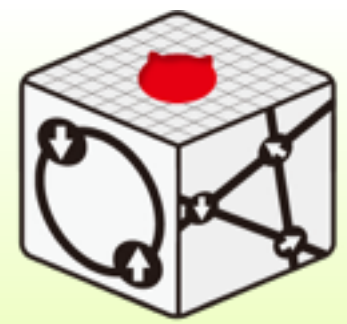


mVMCの演習問題 (問題)

三澤 貴宏

東京大学物性研究所 特任研究員 (PCoMS PI)



mVMC

基本

1. Heisenberg, Hubbard chain
2. Heisenberg, Hubbard 正方格子
3. 補助ツールI: fourier tool の使用
4. 補助ツールII: UHFを初期解にする

発展 (mVMCで様々な状態を作ってみましょう)

1. Hubbard + $V \rightarrow$ 電荷秩序
2. Heisenberg+J2 \rightarrow ストライプ磁気秩序
3. Attractive Hubbard \rightarrow 超伝導
4. 1D Kondo lattice \rightarrow 近藤絶縁体
5. Kitaev model \rightarrow Kitaev spin 液体

1. Heisenberg chain

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

step 1. L=4でmVMCで最適化計算をしてみましょう

StdFace.def

```
L                = 4
Lsub             = 2
model            = "Spin"
lattice          = "chain"
J                = 1.0
2Sz              = 0
NVMCSample       = 200
NSROptItrStep    = 500
NSROptItrSmp     = 50
NMPTrans         = 1
NSPStot          = 0
```

./vmc.out -s StdFace.def

```
> gnuplot
plot ./output/zvo_out_001.dat u 1
```

Energy by HΦ

```
0 -2.00000000000 : S=0
1 -1.00000000000 : S=1
2 -0.00000000000
3 0.00000000000
4 0.00000000000
5 1.00000000000
```

1. Heisenberg chain

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

step 2. L=4でmVMCで物理量計算をしてみましょう

StdFace.def

```
L                = 4
Lsub             = 2
model            = "Spin"
lattice          = "chain"
J                = 1.0
2Sz              = 0
NVMCSample       = 200
NVMCCalMode      = 1
NDataIdxStart    = 1
NDataQtySmp      = 5
NMPTrans         = 1
NSPStot          = 0
```

```
cp ./output/zqp_opt.dat .
./vmcdry.out -s StdFace.def ./zqp_opt.dat
```

```
> gnuplot
plot ./output/zvo_out_001.dat u 1
```

1. Heisenberg chain

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

step 3. 物理量の平均値・標準誤差を計算してみましょう

output/zvo_out_001.dat
output/zvo_out_002.dat
output/zvo_out_003.dat
output/zvo_out_004.dat
output/zvo_out_005.dat

→独立なbinでのエネルギーの
計算の値(一列目)

この平均値・標準誤差を
計算すればよい

```
ln -s output aft
perl -w Aft_energy.pl
```

で計算できます。

同様に

output/zvo_cisajs_00n.dat
output/zvo_cisajsckalt_00n.dat
に独立なbinでの

1体・2体の相関関数の値が出力

この平均値・標準誤差を計算すればよい

```
ln -s output aft
perl -w Aft_Sq.pl
```

でスピン・電荷構造因子が計算できます。

1. Heisenberg chain

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

step 4.以上のことを一括して行なうのが X.sh です

```
perl -w MakeMod.pl -> StdFace.def を作成
```

```
perl -w Aft_energy.pl
```

```
perl -w Aft_Sq.pl
```

```
perl -w Aft_SiSj.pl
```

- サイズをいくつか変えて計算してみましょう
- S=1にして計算して励起状態が計算できるか試してみましょう

1. Heisenberg chain (references)

L=6:

0	-2.8027756377
1	-2.1180339887
2	-1.5000000000
3	-1.2807764064
4	-1.2807764064
5	-1.0000000000
6	-1.0000000000
7	-0.5000000000

L=8:

0	-3.6510934089
1	-3.1284190638
2	-2.6996281483
3	-2.4587385089
4	-2.4587385089
5	-2.1451483739
6	-2.1451483739
7	-1.8546376797

L=10:

