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

1.1 Mardi le 9 Mai

1.1.1 Changement de base

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

$$H = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{<i,j>,\sigma} t_{ij} \left(c^\dagger_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + c^\dagger_{j,\sigma} c_{i,\sigma} \right) \tag{1}$$

Les transformées de Fourrier des opérateurs création et annihilation sont

$$c^\dagger_{i,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c^\dagger_{i,\mathbf{r}} \tag{2}$$

$$c^\dagger_{i,\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c^\dagger_{i,\mathbf{r}} \tag{3}$$

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

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\} \tag{4}$$

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

$$c_1 : \quad \{|00\rangle \to \mathbf{0}, |01\rangle \to |00\rangle, |10\rangle \to \mathbf{0}, |11\rangle \to |10\rangle\} \tag{5}$$

$$c_2 : \quad \{|00\rangle \to \mathbf{0}, |01\rangle \to \mathbf{0}, |10\rangle \to |00\rangle, |11\rangle \to |01\rangle\} \tag{6}$$

Et donc si on écrit les états suivants

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$|01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

$$|10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

$$|11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

On obtient les matrices

$$c_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

$$c_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{12}$$

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

$$|\langle 1|\psi\rangle|^2 = |\alpha|^2 \tag{13}$$

Les valeurs moyennes sont

$$|1\rangle = |01\rangle \qquad |2\rangle = |10\rangle \tag{14}$$

$$\langle\psi|n_1|\psi\rangle = |\alpha|^2 \tag{15}$$

$$\langle\psi|n_2|\psi\rangle = |\beta|^2 \tag{16}$$

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

$$H = V = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{17}$$

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

$$\sum_k e^{ikr} = \sum_k 1 = N \tag{18}$$

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

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

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 $\widetilde{c_\sigma}(\mathbf{k})$ et $\widetilde{c_\sigma}(\mathbf{k})$ satisfont aux relations d'anticommutation suivantes :*

$$\{\widetilde{c}_\sigma(\mathbf{k}), \widetilde{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}')\} = 0 \qquad \{\widetilde{c}_\sigma(\mathbf{k}), \widetilde{c}^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{k}')\} = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\mathbf{kk}'} \tag{20}$$

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

$$\{c_{i\sigma}, c_{j,\sigma'}\} = 0 \qquad \{c^\dagger_{i\sigma}, c^\dagger_{j,\sigma'}\} = 0 \qquad \{c_{i\sigma}, c^\dagger_{j,\sigma'}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{21}$$

Soit alors les transformations de Fourier

$$\widetilde{c}_\sigma(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{-ikr} c_\sigma(r) \qquad \widetilde{c}^\dagger_\sigma(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{ikr} c^\dagger_\sigma(r) \tag{22}$$

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

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

$$\{\widetilde{c}^\dagger_\sigma(\mathbf{k}), \widetilde{c}^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{k}')\} = \frac{1}{N} \sum_{r,r'} e^{irk+ir'k'} \{c^\dagger_\sigma(r), c^\dagger_{\sigma'}(r')\} = 0 \tag{24}$$

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

$$= \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{26}$$

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

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

Soit l'opérateur K

$$K = -t \sum_{<i,j>,\sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) \tag{28}$$

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

avec

$$R = \frac{r_1 + r_2}{2} \qquad r = \frac{r_1 - r_2}{2} \tag{30}$$

Alors

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

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

$$= -t \sum_{r,\sigma,k} \left(c_\sigma^\dagger(k) c_\sigma(k) e^{i2rk} + c_\sigma^\dagger(k) c_\sigma(k) e^{-2irk} \right) \tag{33}$$

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

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 anticommutent. 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*

Références