\sigma}, \end{aligned} \quad (1)$$

1. [Maxime CHARLEBOIS](#). "Théorie de champ moyen dynamique pour les systèmes inhomogènes". [Thèse de doct. Université Laval](#), 2015.

Théorie - Modèle d'impureté d'Anderson

Hamiltonien du modèle d'impureté d'Anderson ¹ :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{AIM}} = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + \\ & \sum_{i,\nu,\sigma} (\theta_{i\nu,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger a_{\nu,\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_{\nu,\sigma} \epsilon_{\nu,\sigma} a_{\nu,\sigma}^\dagger a_{\nu,\sigma}, \end{aligned} \quad (1)$$

Définition : Opérateurs d'échelle

Les opérateurs c^\dagger, c sont des opérateurs de création anihilation dans la base des sites. a^\dagger, a jouent le même rôle dans la base des sites de bain.

1. CHARLEBOIS, "Théorie de champ moyen dynamique pour les systèmes inhomogènes".

Théorie - Modèle d'impureté d'Anderson

Termes de Hubbard :

$$\mathbf{H}_{\text{AIM}} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + \dots$$

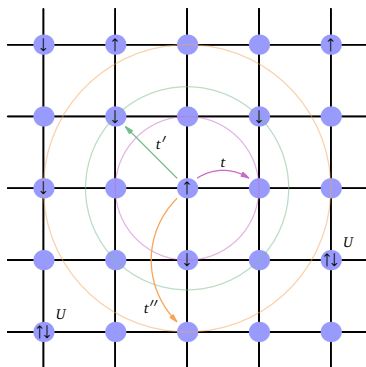


Figure – Schéma du modèle de Hubbard pour un réseau cristallin en 2 dimensions.

Termes liés à l'impureté :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{AIM}} = & \dots + \sum_{i,\nu,\sigma} (\theta_{i\nu,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger a_{\nu,\sigma} + \text{h.c.}) \\ & + \sum_{\nu,\sigma} \epsilon_{\nu,\sigma} a_{\nu,\sigma}^\dagger a_{\nu,\sigma} + \dots \end{aligned}$$

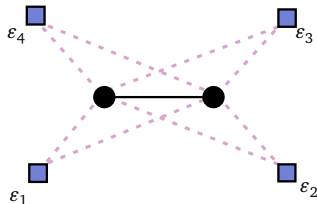


Figure – Schéma d'un amas de deux sites réels liés à 4 sites de bain.

Théorie - Formalisme de Green & base mixte

Formalisme de Green

L'accès aux observables se fait via la fonction de Green retardée

$$G_{\mu\nu}(t) = -i\Theta(t)\langle c_\mu(t)c_\nu^\dagger + c_\nu^\dagger c_\mu(t)\rangle. \quad (2)$$

Théorie - Formalisme de Green & base mixte

Formalisme de Green

L'accès aux observables se fait via la fonction de Green retardée

$$G_{\mu\nu}(t) = -i\Theta(t)\langle c_\mu(t)c_\nu^\dagger + c_\nu^\dagger c_\mu(t)\rangle. \quad (2)$$

Note

La dépendance de $G_{\mu\nu}(t)$ au hamiltonien \mathbf{H} est dissimulée dans la dépendance temporelle de l'opérateur $c_\mu(t) = e^{i\mathbf{H}t}c_\mu e^{-i\mathbf{H}t}$.

Théorie - Formalisme de Green & base mixte

Formalisme de Green

Équations matricielles obtenues grâce aux éqs. du mouvement $\dot{G}_{\mu\nu}(t)$

$$\underbrace{\mathbf{G}_0^{-1}(z) = z - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})}_{\text{sans interactions}}, \quad \underbrace{\mathbf{G}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, z) = \mathbf{G}_0^{-1}(z) - \Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z)}_{\text{avec interactions}} \quad (3)$$

Théorie - Formalisme de Green & base mixte

Formalisme de Green

Équations matricielles obtenues grâce aux éqs. du mouvement $\dot{G}_{\mu\nu}(t)$

$$\underbrace{\mathbf{G}_0^{-1}(z) = z - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})}_{\text{sans interactions}}, \quad \underbrace{\mathbf{G}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, z) = \mathbf{G}_0^{-1}(z) - \Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z)}_{\text{avec interactions}} \quad (3)$$

Définition : *self-énergie* Σ

La *self-énergie* est une quantité dont nous avons peu d'information. On peut la voir comme l'effet de l'interaction sur la propagation d'un électron (ex : piscine à balles).

