

NOTES
STAGE ÉTÉ 2023

VARIATIONNAL MONTE-CARLO
E2023

par
Dimitri Bonanni-Surprenant

Remis à
Maxime Charlebois



Université de Sherbrooke - UQTR
Faculté des Sciences
Département de Physique
10 mai 2023

Table des matières

1	Semaine 2	3
1.1	Mardi le 9 Mai	3
1.1.1	Changement de base	3
1.1.2	Hubbard Intro Old	3
1.2	Mercredi le 10 Mai	7
1.2.1	Orthonormalité de l'ordre normal.	7

1 Semaine 2

1.1 Mardi le 9 Mai

1.1.1 Changement de base

Soit effectuons le changement de base de l'Hamiltonien de Hubbard.

$$H = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \quad (1)$$

Les transformées de Fourier des opérateurs création et annihilation sont

$$c_{i,k}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{i,\mathbf{r}}^\dagger \quad (2)$$

$$c_{i,\mathbf{r}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{i,\mathbf{r}}^\dagger \quad (3)$$

Allons-y terme à terme.

1.1.2 Hubbard Intro Old

Problème 1. Supposons que $N = 2$. Construire une représentation matricielle explicite, dans l'espace de Hilbert global de dimension $2^2 = 4$, des opérateurs suivants : c_1, c_2, n_1, n_2

Soit la base de l'espace de Hilbert

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\} \quad (4)$$

On sait que c_1 détruit le premier site, tandis que c_2 détruit le second, on peut donc les écrire en terme de mapping entre les états

$$c_1 : \{|00\rangle \rightarrow \mathbf{0}, |01\rangle \rightarrow |00\rangle, |10\rangle \rightarrow \mathbf{0}, |11\rangle \rightarrow |10\rangle\} \quad (5)$$

$$c_2 : \{|00\rangle \rightarrow \mathbf{0}, |01\rangle \rightarrow \mathbf{0}, |10\rangle \rightarrow |00\rangle, |11\rangle \rightarrow |01\rangle\} \quad (6)$$

Et donc si on écrit les états suivants

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$|01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$|10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$|11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10)$$

On obtient les matrices

$$c_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$c_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Problème 2. Supposons que $N = 2$ et considérons un état général à un électron $|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$, où $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Quelle est la probabilité que l'électron soit sur l'ion no 1 ? Quelles sont les valeurs moyennes de n_1 et n_2 ?

La probabilité d'être sur le site 1 est

$$|\langle 1|\psi\rangle|^2 = |\alpha|^2 \quad (13)$$

Les valeurs moyennes sont

$$|1\rangle = |01\rangle \quad |2\rangle = |10\rangle \quad (14)$$

$$\langle\psi|n_1|\psi\rangle = |\alpha|^2 \quad (15)$$

$$\langle\psi|n_2|\psi\rangle = |\beta|^2 \quad (16)$$

Problème 3. Considérer un modèle à $N = 4$ sites et comportant $M = 4$ électrons, avec $t = 0$. Trouver les deux niveaux d'énergie les plus bas avec les états correspondants. Combien y en a-t-il pour chacun des deux niveaux ?

Pour $t = 0$, le Hamiltonien de Hubbard devient

$$H = V = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (17)$$

Avec $M = 3$ électrons, le fondamental est celui que les trois électrons sont sur des sites différents, dégénérés plusieurs fois avec une énergie de $E = 0$. Le premier état excité est celui qui a un site avec deux électrons de spins opposés, avec une énergie de $E = U$, 4 fois dégénéré.

Problème 4. Démontrer la relation 22 et ensuite que les deux équations de 20 sont compatibles.

Commençons par $r = 0$, soit

$$\sum_k e^{ikr} = \sum_k 1 = N \quad (18)$$

Ensuite, allons-y avec $r \neq 0$.

$$\sum_{j=0}^{N-1} e^{ir(2\pi j/N)} = \frac{1 - e^{2\pi ir}}{1 - e^{2\pi ir/N}} \quad (19)$$

Comme r est un point du réseau, alors il s'agit d'un entier. Le numérateur s'annule donc, ce qu'il fallait démontrer.

Problème 5. Démontrer que les opérateurs $\tilde{c}_\sigma(\mathbf{k})$ et $\tilde{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{k})$ satisfont aux relations d'anticommutation suivantes :

$$\{\tilde{c}_\sigma(\mathbf{k}), \tilde{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}')\} = 0 \quad \{\tilde{c}_\sigma(\mathbf{k}), \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}')\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (20)$$

Partons des relations d'anti-commutation des opérateurs définis précédemment

$$\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = 0 \quad \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (21)$$

Soit alors les transformations de Fourier

$$\tilde{c}_\sigma(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{-ikr} c_\sigma(r) \quad \tilde{c}_\sigma^\dagger(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{ikr} c_\sigma^\dagger(r) \quad (22)$$

