mVMCの演習問題

三澤　貴宏
東京大学物性研究所 特任研究員（PCoMS PI）

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

`mVMC-tutorial/HandsOn/2017_0830/Samples`
以下にスクリプト例があります

発展 (mVMCで様々な量子相を作ってみましょう)

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

1. Heisenberg chain

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

mVMC-tutorial/HandsOn/2017_0830/Samples/1D_Heisenberg

step 1. L=4でmVMCで最適化計算をしてみましょう

StdFace.defの例

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

実行例

1. ./vmc.out -s StdFace.def
2. gnuplotで

plot ./output/zvo_out_001.dat u 1

```
Energy by HΦ
0 -2.0000000000 : S=0
1 -1.0000000000 : S=1
2 -0.0000000000
3 0.0000000000
4 0.0000000000
5 1.0000000000
```

1. Heisenberg chain

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

step 2. L=4でmVMCで相関関数計算をしてみましょう

StdFace_aft.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
```

実行例

1. cp ./output/zqp_opt.dat .
2. ./vmc.out -s StdFace_aft.def ./zqp_opt.dat

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)

これの平均値・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_cisajscktalt_00n.dat
```

に独立なbinでの

1体・2体の相関関数の値が出力

これの平均値・標準誤差を計算すればよい

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

でスピン構造因子が計算できます.

注: Result_Sq.datの1列目は

Lx*kx/(2π)です.

1. Heisenberg chain

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

mVMC-tutorial/HandsOn/2017_0830/Samples/1D_Heisenberg

step 4.以上のことを一括して行なうのが X.sh です

sh ./X.sh
で構造因子の計算まで全て終わります

[必要な実行体(vmc.out,vmcdry.out)は計算するディレクトリにおいておく必要があります]

input.txtをいじるとサイズ・total spin(NSPStot)が変えられます

```
Lx 4
Ly 1
orb_num 1
NSPStot 0
```

- **Result_Sq.dat をプロットしてみましょう**
- **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見ましょう**

[S(q=0)=S*(S+1)/(3*L²)になっているか？]

Scriptの説明

sh ./X.sh →　全ての計算を行なう
sh ./Clean.sh → 全てのdefファイルなどを消去(初期化)
[計算結果は全て消えるので注意!!!]

perl -w MakeMod.pl : input.txtから,
StdFace.def (最適化1,結果はopt1),
StdaFace_2.def (最適化2, 結果はopt2),
StdFace_aft.def (物理量計算用,結果はaft)
を作成します

perl -w CisAjs.pl　: 1体の相関関数のインプットファイルを作成
perl -w CisAjsCktAltDC.pl: 2体の相関関数のインプットファイルを作成

perl -w Aft_Sq.pl : aft/の相関関数から構造因子を計算します
perl -w Aft_energy.pl : aft/のエネルギーから期待値・標準誤差
perl -w Aft_SiSj.pl : aft/ の相関関数から最近接のスピン相関を計算します

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

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

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

StdFace.defの例

```
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

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

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(X.sh)

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
model           = "Hubbard"
lattice         = "chain"
method          = "fulldiag"
U               = 4.0
t               = 1.0
2Sz             = 0
nelec           = 4
```

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

1. Hubbard chain (references)

HΦの結果(全対角化)

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

L=6, 8では運動量射影もできたらやってみましょう.

NMPTrans = 2などと指定.

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、
4×4=16sites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}	$S(\boldsymbol{q}_{peak})$
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}	$S(\boldsymbol{q}_{peak})$
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 $\boldsymbol{q}_{peak} = (\pi, \pi)$. The relative errors η become 0.000001% for $L = 4$ and 0.001% for $L = 6$, respectively.