Méthodes numériques

On choisit un amas pour lequel on calcule la fonction de Green en tenant compte des interactions avec le bain via \mathbf{H}_{AIM}

$$\mathbf{G}_c^{-1}(z) = z - \mathbf{t}_c - \Sigma_c(z) - \Gamma(z). \quad (4)$$

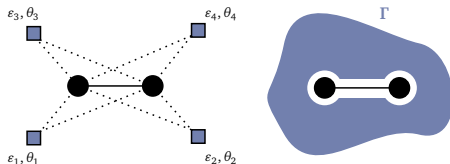


Figure – Amas 1D plongé dans un bain sans interactions.

Définition : Fonction d'hybridation $\Gamma(z)$

L'effet du bain sur la fonction de Green est encapsulé dans l'hybridation

$$\Gamma(z) = \Gamma_{ij,\sigma}(z) = \sum_{\nu} \frac{\theta_{i\nu,\sigma} \theta_{j\nu,\sigma}^*}{z - \epsilon_{\nu,\sigma}}, \quad (5)$$

à l'intérieur de laquelle sont stockés les paramètres variationnels de l'algorithme CDMFT.

Grâce au formalisme de base mixte, on calcule la fonction de Green projetée sur l'amas

$$\bar{\mathbf{G}}(z) = \left[\frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, z) \right]_{\tilde{\mathbf{r}}=0} = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{z - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_c(z)}. \quad (6)$$

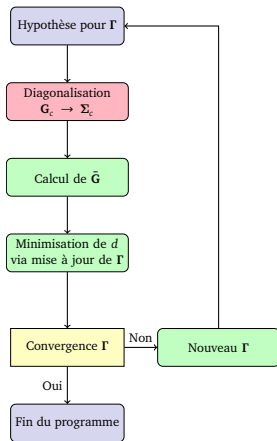
Grâce au formalisme de base mixte, on calcule la fonction de Green projetée sur l'amas

$$\bar{\mathbf{G}}(z) = \left[\frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, z) \right]_{\tilde{\mathbf{r}}=0} = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{z - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_c(z)}. \quad (6)$$

L'essence de la CDMFT est d'obtenir une correspondance entre $\mathbf{G}_c(z)$ et $\bar{\mathbf{G}}(z)$ via l'approximation locale de la self-énergie :

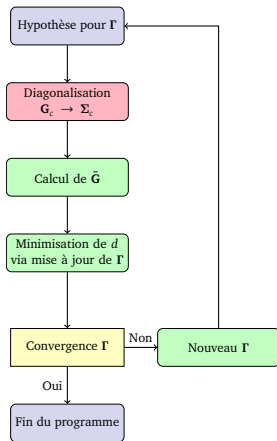
$$\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z) \longrightarrow \Sigma_c(z), \quad (7)$$

dans une boucle d'auto-cohérence.



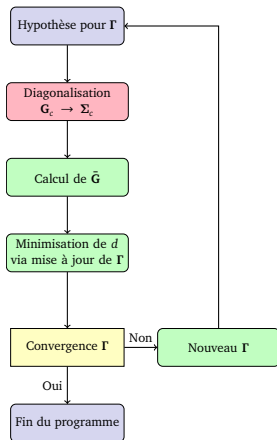
- ◇ Des paramètres ε_i, θ_i arbitraires sont définis pour l'hybridation d'essai $\Gamma(z)$

