

# Théorie de champ moyen dynamique sur amas (CDMFT), décomposition du bain en sous-bains

Antoine de Lagrave

Sommaire projet de maîtrise  
Département de physique  
7 novembre 2024



Université de  
Sherbrooke

UQTR



Université du Québec  
à Trois-Rivières

Alternative à la représentation de l'effet du réseau cristallin sur un amas en CDMFT (*Cluster Dynamical Mean Field Theory*)

Alternative à la représentation de l'effet du réseau cristallin sur un amas en CDMFT (*Cluster Dynamical Mean Field Theory*)

- ◇ Morceler le bain en sous-bains
- ◇ Modifier l'algorithme CDMFT original de PyQCM<sup>1</sup>
- ◇ Étalonner la méthode et obtenir des premiers résultats

---

1. 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).

# Mise en contexte - Essence du projet

Alternative à la représentation de l'effet du réseau cristallin sur un amas en CDMFT (*Cluster Dynamical Mean Field Theory*)

- ◇ Morceler le bain en sous-bains
- ◇ Modifier l'algorithme CDMFT original de PyQCM<sup>1</sup>
- ◇ Étalonner la méthode et obtenir des premiers résultats

**Note :** Taille de l'espace de Hilbert en diagonalisation

$$4^{\left(n_s + \frac{n_b}{\lambda}\right)} \quad \text{vs} \quad 4^{(n_s + n_b)}$$

---

1. 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).

## 1 Théorie

- Modèle d'impureté d'Anderson
- Formalisme de Green

## 2 Méthodes numériques

- CDMFT & PyQCM
- Algorithme de sous-bains

## 3 Résultats

- Étalonnage de la méthode
- Résultats DMFT & CDMFT

# Théorie

# Théorie - Modèle d'impureté d'Anderson

Hamiltonien du modèle d'impureté d'Anderson<sup>2</sup> :

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

---

2. Maxime Charlebois. "Théorie de champ moyen dynamique pour les système inhomogènes". [Thèse de doct. Université Laval 2015](#).

# Théorie - Modèle d'impureté d'Anderson

Hamiltonien du modèle d'impureté d'Anderson<sup>2</sup> :

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

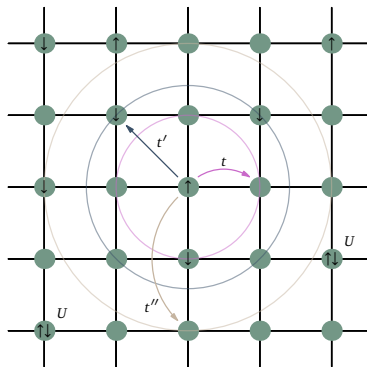
**Définition :** Opérateurs d'échelle Les opérateurs  $c^{\dagger}, c$  sont des opérateurs de création/annihilation dans la base des sites.  $a^{\dagger}, a$  jouent le même rôle pour les sites de bain.



# Théorie - Modèle d'impureté d'Anderson

Termes de Hubbard :

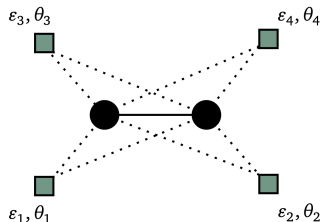
$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{AIM}} = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ & - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + \dots \end{aligned}$$



# Théorie - Modèle d'impureté d'Anderson

Termes liés à l'impureté :

$$\mathbf{H}_{\text{AIM}} = \dots + \sum_{i,v,\sigma} (\theta_{iv,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger a_{v,\sigma} + \text{h.c.}) \\ + \sum_{v,\sigma} \epsilon_{v,\sigma} a_{v,\sigma}^\dagger a_{v,\sigma}$$



L'accès aux observables se fait via la fonction de Green retardée<sup>3</sup>

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

---

3. Maxime Charlebois. "Théorie de champ moyen dynamique pour les système inhomogènes". [Thèse de doct. Université Laval 2015.](#)

L'accès aux observables se fait via la fonction de Green retardée<sup>3</sup>

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

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

---

3. Maxime Charlebois. "Théorie de champ moyen dynamique pour les système inhomogènes". [Thèse de doct. Université Laval 2015](#).