2. Heisenberg & Hubbard on the square lattice

Hubbard model

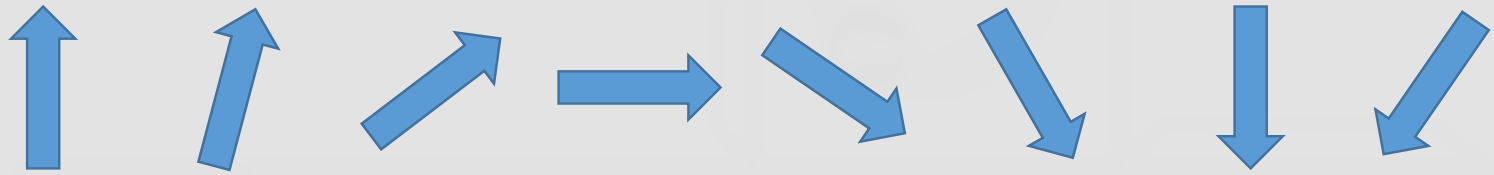
	E/N_{s}	D	S_{nn}	$S(\boldsymbol{q}_{\mathrm{peak}})$
ED	-0.85136	0.11512	-0.2063	0.05699
mVMC(2×2)	-0.84982(4)	0.11529(5)	-0.2062(1)	0.05773(4)
mVMC(2×2)+Lanczos	-0.85105(3)	-	-	-
mVMC(4×4)	-0.85068(4)	0.1153(4)	-0.2062(5)	0.0573(2)
mVMC(4×4)+Lanczos	-0.85121(3)	-	-	-

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, $\boldsymbol{q}_{\mathrm{peak}} = (\pi, \pi)$, 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。



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

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/

```
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]
```

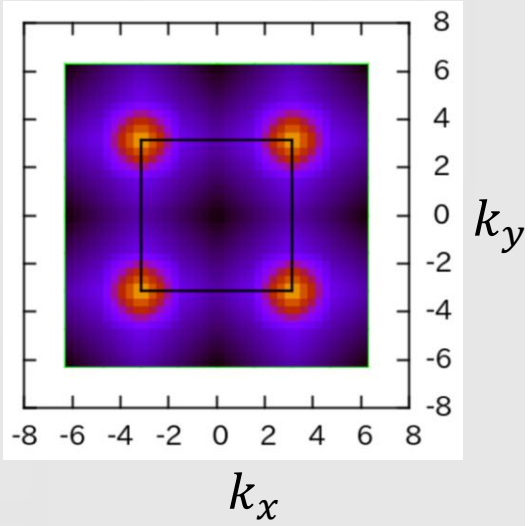
```
$ パス/vmc.out -s StdFace.def
$ パス/vmc.out -s StdFace.def output/zqp_opt.dat
$ パス/fourier namelist.def geometry.dat
$ パス/corplot output/zvo_corr.dat
```

```
#####  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。

set view equal xy
をコメントアウトすれば4.2ではOK
→ #set view equal xy

注意: fourier toolとperl スクリプトの違い

perl スクリプト(Aft_Sq.pl)

$$S(q) = \frac{1}{3N_s^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \vec{S}_i \vec{S}_j \rangle e^{\mathrm{iq(r_i - r_j)}}$$

$$N(q) = \frac{1}{N_s^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle (\vec{N}_i - \langle \vec{N}_i \rangle) \cdot (\vec{N}_j - \langle \vec{N}_j \rangle) \rangle e^{\mathrm{iq(r_i - r_j)}}$$

fourier tool

$$S(q) = \frac{1}{N_s} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \vec{S}_i \vec{S}_j \rangle e^{\mathrm{iq(r_i - r_j)}}$$

$$N(q) = \frac{1}{N_s} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \vec{N}_i \vec{N}_j) \rangle e^{\mathrm{iq(r_i - r_j)}}$$

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_APOrbital_opt.dat （fijの初期値）`

が生成されます

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 Initial zinitial.def を追加

4. UHF解を初期条件にする

sh ./IniUHF.sh
で平均場解からfijが生成される（UHFは実行するディレクトリにおいておく）

IniUHF.shの中身