0	-4.5154463545
1	-4.0922073467
2	-3.7705974354
3	-3.5432793743
4	-3.5432793743
5	-3.2461649167
6	-3.2461649167
7	-2.9759318691

1. Hubbard chain

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Step.1 L=4, U=4, t=1, half fillingで計算をしてみましょう.

```
L = 4
Lsub = 2
model = "FermionHubbard"
lattice = "chain"
t = 1.0
U = 4.0
nelec = 4
2Sz = 0
NVMCSample = 200
NSROptItrStep = 500
NSROptItrSmp = 50
NMPTrans = 1
```

Energy by HΦ

```
0 -2.1027484835
1 -1.8064238518
2 -1.0681403934
3 -0.8284271247
4 -0.8284271247
5 0.0000000000
6 0.5814492811
7 2.0000000000
```


1. Hubbard chain

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Step. 2 物理量計算をやってみましょう

Step. 3 物理量の平均値・標準誤差を計算してみましょう

Step. 4 一括スクリプトで計算してみましょう

U, 電子数を変えるなどして色々計算してみましょう

HΦの計算結果と比べて見ましょう

HΦのスクリプト例

`./HPhi -s StdFace.def`

L	= 4	L	= 8
model	= "Hubbard"	model	= "Hubbard"
lattice	= "chain"	lattice	= "chain"
method	= "fulldiag"	method	= "CG"
U	= 4.0	U	= 4.0
t	= 1.0	t	= 1.0
2Sz	= 0	2Sz	= 0
nelec	= 4	nelec	= 8
		exct	= 8

1. Hubbard chain (references)

L=6:

0	-3.6687061788729571
1	-2.8983814740367304
2	-2.5163768731161431
3	-2.4229112638479289
4	-2.4229112638479293
5	-2.0927538294969210
6	-2.0927538294969210
7	-1.7690248232884345

L=8:

0	-4.6035262999892002
1	-4.2999927584330599
2	-4.0101539576440342
3	-3.7057642394839405
4	-3.7057642394839405
5	-3.4963563102152051
6	-3.4963563102152042
7	-3.2445570984649694

2. Heisenberg & Hubbard on the square lattice

- `chain`の場合とやることは同じです。計算が重くなるので、`16site`程度にしておいた方がよいです。
- `sp Result_Sq.dat` or `fourier tool` を使うと構造因子の3次元プロットがでます。

2. Heisenberg & Hubbard on the square lattice

Heisenberg model

$(N_s = 4 \times 4)$	E/N_s	S_{nn}	S_{nnn}	$S(\mathbf{q}_{\text{peak}})$
ED	-0.70178020	-0.35089010	0.21376	0.09217
mVMC(2×2)	-0.701769(6)	-0.35088(3)	0.2136(2)	0.09212(6)
mVMC(2×2)+Lanczos	-0.701783(3)	-	-	-
mVMC(4×4)	-0.70178015(8)	0.35089007(4)	0.2139(4)	0.0922(1)
$(N_s = 6 \times 6)$	E/N_s	S_{nn}	S_{nnn}	$S(\mathbf{q}_{\text{peak}})$
ED	-0.6788721499	-0.33943607	0.207402499	0.069945
mVMC(2×2)	-0.67843(2)	-0.33921(1)	0.20738(1)	0.07019(4)
mVMC(2×2)+Lanczos	-	-	-	-
mVMC(6×6)	-0.678865(5)	-0.339433(3)	0.2072(2)	0.0698(1)
mVMC(6×6)+Lanczos	-0.678881(5)	-	-	-

Table 4: Comparisons with exact diagonalization for 4×4 and 6×6 Heisenberg model with $J = 1$. We note $\mathbf{q}_{\text{peak}} = (\pi, \pi)$. The relative errors η become 0.000001% for $L = 4$ and 0.001% for $L = 6$, respectively.