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

$$\underbrace{\mathbf{G}_0^{-1} = \mathbf{Z} - \mathbf{t},}_{\text{sans interactions}}$$

$$\underbrace{\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{\Sigma}}_{\text{avec interactions}} \quad (3)$$

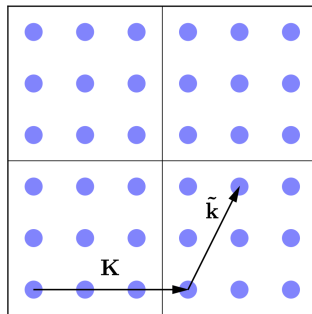
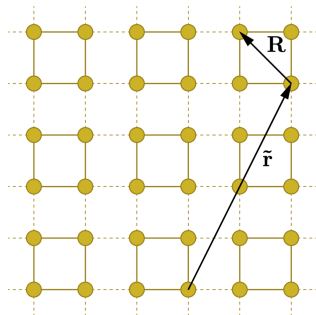
Équations matricielles obtenues grâce aux éqs. du mouvement  
 $\dot{G}_{\mu\nu}(t)$

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

**Définition :** *self-énergie*  $\Sigma$  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).

# Théorie - Formalisme de Green

La nature de la CDMFT nous encourage à utiliser la base mixte ici représentée<sup>4</sup> pour exprimer les fonctions de Green



4. Maxime Charlebois. "Théorie de champ moyen dynamique pour les système inhomogènes". *Thèse de doct.* Université Laval 2015.

Grâce à ce choix de base, on sépare les dépendances inter-intra amas comme

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



Grâce à ce choix de base, on sépare les dépendances inter-intra amas comme

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

en ayant utilisé les transformées de Fourier partielles suivantes

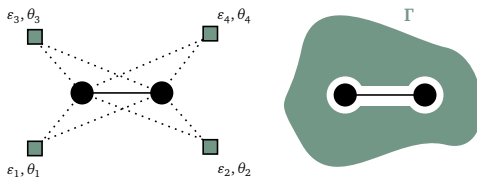
$$f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}) = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}}) \quad (4)$$

$$f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} f(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}), \quad (5)$$

# Méthodes numériques

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

$$\mathbf{G}_c^{-1}(z) = z - \mathbf{t}_c - \Sigma_c(z) - \Gamma(z). \quad (6)$$



L'effet du bain sur la fonction de Green est encapsulé dans ladite **fonction d'hybridation  $\Gamma(z)$**

$$\Gamma(z) = \Gamma_{ij,\sigma}(z) = \sum_v \frac{\theta_{iv,\sigma} \theta_{jv,\sigma}^*}{z - \epsilon_{v,\sigma}}, \quad (7)$$

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

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* :

$$\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z) \longrightarrow \Sigma_c(z), \quad (8)$$

dans une boucle d'auto-cohérence.

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** :

$$\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z) \longrightarrow \Sigma_c(z), \quad (8)$$

dans une boucle d'auto-cohérence.

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

$$\bar{\mathbf{G}}(z) = \left[ \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, z) \right]_{\tilde{\mathbf{r}}=0} = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{z - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_c(z)}. \quad (9)$$

La fonction de distance est donnée par

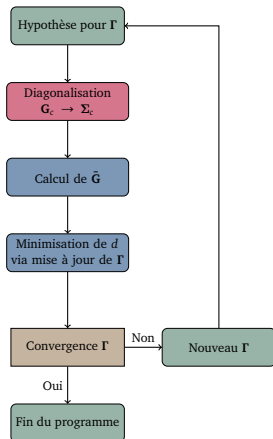
$$d = \sum_{i\omega_n, \mu, \nu} W_n |(\mathbf{G}_c^{-1}(i\omega_n) - \bar{\mathbf{G}}^{-1}(i\omega_n))_{\mu\nu}|^2 \quad (10)$$

$$= \sum_{i\omega_n, \mu, \nu} W_n |(\mathbf{\Gamma}(i\omega_n) - \bar{\mathbf{\Gamma}}(i\omega_n))_{\mu\nu}|^2, \quad (11)$$

où  $i\omega_n$  sont les fréquences de Matsubara et  $W_n$  des poids arbitraires. C'est grâce à cette fonction que l'on calcule la correspondance entre  $\mathbf{G}_c(z)$  et  $\bar{\mathbf{G}}(z)$ .

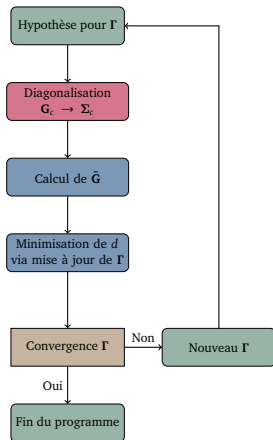
# Méthodes numériques - CDMFT & PyQCM

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



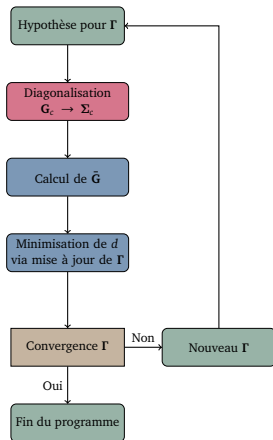


# Méthodes numériques - CDMFT & PyQCM



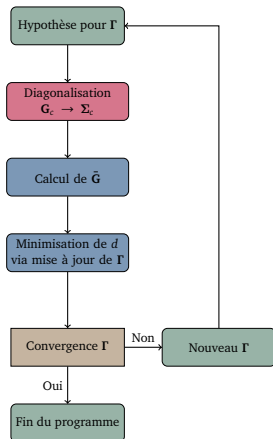
- ◇ Des paramètres  $\varepsilon_i, \theta_i$  arbitraires sont définis pour l'hybridation d'essai  $\Gamma(z)$
- ◇ Solutionneur d'impureté (ED) pour accéder à  $\mathbf{G}_c \rightarrow \Sigma_c$