```
perl -w MakeMod.pl
./vmcdry.out StdFace.def
#[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_APOrbital_opt.dat .
echo "         InOrbital  zqp_APOrbital_opt.dat" >> namelist.def
cp namelist.def xnamelist.def
```

X.sh の最初の最適化のnamelitst.defをxnamelist.defに変更

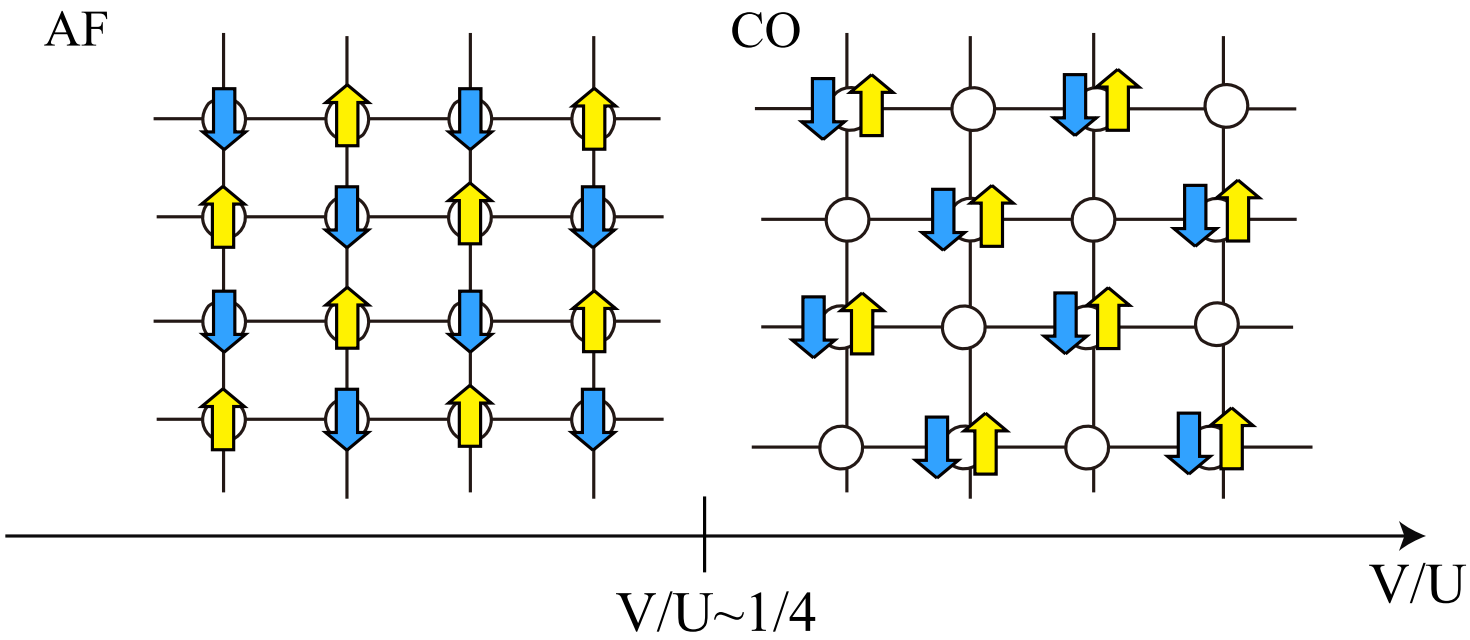
発展 [様々な量子相]

1. Hubbard + V →電荷秩序
2. Heisenberg+J2 → ストライプ磁気秩序
3. Attractive Hubbard → 1s 超伝導
4. 1D Kondo lattice→近藤絶縁体
5. Kitaev model → 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
NMPTrans         = 4
```

書き換え方の例

1. perl -w MakeMod.pl でStFace.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