Hubbard model

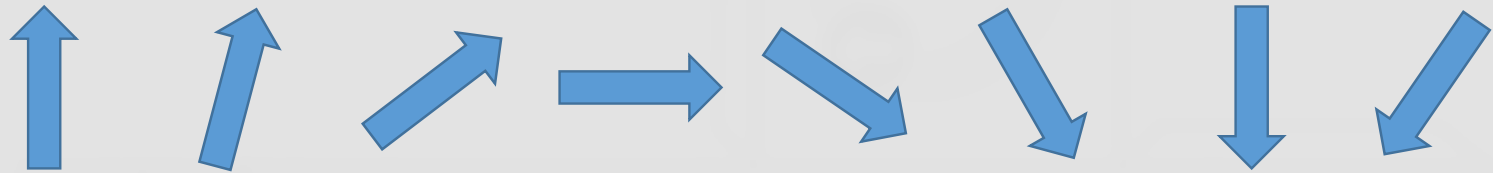
	E/N_s	D	S_{nn}	$S(\mathbf{q}_{\text{peak}})$
ED	-0.85136	0.11512	-0.2063	0.05699
mVMC(2×2)	-0.84982(4)	0.11529(5)	-0.2062(1)	0.05773(4)
mVMC(2×2)+Lanczos	-0.85105(3)	-	-	-
mVMC(4×4)	-0.85068(4)	0.1153(4)	-0.2062(5)	0.0573(2)
mVMC(4×4)+Lanczos	-0.85121(3)	-	-	-

Table 3: Comparisons with exact diagonalization for 4×4 Hubbard model with $U = 4$ and $t = 1$ at half filling. Exact diagonalization (ED) is done by using $\mathcal{H}\Phi$ [38, 39]. mVMC(2×2) means f_{ij} has 2×2 sublattice structures, $\mathbf{q}_{\text{peak}} = (\pi, \pi)$, and the parentheses denote the error bars in the last digit. Lanczos means that the first-step Lanczos calculations on top of the mVMC calculations.

3. fourier tool

相関関数のフーリエ変換

長距離の相関を調べる。



$$\langle \hat{A}_k^\dagger A_k \rangle = \frac{1}{N_{\text{Cell}}} \sum_{ij}^{N_{\text{site}}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \hat{A}_i^\dagger A_j \rangle$$

ユーティリティ・プログラムとドキュメントはmVMC本体と別にある。

tool/fourier : フーリエ変換をするプログラム

tool/corplot : 3次元プロットをするプログラム

doc/userguid.html : からマニュアルを閲覧できる

計算結果

例/正方格子ハイゼンベルグ模型(16サイト)

sample/Standard/Spin/HeisenbergSquare/

```
$ パス/vmc.out -s StdFace.def
$ パス/vmc.out -s StdFace.def output/zqp_opt.dat
$ パス/fourier namelist.def geometry.dat
$ パス/corplot output/zvo_corr.dat
```

```
L = 4
W = 4
Lsub = 2
Wsub = 2
model = "Spin"
lattice = "tetragonal"
J = 1.0
NSROptItrStep = 200
2Sz = 0
NVMCCalMode = 1 [コメント(//)を外す]
```

Plot Start

Please specify target number from below (0 or Ctrl-C to exit):

Real Part Without ErrorBar

[1] Up-Up [2] Down-Down [3] Density-Density [4] SzSz [5] S+S- [6] S.S

Imaginary Part Without ErrorBar

[11] Up-Up [12] Down-Down [13] Density-Density [14] SzSz [15] S+S- [16] S.S

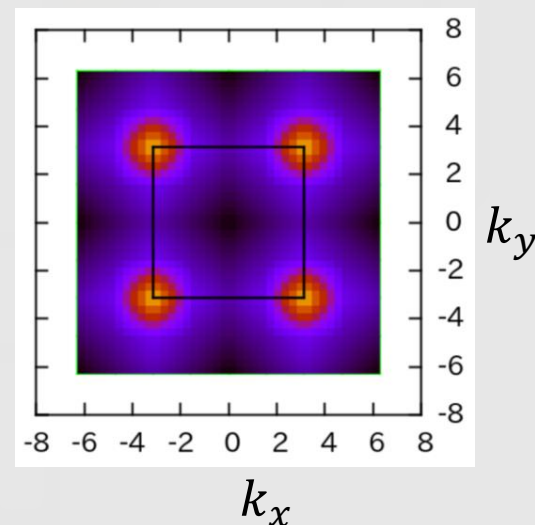
Real Part With ErrorBar

[21] Up-Up [22] Down-Down [23] Density-Density [24] SzSz [25] S+S- [26] S.S

Imaginary Part With ErrorBar

[31] Up-Up [32] Down-Down [33] Density-Density [34] SzSz [35] S+S- [36] S.S

Target : 6 (と打ってEnter)