Méthodes numériques - CDMFT



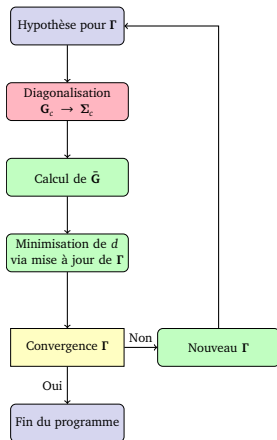
- ◇ Des paramètres ε_i, θ_i arbitraires sont définis pour l'hybridation d'essai $\Gamma(z)$
- ◇ Solutionneur d'impureté (ED) pour accéder à $\mathbf{G}_c \rightarrow \Sigma_c$

Méthodes numériques - CDMFT



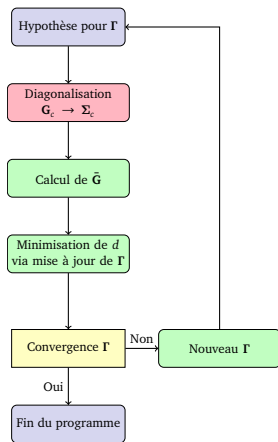
- ◇ Des paramètres ε_i, θ_i arbitraires sont définis pour l'hybridation d'essai $\Gamma(z)$
- ◇ Solutionneur d'impureté (ED) pour accéder à $\mathbf{G}_c \rightarrow \Sigma_c$
- ◇ Calcul de la fonction de Green **projetée sur l'amas $\bar{\mathbf{G}}$**

Méthodes numériques - CDMFT



- ◇ Des paramètres ε_i, θ_i arbitraires sont définis pour l'hybridation d'essai $\Gamma(z)$
- ◇ Solutionneur d'impureté (ED) pour accéder à $\mathbf{G}_c \rightarrow \Sigma_c$
- ◇ Calcul de la fonction de Green **projetée sur l'amas $\bar{\mathbf{G}}$**
- ◇ Minimise la fonction de distance d grâce aux paramètres de $\Gamma(z)$

Méthodes numériques - CDMFT



- ◇ Des paramètres ε_i, θ_i arbitraires sont définis pour l'hybridation d'essai $\Gamma(z)$
- ◇ Solutionneur d'impureté (ED) pour accéder à $\mathbf{G}_c \rightarrow \Sigma_c$
- ◇ Calcul de la fonction de Green **projetée sur l'amas $\bar{\mathbf{G}}$**
- ◇ Minimise la fonction de distance d grâce aux paramètres de $\Gamma(z)$
- ◇ L'hybridation mise à jour est comparée à celle de l'itération précédente pour vérifier la convergence

Méthodes numériques - Amélioration de l'auto-cohérence

L'idée est de morceler le bain en sous-bains dont un seul est impliqué dans la diagonalisation à chaque itération

$$\Gamma(z) \longrightarrow \Gamma_1(z) + \Gamma_2(z) \quad (8)$$

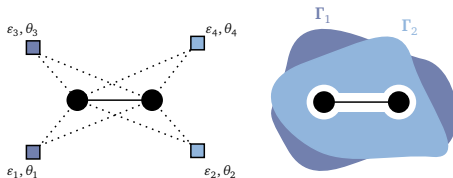
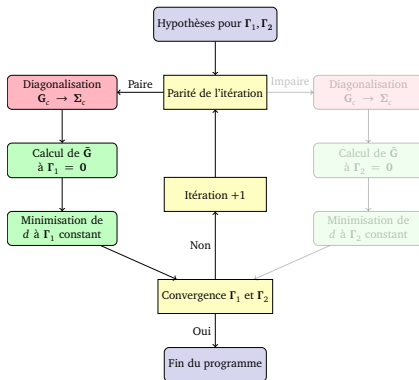
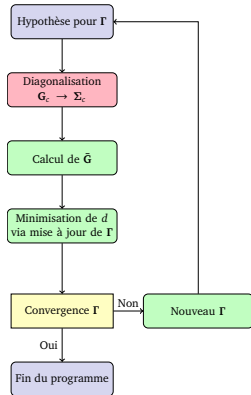
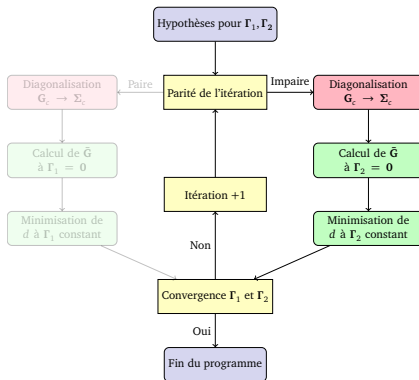
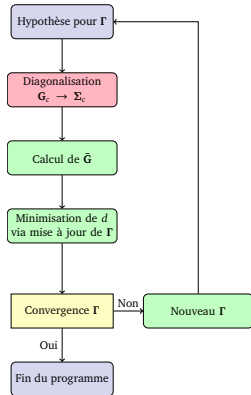