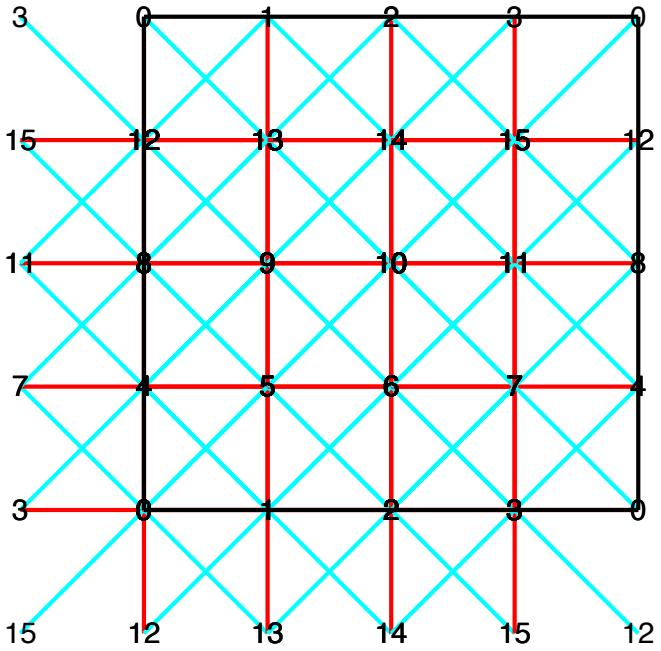
4. sh ./X.sh

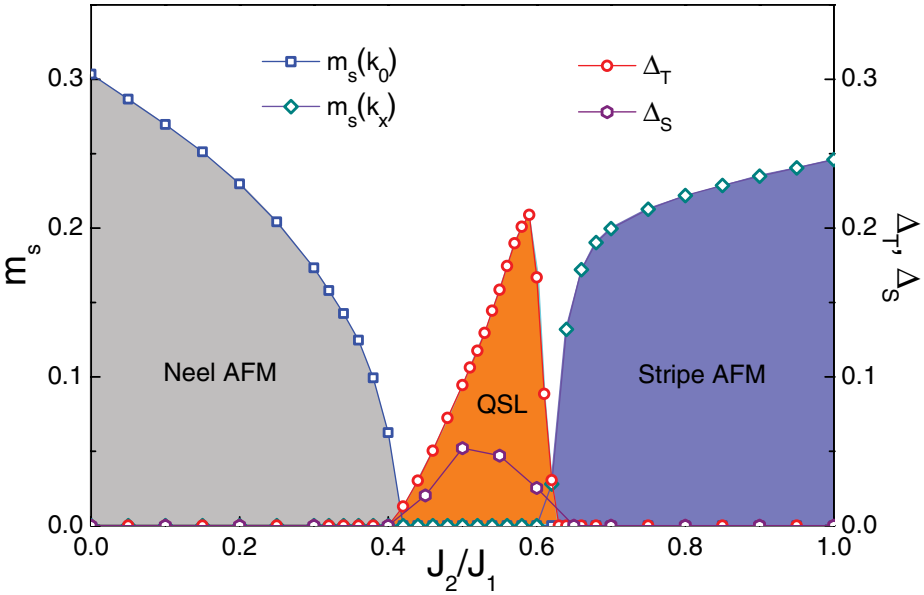
もしくはMakeMod.plを直接書き換える

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StFace.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

もしくはMakeMod.plを直接書き換える

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

(half fillingだと電荷秩序と超伝導が共存しているので, dopeした方がよいです)

$$P_{1s}(\vec{r}) = \frac{1}{2N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\langle\Delta_{1s}^{\dagger}(\vec{r_i})\Delta_{1s}(\vec{r_i}+\vec{r}) + \Delta_{1s}(\vec{r_i})\Delta_{1s}^{\dagger}(\vec{r_i}+\vec{r})\rangle$$

$$\Delta_{1s}(\vec{r_i}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{i\uparrow}c_{i\downarrow} - c_{i\downarrow}c_{i\uparrow}).$$

- 1sの相関関数を計算する

スクリプトは以下にあります

Samples/SC_Correlation

書き換え方の例

1. perl -w MakeMod.pl
でStFace.defを生成

2. 生成したStdFace.def,

StdFace_2.def, StdFace_aft.def
でU=-4.0 に変更

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

使い方

1. sh X.sh
2. perl -w ForSCCor.pl →SC_cisajscktaltdc.def
3. namelist.defの

TwoBodyG greentwo.def → TwoBodyG SC_cisajscktaltdc.def

4. vmc.out namelist.def
5. ln -s output SC
6. perl -w Aft_SC1.pl
7. plot "Ave_Max_SC_Sum_1s_0.dat" w e

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
NMPTrans         = 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

$(S=0)$	$E/N_{\rm s}$	$S_{\rm loc}$	$S^f_{\rm nn}$	$S(\pi)$
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)	-	-	-
$(S=1)$	$E/N_{\rm s}$	$S_{\rm loc}$	$S^f_{\rm nn}$	$S(\pi)$
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)	-	-	-