# Méthodes numériques - CDMFT & PyQCM



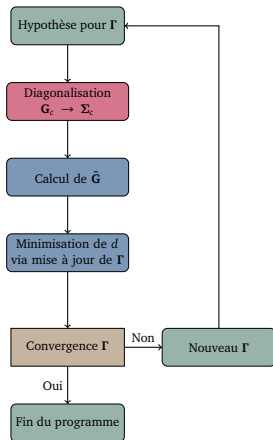
- ◇ Des paramètres  $\varepsilon_i, \theta_i$  arbitraires sont définis pour l'hybridation d'essai  $\Gamma(z)$
- ◇ Solutionneur d'impureté (ED) pour accéder à  $\mathbf{G}_c \rightarrow \Sigma_c$
- ◇ Calcul de la fonction de Green **projetée sur l'amas  $\bar{\mathbf{G}}$**

# Méthodes numériques - CDMFT & PyQCM



- ◇ Des paramètres  $\varepsilon_i, \theta_i$  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  $\Gamma(z)$

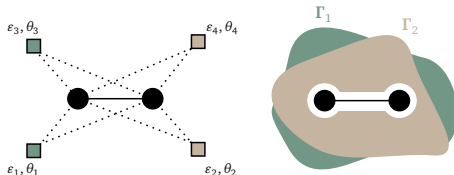
# Méthodes numériques - CDMFT & PyQCM



- ◇ Des paramètres  $\varepsilon_i, \theta_i$  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

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

$$\mathbf{G}_{c_i}^{-1}(z) = z - \mathbf{t}_{c_i}(z) - \mathbf{\Gamma}_{c_i}(z) - \mathbf{\Sigma}_{c_i}(z) \quad (12)$$



Cependant, que se passe-t-il avec l'approximation locale de la self-énergie ? Plusieurs self-énergies sont valides...

$$\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z) \longrightarrow \Sigma_c(z), \quad (13)$$

Cependant, que se passe-t-il avec l'approximation locale de la self-énergie ? Plusieurs self-énergies sont valides...

$$\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z) \longrightarrow \lambda_1 \Sigma_{c_1}(z) + \lambda_2 \Sigma_{c_2}(z), \quad (14)$$

Cependant, que se passe-t-il avec l'approximation locale de la self-énergie? Plusieurs self-énergies sont valides...

$$\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, z) \longrightarrow \lambda_1 \Sigma_{c_1}(z) + \lambda_2 \Sigma_{c_2}(z), \quad (14)$$

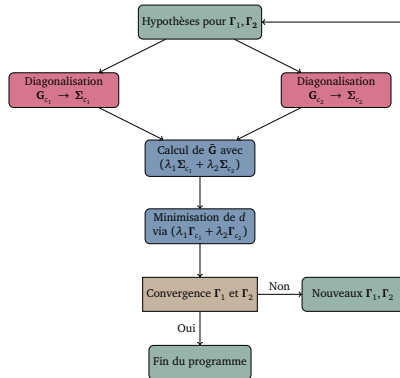
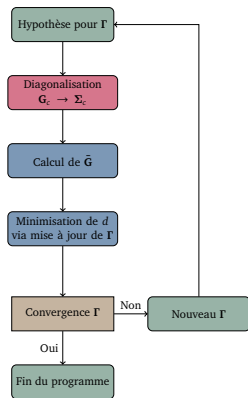
Ce qui modifie le calcul de la fonction de Green projetée et la fonction de distance

$$\bar{\mathbf{G}}(z) = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{z - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}}) - (\lambda_1 \Sigma_{c_1}(z) + \lambda_2 \Sigma_{c_2}(z))}. \quad (15)$$

$$d = \sum_{i\omega_n, \mu, \nu} W_n |(\lambda_1 \Gamma_{c_1}(i\omega_n) + \lambda_2 \Gamma_{c_2}(i\omega_n) - \bar{\Gamma}(i\omega_n))_{\mu\nu}|^2 \quad (16)$$



# Méthodes numériques - Algorithme de sous-bains



## Résultats

Rendez-vous sur [Notion](#)