既知の問題点

corplot内でgnuplotを呼び出しているが、
4.4より前のバージョンのgnuplotでは描画できない。

4. UHF解を初期条件にする

UHF解を初期条件にしてみましょう UHFの実行体は以下にあります

`/src/ComplexUHF/UHF`

`./UHF namelist.def`

で計算可能

`zqp_AP0rbital_opt.dat`

注意: 初期条件を適切につくる必要があります

`IniGreen.pl` 正方格子(π, π)の磁気秩序を初期条件

`namelist.def` に `zinitial.def`を追加

4. UHF解を初期条件にする

```
cat IniUHF.sh
```

```
#[s]UHF
mkdir tmpUHF
cp IniGreen.pl ./tmpUHF
cp *def         ./tmpUHF
cp input.txt    ./tmpUHF
cp ./UHF        ./tmpUHF
cd ./tmpUHF
perl -w IniGreen.pl
echo "          Initial zinitial.def" >> namelist.def
./UHF namelist.def
cd -
#[e]UHF
cp tmpUHF/zqp_AP0rbital_opt.dat .
echo "          In0rbital  zqp_AP0rbital_opt.dat" >> namelist.def
```

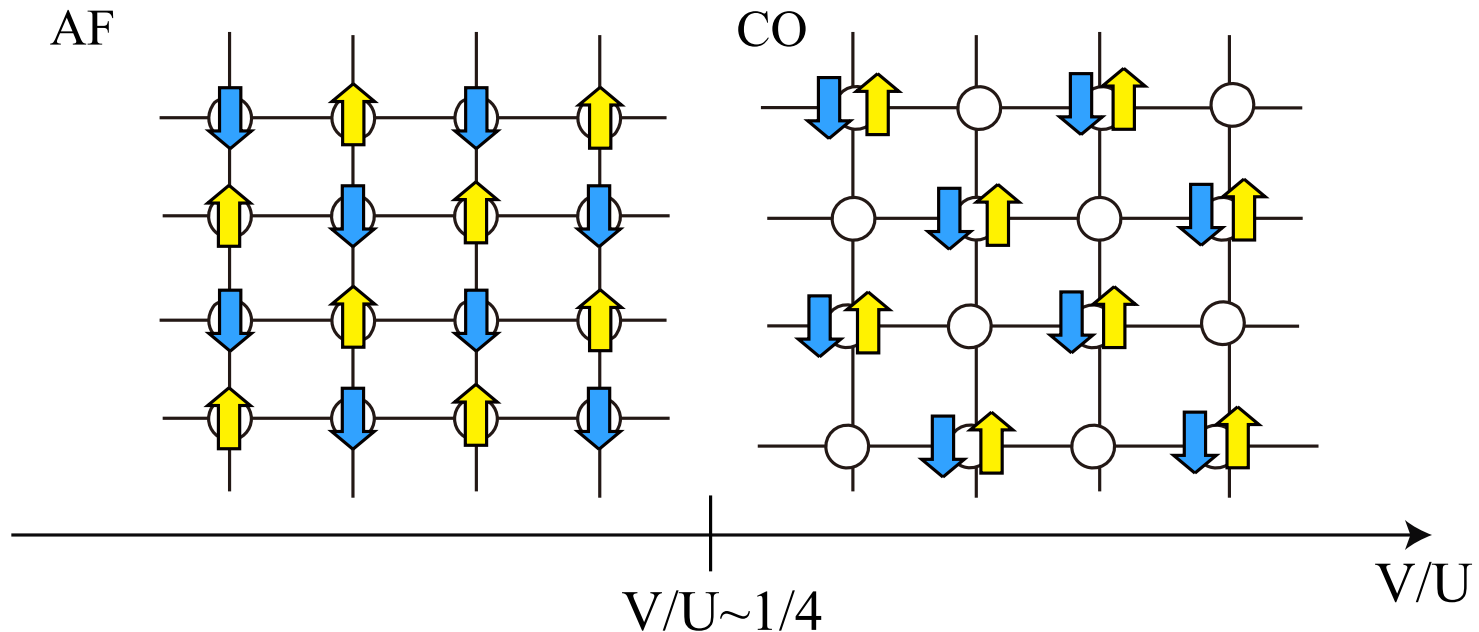

発展

1. Hubbard + $V \rightarrow$ 電荷秩序
2. Heisenberg+ $J_2 \rightarrow$ ストライプ磁気秩序
3. Attractive Hubbard \rightarrow 1s 超伝導
4. 1D Kondo lattice \rightarrow 近藤絶縁体