Figure – Amas 1D plongé dans deux sous-bains sans interactions.

Méthodes numériques - Amélioration de l'auto-cohérence



Méthodes numériques - Amélioration de l'auto-cohérence



"Pyqcm is a Python/C++ library that implements a few quantum cluster methods with an exact diagonalization impurity solver. Quantum cluster methods are used in the study of strongly correlated electrons to provide an approximate solution to Hubbard-like models. . ." - David Sénéchal.

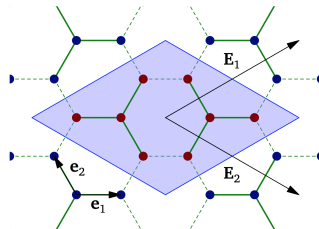


Figure – Réseau cristallin nid d’abeilles³.

3. **Théo N. DIONNE et al.** Pyqcm : An open-source Python library for quantum cluster methods. 2023. DOI : [10.21468/SciPostPhysCodeb.23](https://doi.org/10.21468/SciPostPhysCodeb.23).

Résultats

Résultats - CDMFT conventionnelle

Amas de 2 sites avec 2 sites de bain

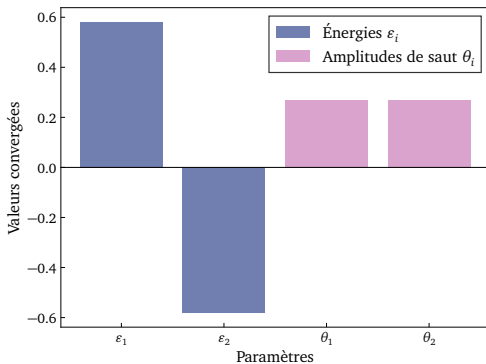
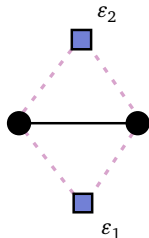


Figure – Paramètres de bain d'un amas de deux sites réels lié à 2 sites de bain.

Résultats - CDMFT conventionnelle

Amas de 2 sites avec 4 sites de bain

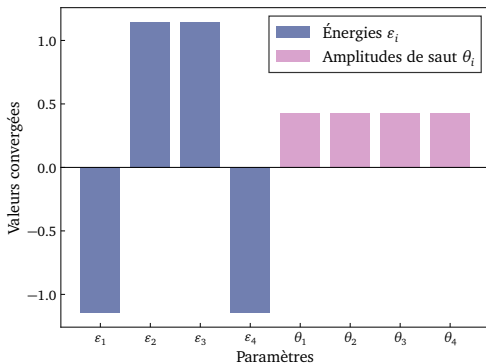
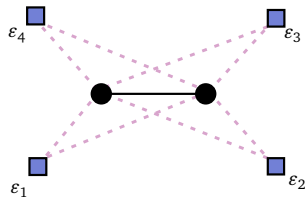


Figure – Paramètres de bain d'un amas de deux sites réels lié à 4 sites de bain.

