

ESTIMATION DE L'ÉTAT FONDAMENTAL DU MODÈLE DE HEISENBERG SUR LE RÉSEAU KAGOME AVEC UN ALGORITHME VARIATIONNEL QUANTIQUE

PROJET D'INITIATION À LA RECHERCHE

INITIATION À LA RECHERCHE PHQ662

par

Dimitri Bonanni-Surprenant

Remis à

Yves Grosdidier



Université de Sherbrooke
Faculté des Sciences
Département de Physique
1^{er} mars 2023

Introduction

Un liquide de spin est une phase de la matière qui découle de la frustration dans un matériel. Cette approche pour expliquer le comportement de la matière a été apportée par le physicien Philip Warren Anderson en 1973 pour expliquer le comportement d'un réseau triangulaire. Un autre type de réseau qui présente comportement en liquide de spin similaire est le réseau Kagome. Dans ce projet, on cherche à estimer l'état fondamental d'un tel réseau en utilisant deux techniques, soit une diagonalisation exacte de l'hamiltonien de Heisenberg, et en utilisant une technique variationnelle pour estimer l'état fondamental.

1 Théorie

L'estimation de l'état fondamental d'un réseau appartient aux problèmes à N corps. Ce type de problème est très difficile à résoudre en général. Pour cette raison, le réseau utilisé dans ce projet comportera 12 sites afin de restreindre la complexité du calcul.

1.1 Diagonalisation exacte

La diagonalisation exacte, malgré son nom, permet une approximation de l'état fondamental en diagonalisant l'hamiltonien. En général, ces hamiltoniens sont de dimension très grande, voire infinie, alors l'écriture de l'hamiltonien se fait dans un plus petit sous-espace. Même pour 12 sites, cet hamiltonien peut être trop grand pour pouvoir faire des manipulations dans un temps raisonnable. Pour cette raison, l'encodage utilisé fera usage du fait que le modèle d'Heisenberg utilise des matrices de Pauli, ce qui permet l'usage de chaînes de Pauli et de matrices creuses. Des modules déjà produits permettent d'implémenter directement ces techniques, tel que *QuSpin*.

1.2 Solutionneur de valeurs propres quantique variationnel

Le solutionneur de valeurs propres quantique (*Variational Quantum Eigensolver*) est une technique de diagonalisation qui utilise le principe variationnel pour donner une borne supérieure sur l'énergie de l'état fondamental. Cette technique dérive de la méthode variationnelle en mécanique quantique, soit reposant sur le fait qu'un état propre de l'hamiltonien

$$H |\psi_\lambda\rangle = E_\lambda |\psi_\lambda\rangle \quad (1)$$

permet d'écrire un état général du système comme une combinaison linéaire.

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda} \alpha_{\lambda} |\psi_{\lambda}\rangle \quad (2)$$

Ce qui permet d'écrire la valeur moyenne de H dans l'état $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_{\lambda,\rho} (\alpha_\rho^* \alpha_\lambda \langle\psi_\rho|H|\psi_\lambda\rangle) \quad (3)$$

$$= \sum_{\lambda} |\alpha_\lambda|^2 E_\lambda \geq E_0 \quad (4)$$

étant donné que $\sum_{\lambda} |\alpha_\lambda|^2 = 1$ et que $E_\lambda \geq E_0$. On peut donc utiliser ce théorème pour donner une bonne borne supérieure à l'énergie du fondamental en introduisant des paramètres à l'état d'essai $|\psi(\{\theta_i\})\rangle$ et en minimisant ainsi la fonction d'énergie $E(\{\theta_i\})$. Sur un ordinateur quantique, préparer un tel état est faisable en appliquant une porte unitaire $U(\{\theta_i\})$ qui assure un bon contrôle sur l'état. Une fois l'état préparé, la valeur moyenne est simple à prendre en effectuant les mesures appropriées.

2 Méthode

Afin de pouvoir résoudre ce problème, il faudra définir un encodage spécifique pour représenter un état sur un ordinateur quantique. Considérons un encodage d'un spin sur un qubit, soit $|0\rangle \equiv |\downarrow\rangle$, $|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle$. Cette façon d'encoder le réseau dans l'ordinateur quantique permet d'avoir autant de spins que de qubits, soit $N = 12$ au maximum ici. Un état général $|\psi\rangle$ peut être décrit par 2^N paramètres, ce qui est un peu trop compliqué à minimiser. On peut restreindre l'espace des états intéressants à ceux qui sont fortement couplés aux plus proches voisins, soit laissant seulement 4 connections par site, pour un réseau périodique.