5. Kitaev model \rightarrow Kitaev spin 液体

4, 5は少し計算が重いです.

1. オフサイト斥力 V の導入

$$H_V = V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j$$



電荷秩序が起きるかどうかをResult_Nq.dat
もしくはfourier tool を使って確認しましょう

1. オフサイト斥力 V の導入

$$H_V = V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j$$

StdFace.def の例

```
W           = 4
L           = 4
Wsub        = 2
Lsub        = 2
model       = "FermionHubbard"
lattice     = "Tetragonal"
t           = 1.0
U           = 4.0
V           = 2.0
nelec       = 16
2Sz         = 0
NVMCSample  = 50
NSROptItrStep = 500
NSROptItrSmp = 50
NMPTTrans   = 4
```

書き換え方の例

1. `perl -w MakeMod.pl`
でStdFace.defを生成

2. 生成したStdFace.def,
StdFace_2.def, StdFace_aft.def
で $V=2.0$ を追加

3. X.shの中の

```
perl -w MakeMod.pl
```

をコメントアウト

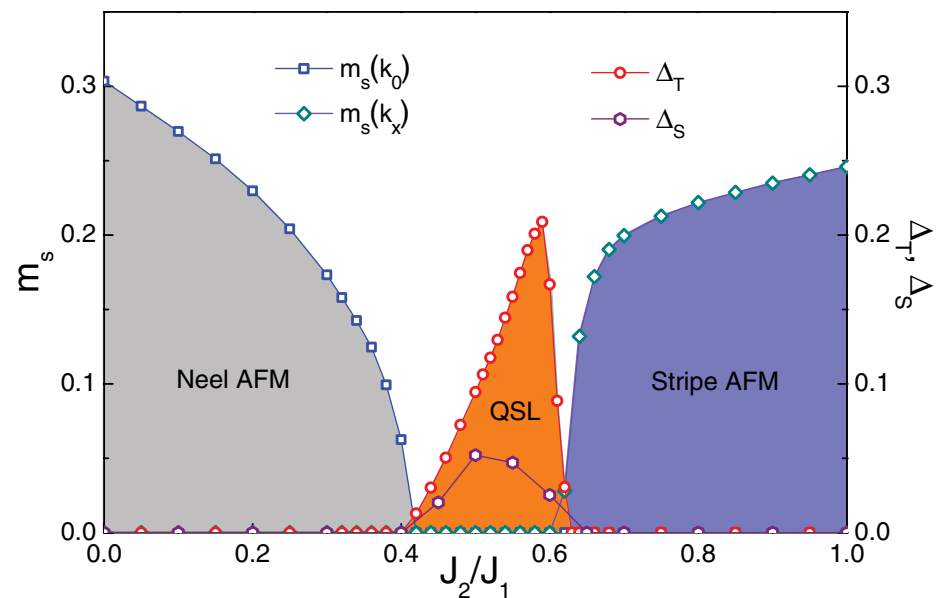
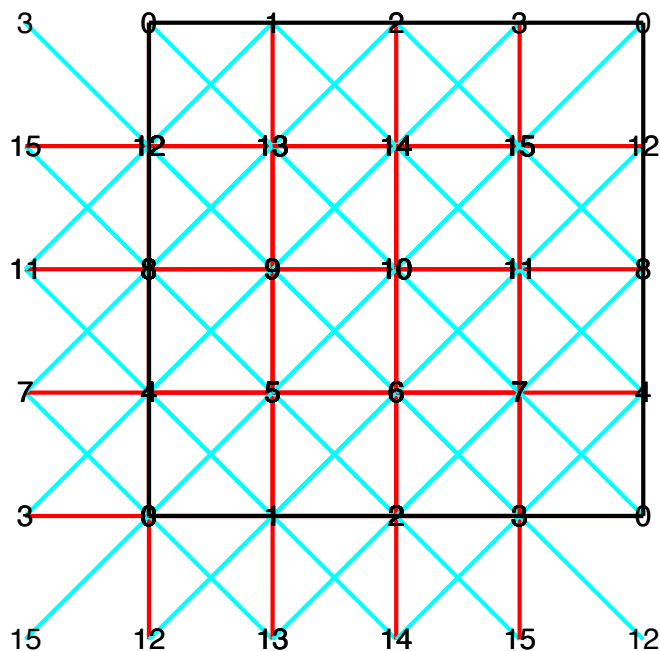
```
#perl -w MakeMod.pl
```

