NOTES

STAGE ÉTÉ 2023

VARIATIONNAL MONTE-CARLO

E2023

par

Dimitri Bonanni-Surprenant

Remis à

Maxime Charlebois

Université du Québec
à Trois-Rivières

Université de Sherbrooke - UQTR
Faculté des Sciences
Département de Physique
16 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 $\widetilde{c_\sigma}^\dagger(\mathbf{k})$:*

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

Soit l'opérateur K

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

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

avec

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

Alors

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

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

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

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

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 la moitié du nombre maximum d'électrons ($2N$) sont présents.*

À demi-remplissage, l'état feromagnétique 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 connait déjà le fondamental du terme K à demi-remplissage, soit

$$\widetilde{c}^\dagger_{\sigma_1}(k_1)(\cdots)\widetilde{c}^\dagger_{\sigma_N}(k_N)|0\rangle \tag{35}$$

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

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

1.3 Jeudi le 11 Mai

Le but est de faire rouler le code de Peter. Voici la figure obtenue en roulant le `tutorial_updated`. Quelques problèmes ont été rencontrés, notes que j'ai compilées dans le fichier `patches.md`. En changeant les paramètres, je ne suis pas capable de reproduire les autres figures.

2 Semaine 3

2.1 Lundi le 15 Mai

2.1.1 Exemple hamiltonien

Pour diagonaliser l'hamiltonien, on veut trouver les sous-espaces qui sont indépendants. On cherche donc à trouver les blocs de l'hamiltonien. Pour ce faire, il faut encoder l'application de H sur nos états. Rappelons l'hamiltonien de Hubbard :

$$H = U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} - \sum_{<i,j>,\sigma} t_{ij}\left(c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}\right) \tag{37}$$

La base de l'espace de Fock qu'on utilise sera l'ordre normal énoncé plus haut. Alors on peut définir l'application des opérateurs qui composent H sur les vecteurs de la base.

$$c_{i\sigma}^{\dagger}|n\rangle = \begin{cases} \texttt{xor}\ \ n, 00\cdots1\cdots00, & \text{à la position } i\sigma, \text{si le bit } i\sigma \text{est nul.} \\ 0000 & \text{autrement.} \end{cases} \tag{38}$$

Or, cette notation peut mélanger le vecteur nul et l'état $|0\rangle$. On peut régler ce problème en introduisant un bit de signe. Alors tous les états sont représentés avec un 1 préposant tous les autres bits, le bit nul sera alors toujours le vecteur nul.

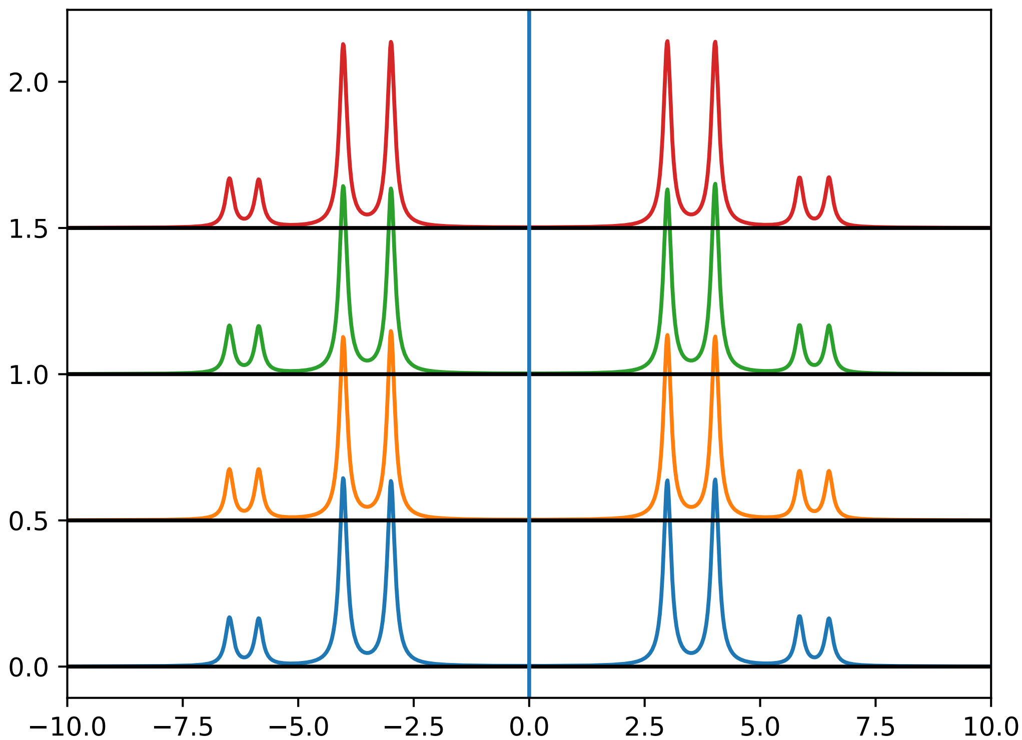

FIGURE 1 – Cette figure reproduit la figure de l'article [1].

Les opérateurs nombres sont simplement un and avec le bitshift adéquat. Par exemple, si je veut calculer $\langle n|n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}|n\rangle$, il faut

```
MOV EAX, n
MOV EBX, n
SHL EAX, N
AND EAX, EBX
```

FIGURE 2 – Pseudo-assembly représentant comment appliquer l'opérateur $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, pour tous les i. La valeur n représente l'état de Fock dans l'ordre normal, tandis que N représente le nombre de site. Le résultat attendu se trouvera dans le registre **EAX**, dans la première moitié du byte, pour les sites de $i = N - 1$ jusqu'à $i = 0$.

Cette implémentation du terme de l'hamiltonien a quelque limitation qui sont facilement corrigeable. En effet, supposons que nous avons les états $|7\rangle$ et $|8\rangle$, alors dépendant quel état que l'on shifte à gauche, on n'aura pas le même résultat. Mais ceci n'est pas important, car cet opérateur

est diagonal dans notre base, alors on peut simplement juste calculer cet élément de matrice pour les éléments diagonaux.
Le produit scalaire des états s'implémente facilement avec des opérations sur des nombres binaires, $\langle n'|n\rangle$ s'écrit

```
MOV EAX n'
MOV EBX n
XOR EAX EBX
```

FIGURE 3 – Produit scalaire en n et n'. Cette valeur sera 1 si **EAX** est nul, 0 pour toute autre valeur de **EAX**.

Le plus difficile est d'implémenter l'application de l'opérateur. $(c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i)|n'\rangle$, pour tous les spins. Dans ce cas, il y a des conditions que je ne pense pas être capable de retirer. Commençons par penser à quels sites qu'on a le droit de détruire. Soit la bitstring n_i, alors les positions que j'ai le droit de créer sont $\neg n_i$. Les positions que j'ai le droit de détruire sont n_i. Ainsi, les positions que j'ai le droit de détruire puis créer sont $(\neg n_j)\&n_i$.

Références

[1] P. Rosenberg, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay, and M. Charlebois. Fermi arcs from dynamical variational monte carlo. *Phys. Rev. B*, 106 :245132, Dec 2022.