Alors, comme l'anti-commutateur est bilinéaire, on a que

$$\{\tilde{c}_\sigma(\mathbf{k}), \tilde{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}')\} = \frac{1}{N} \sum_{r,r'} e^{-ir\mathbf{k} - ir'\mathbf{k}'} \{c_\sigma(r), c_{\sigma'}(r')\} = 0 \quad (23)$$

$$\{\tilde{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{k}), \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}')\} = \frac{1}{N} \sum_{r,r'} e^{ir\mathbf{k} + ir'\mathbf{k}'} \{c_\sigma^\dagger(r), c_{\sigma'}^\dagger(r')\} = 0 \quad (24)$$

$$\{\tilde{c}_\sigma(\mathbf{k}), \tilde{c}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}')\} = \frac{1}{N} \sum_{r,r'} e^{-ir\mathbf{k} + ir'\mathbf{k}'} \{c_\sigma(r), c_{\sigma'}^\dagger(r')\} = \frac{1}{N} \sum_r e^{-ir(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (25)$$

$$= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (26)$$

Problème 6. Démontrer que l'opérateur K s'exprime comme suit en fonction des opérateurs $\tilde{c}_\sigma(\mathbf{k})$ et $\tilde{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{k})$:

$$K = -2t \sum_{\mathbf{k}\sigma} \cos(k) n_\sigma(\mathbf{k}) \quad n_\sigma(\mathbf{k}) \equiv \tilde{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) \tilde{c}_\sigma(\mathbf{k}) \quad (27)$$

Soit l'opérateur K

$$K = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \quad (28)$$

$$= -t \sum_{R,r,\sigma} (c_\sigma^\dagger(R+r) c_\sigma(R-r) + c_\sigma^\dagger(R-r) c_\sigma(R+r)) \quad (29)$$

avec

$$R = \frac{r_1 + r_2}{2} \quad r = \frac{r_1 - r_2}{2} \quad (30)$$

Alors

$$K = -\frac{t}{N} \sum_{R,r,\sigma,k,k'} (c_\sigma^\dagger(k) c_\sigma(k') e^{i(R+r)k - i(R-r)k'} + c_\sigma^\dagger(k') c_\sigma(k) e^{i(R-r)k - i(R+r)k'}) \quad (31)$$

$$= -\frac{t}{N} \sum_{R,r,\sigma,k,k'} (c_\sigma^\dagger(k) c_\sigma(k') e^{ir(k+k') + iR(k-k')} + c_\sigma^\dagger(k') c_\sigma(k) e^{-ir(k+k') + iR(k-k')}) \quad (32)$$

$$= -t \sum_{r,\sigma,k} (c_\sigma^\dagger(k) c_\sigma(k) e^{i2rk} + c_\sigma^\dagger(k) c_\sigma(k) e^{-i2rk}) \quad (33)$$

$$= -2t \sum_{r,\sigma,k} c_\sigma^\dagger(k) c_\sigma(k) \cos(2kr) \quad (34)$$

Problème 7. Démontrer que les opérateurs de nombre $n_\sigma(\mathbf{k})$ associés à des spins ou des nombres d'ondes différents commutent.

Les opérateurs création et annihilation associés à des nombres quantiques différents anticommulent. Alors, comme l'opérateur nombre est composé de deux opérateurs création et annihilation, il faut utiliser deux fois les relations d'anti-commutation pour faire traverser un autre opérateur création annihilation. Par conséquent, les opérateurs nombres et les opérateurs création annihilation associés à des nombres quantiques différents commutent. Il en va de soi que les opérateurs nombre associés à des nombres quantiques différents commutent.

Problème 8. Quel est l'état fondamental d'un système de N électrons installés sur un anneau de N sites ? On est à demi-remplissage, car la moitié du nombre maximum d'électrons ($2N$) sont présents.

À demi-remplissage, l'état ferromagnétique est l'état fondamental, comme c'est ainsi que l'on minimise le terme d'interaction, en limitant les paires d'électrons sur le même site. De plus, cette configuration minimise le terme de saut, car les électrons ne peuvent pas sauter aux sites voisins. On connaît déjà le fondamental du terme K à demi-remplissage, soit

$$\tilde{c}_{\sigma_1}^\dagger(k_1)(\cdots)\tilde{c}_{\sigma_N}^\dagger(k_N)|0\rangle \quad (35)$$

un état propre de K . Sachant qu'il y a N valeurs possibles de k dans la première zone de Brillouin, alors l'énergie, pourvue

Problème 9. *Quelle est la probabilité de trouver deux électrons sur un même site dans l'état fondamental trouvé ci-dessus ?*

1.2 Mercredi le 10 Mai

Deux problèmes à faire pour cette semaine, soit il faut montrer l'orthonormalité de l'ordre normal, et écrire un code qui diagonalise par bloc l'hamiltonien. Commençons par montrer que l'ordre normal est orthonormé.

1.2.1 Orthonormalité de l'ordre normal.

Soit l'ordre normal

$$c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger (\cdots) c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger (\cdots) |\{0\}^N\rangle \quad (36)$$

Références