4. `sh ./X.sh`

2. J1-J2ハイゼンベルク模型

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i S_j$$

最近接 J1, 次近接 J2



PRB 86, 024424(2012)

lattice.gpで描画可能

J2/J1~0.5で非磁性の
基底状態(スピン液体?)

2. J1-J2ハイゼンベルク模型

- J2=1でストライプ磁気秩序が起きるかどうかを

Result_Sq.datもしくはfourier tool を使って確認しましょう

- J2=0.5近傍だとどうなるでしょうか？

StdFace.def の例

```
W          = 4
L          = 4
Wsub       = 2
Lsub       = 2
model      = "Spin"
lattice    = "Tetragonal"
J          = 1.0
J'         = 1.0
2Sz        = 0
NVMCSample = 50
NSROptItrStep = 500
NSROptItrSmp = 100
NMPTrans   = 1
NSPGaussLeg = 1
```

書き換え方の例

1. `perl -w MakeMod.pl`
でStdFace.defを生成

2. 生成したStdFace.def,
StdFace_2.def, StdFace_aft.def
でJ'= 1.0 を追加

3. X.shの中の

`perl -w MakeMod.pl`
をコメントアウト

`#perl -w MakeMod.pl`

4. `sh ./X.sh`

3. attractive Hubbard model

- U を負にするだけ
- 1s (等方的)の超伝導相関を計算してみましょう

4. 1D Kondo lattice model

StdFace.def の例

```
L = 8
Lsub = 2
model = "Kondo"
lattice = "chain"
t = 1.0
J = 1
nelec = 8
2Sz = 0
NVMCSample = 200
NSROptItrStep = 2000
NSROptItrSmp = 200
NMPTtrans = 2
NSPGaussLeg = 8
```