Résultats - CDMFT à bains virtuels

Amas de 2 sites avec 2 sites de bains par sous-bain

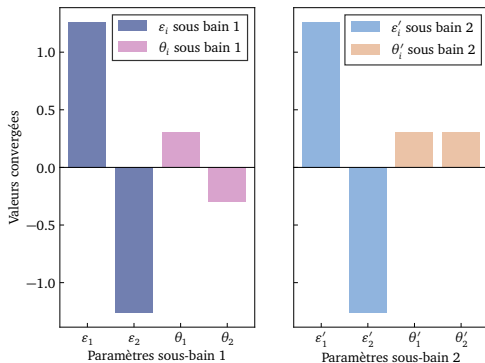
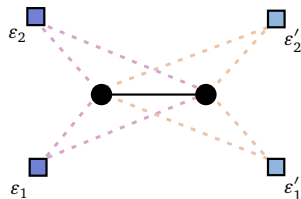


Figure – Paramètres de bain d'un amas de deux sites réels lié à 2 sous-bains de 2 sites.

Résultats - CDMFT à bains virtuels

Amas de 2 sites avec 4 sites de bains par sous-bain

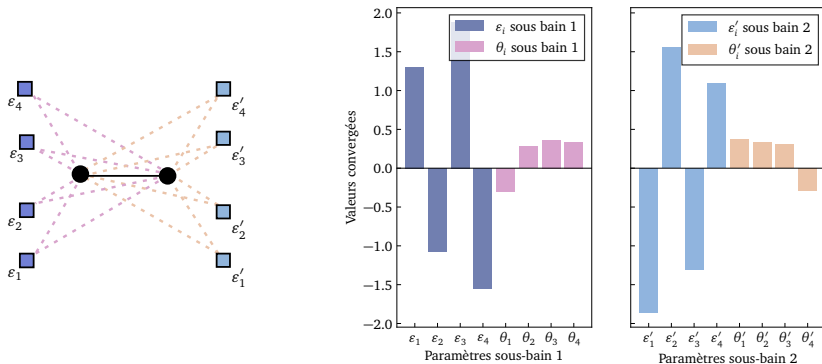


Figure – Paramètres de bain d'un amas de deux sites réels lié à 2 sous-bains de 4 sites.

Conclusion

Conclusion

- ◇ Description théorique relative aux méthodes de champ moyen pour le problème à N-corps
- ◇ Explication de la CDMFT, modification de la boucle d'auto-cohérence
- ◇ Vitesse, relations de symétrie entre les paramètres de bain

Pistes

Études des symétries (théorie des groupes), minimisation des deux sous-bains en même temps.

Merci

La fonction de distance est donnée par

$$d = \sum_{i\omega_n, \mu, \nu} W_n |(\mathbf{G}_c^{-1}(i\omega_n) - \bar{\mathbf{G}}^{-1}(i\omega_n))_{\mu\nu}|^2, \quad (9)$$

où $i\omega_n$ sont les fréquences de Matsubara et W_n des poids arbitraires liés auxdites fréquences.

Annexe - Base mixte

La base mixte est une façon d'exprimer le problème,

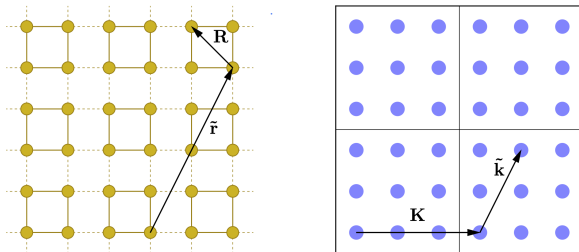


Figure – (gauche) Réseau carré bidimensionnel découpé en amas dans la base des sites. (droite) Zone de Brillouin associée au réseau⁵.

5. Maxime CHARLEBOIS. “Théorie de champ moyen dynamique pour les systèmes inhomogènes”. Thèse de doct. Université Laval, 2015.

Grâce aux transformée de Fourier partielles⁶, on sépare les degrés de liberté inter-intra amas

$$f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}) = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}}) \quad (10)$$

$$f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}), \quad (11)$$

Note

Le terme cinétique et la *self-énergie* s'écrivent donc

$$\Sigma = \Sigma_c(\mathbf{R}, z) + \Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z), \quad \mathbf{t} = \mathbf{t}_c(\mathbf{R}) + \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})$$

6. "Quantum cluster theories". In : *Rev. Mod. Phys.* 77 (3 oct. 2005), p. 1027-1080. DOI : 10.1103/RevModPhys.77.1027. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.77.1027>.