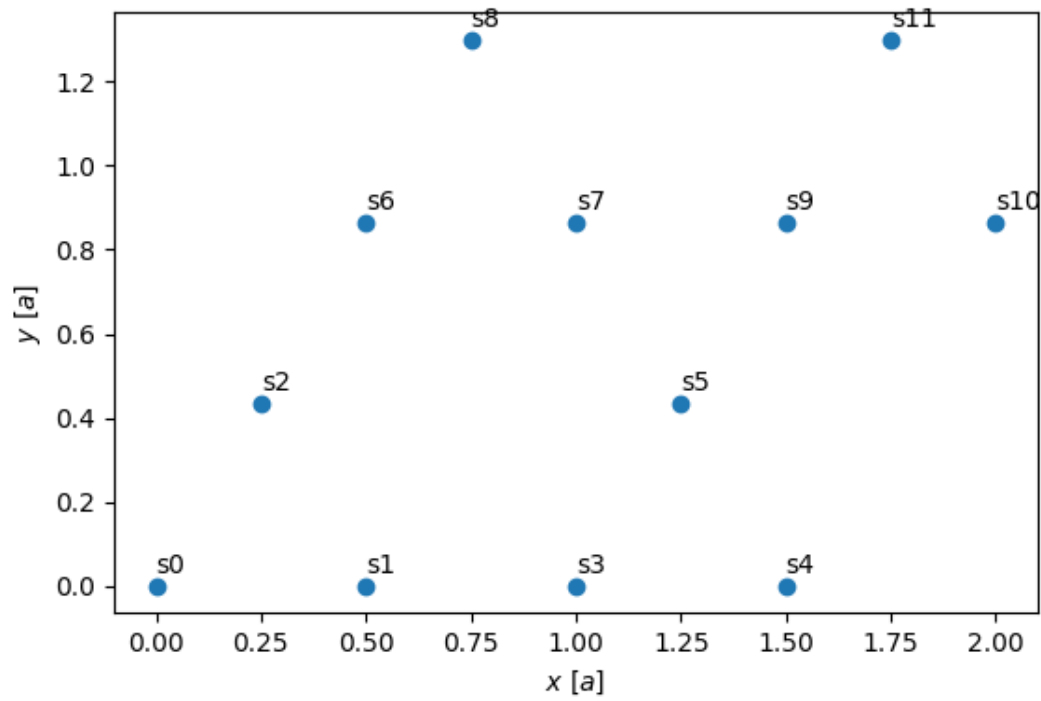


FIGURE 1 – Réseau kagome avec 12 sites.

Références

- [1] Ibm quantum awards. <https://ibmquantumawards.bemyapp.com/#/event>. Accessed : 2023-02-20.
- [2] P.W. Anderson. Resonating valence bonds : A new kind of insulator ? *Materials Research Bulletin*, 8(2) :153–160, 1973.
- [3] Jan Lukas Bosse and Ashley Montanaro. Probing ground state properties of the kagome antiferromagnetic heisenberg model using the variational quantum eigensolver, 2021.
- [4] P. Nikolic and T. Senthil. Physics of low-energy singlet states of the kagome lattice quantum heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 68 :214415, Dec 2003.
- [5] Arnaud Ralko, Frédéric Mila, and Ioannis Rousochatzakis. Microscopic theory of the nearest-neighbor valence bond sector of the spin. *Physical Review B*, 97(10), mar 2018.
- [6] Ying Ran, Michael Hermele, Patrick A. Lee, and Xiao-Gang Wen. Projected-wave-function study of the spin-1/2 heisenberg model on the kagomé lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :117205, Mar 2007.
- [7] Dave Wecker, Matthew B. Hastings, and Matthias Troyer. Progress towards practical quantum variational algorithms. *Phys. Rev. A*, 92 :042303, Oct 2015.
- [8] Phillip Weinberg and Marin Bukov. QuSpin : a Python package for dynamics and exact diagonalisation of quantum many body systems. Part II : bosons, fermions and higher spins. *SciPost Phys.*, 7 :020, 2019.