S=0, S=1の計算をして

スピンギャップを計算してみましょう

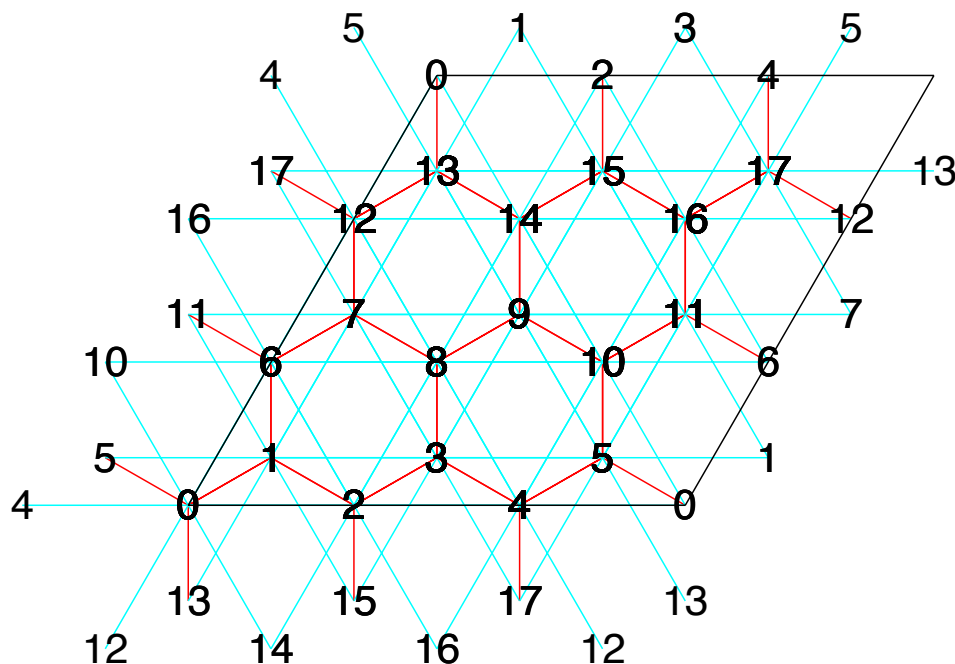
$(S = 0)$	E/N_s	S_{loc}	S_{nn}^f	$S(\pi)$
ED	-1.394104	-0.3151569745	-0.3386218911	0.05685112698
mVMC(2)	-1.39352(1)	-0.3142(6)	-0.3365(2)	0.0575(1)
mVMC(2)+Lanczos	-1.39399(2)	-	-	-
mVMC(8)	-1.39400(1)	-0.3158(3)	-0.3382(3)	0.0567(1)
mVMC(8)+Lanczos	-1.394099(5)	-	-	-
$(S = 1)$	E/N_s	S_{loc}	S_{nn}^f	$S(\pi)$
ED	-1.382061	-0.27480917	-0.224015671	0.057478
mVMC(2)	-1.38128(3)	-0.2743(3)	-0.2248(4)	0.05811(6)
mVMC(2)+Lanczos	-1.38187(1)	-	-	-
mVMC(8)	-1.38171(3)	-0.2750(4)	-0.2249(7)	0.0577(1)
mVMC(8)+Lanczos	-1.382011(2)	-	-	-

Table 5: Comparisons with exact diagonalization for one-dimensional Kondo-lattice model for $J = 1$ and $t = 1$. Upper (Lower) panel shows the results for spin singlet (triplet) sector. In the triplet sector ($S = 1$), we take total momentum as $K = \pi$, which gives the lowest energy in $S = 1$, while we take total momentum as $K = 0$ for $S = 1$.

5: Kitaev model

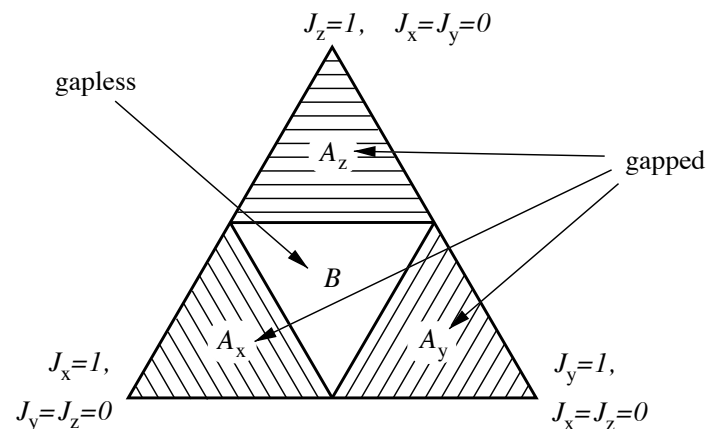
$$H = -J_x \sum_{x\text{-bond}} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{y\text{-bond}} S_i^y S_j^y - J_z \sum_{z\text{-bond}} S_i^z S_j^z$$

3方向のそれぞれが
 J_x, J_y, J_z で相互作用



lattice.gpで描画可能

相図



Annals of Physics 321, 2-111 (2016)

可解模型→スピン液体

5: Kitaev model

$$H = -J_x \sum_{x\text{-bond}} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{y\text{-bond}} S_i^y S_j^y - J_z \sum_{z\text{-bond}} S_i^z S_j^z$$

StdFace.def の例

```
W                = 2
L                = 3
model            = "SpinGC"
lattice          = "Honeycomb"
NVMCSample       = 200
NSROptItrStep    = 5000
NSROptItrSmp     = 100
NMPTrans         = 6
J0x              = -1.0
J0y              = 0.0
J0z              = 0.0
J1x              = 0.0
J1y              = -1.0
J1z              = 0.0
J2x              = 0.0
J2y              = 0.0
J2z              = -1.0
```

収束が遅いので注意

→収束をどうしたら加速するか？

(open problem)