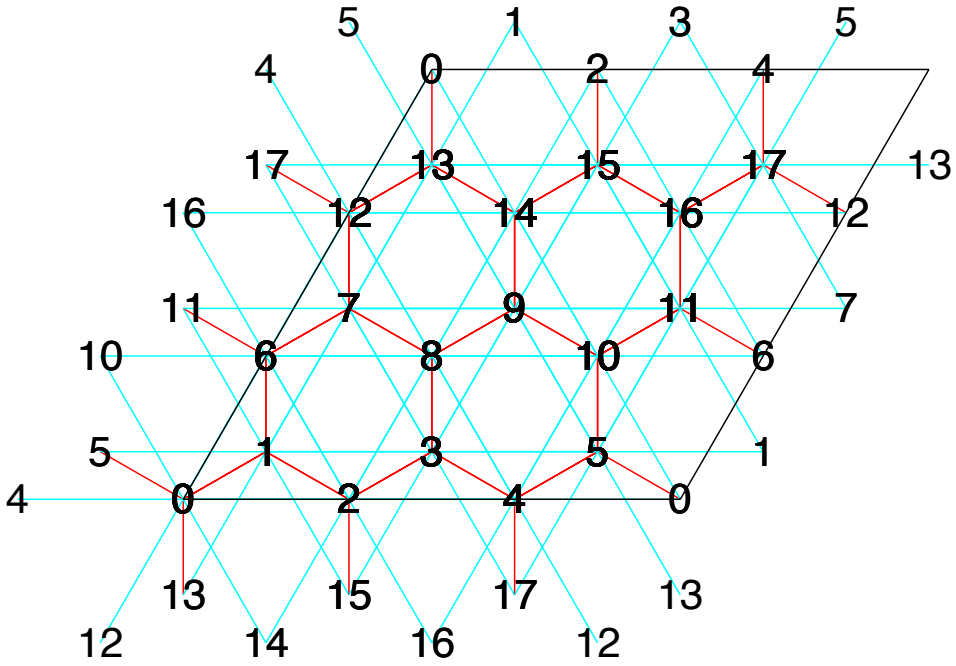
Table 5: Comparisons with exact diagonalization for one-dimensional Kondo-lattice model for $J = 1$ and $t = 1$. Upper (Lower) panel shows the results for spin singlet (triplet) sector. In the triplet sector $(S = 1)$, we take total momentum as $K = \pi$, which gives the lowest energy in $S = 1$, while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

See, H. Tsunetsugu *et al*., PRB 46, 3175 (1992),
H. Tsunetsugu *et al*., RMP 69, 809 (1997)

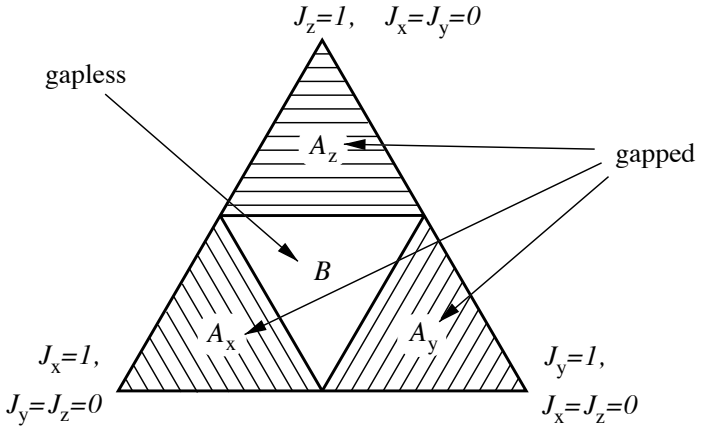
5: Kitaev model

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

3方向のそれぞれが
Jx,Jy,Jzで相互作用



相図



Annals of Physics 321, 2-111 (2016)

lattice.gpで描画可能

可解模型→スピン液体

5: Kitaev model

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

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
```

乱数スタートは収束が遅いので注意

→収束をどうしたら加速するか？

[open problem]