
Algorithmes classiques et quantiques pour le modèle de Hubbard

RAPPORT DE PRL

THOMAS LOUIS

X2020

TUTEURS : MICHEL FERRERO,

THOMAS AYRAL



Table des matières

I	Aspects théoriques liés aux problèmes à N corps	3
II	Le Modèle de Hubbard :	7
III	Résolution numérique naïve :	9
IV	Méthode DMFT	11
V	Algorithmes quantiques	18

Introduction :

Dans ce PRL, on étudie un modèle important de la physique de la matière condensée : le **modèle de Hubbard**. Il vise à rendre compte des interactions des électrons dans un solide cristallin. En particulier, il permet de modéliser des transitions entre un isolant et un conducteur. On s'intéressera au cas des **isolants de Mott**, des matériaux qui sont initialement conducteurs (c'est à dire qu'ils possèdent une bande de conduction non vide), mais dont les interactions entre électrons sont trop puissantes : les électrons restent alors localisés.

Pour comprendre le modèle de Hubbard, on utilise un nouveau formalisme de la mécanique quantique, particulièrement utile dans le cadre des “many body systems”, qu'on détaille dans la première partie. Les autres parties sont dédiées à la résolution du modèle de Hubbard, en utilisant différents algorithmes.

I Aspects théoriques liés aux problèmes à N corps

La première quantification

Dans le formalisme dit de la “première quantification” de la mécanique quantique, un système de N particules est décrit par une fonction d’onde à valeurs complexes $\psi(r_1, \dots, r_N) \in L^2$, telle que

$$|\psi(r_1, \dots, r_N)|^2 dr_1 \dots dr_N$$

est la probabilité de trouver la première particule dans $\mathcal{B}(r_1, dr_1)$ la deuxième dans $\mathcal{B}(r_2, dr_2)$, etc. Dans le cas de particules indiscernables, on ajoute à ce formalisme les conditions de symétrie et d’anti-symétrie. Plus précisément :

$$\Psi(r_1, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = \lambda \Psi(r_1, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N)$$

où $\lambda = \pm 1$, avec $+1$ pour les bosons, -1 pour les fermions. Dans la suite, on ne s’intéressera qu’aux fermions, puisqu’on travaillera avec des électrons. De cette observation, on déduit que les états admissibles pour des systèmes de N fermions sont de la forme

$$\sum_{\sigma \in S_N} \varepsilon(\sigma) |\psi_{\sigma(\nu_1)}, \dots, \psi_{\sigma(\nu_N)}\rangle$$

Si on fixe une base $\{\phi_k\}$ du système à 1 particule, une base du système à N particules est

$$\left\{ \sum_{\sigma \in S_N} \varepsilon(\sigma) |\phi_{\sigma(\nu_1)}, \dots, \phi_{\sigma(\nu_N)}\rangle \right\}_{\nu_1, \dots, \nu_N}$$

La seconde quantification

Le formalisme de la seconde quantification est très lourd. En fait, ce qu’on met en évidence avec la base de la première quantification est que l’ordre n’importe pas, seul le nombre de particule dans chaque état ϕ_k compte. C’est l’idée principale de la seconde quantification. Si $\{\phi_k\}$ désigne une base du système à 1

particule, la base de la seconde quantification à N particules est donnée par

$$\{|n_1, n_2, \dots, \rangle\}_{n_k \in \{0,1\}}$$

où n_k désigne le nombre de particules dans l'état ϕ_k , et où on a toujours $\sum_k n_k = N$. On a bien sûr $n_k \in \{0,1\}$, en conséquence du principe de Fermi. On définit alors les opérateurs de créations et d'annihilation, dont l'action sur la base est définie de la manière suivante :

Opérateur création :

$$\begin{aligned} c_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k = 0, \dots\rangle &= \lambda_+(k) |n_1, n_2, \dots, n_k = 1, \dots\rangle \\ c_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k = 1, \dots\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Opérateur annihilation :

$$\begin{aligned} c_k |n_1, n_2, \dots, n_k = 0, \dots\rangle &= 0 \\ c_k |n_1, n_2, \dots, n_k = 1, \dots\rangle &= \lambda_-(k) |n_1, n_2, \dots, n_k = 0, \dots\rangle \end{aligned}$$

où λ_\pm est un réel qu'on va déterminer ensuite. Remarquons que ma notation est bien cohérente : il est facile de vérifier que $(c_k)^\dagger = c_k^\dagger$. Pour rendre compte du caractère anti-symétrique des fermions, on rajoute les conditions :

$$\begin{aligned} c_k^\dagger c_l^\dagger &= -c_l^\dagger c_k^\dagger \\ c_k c_l &= -c_l c_k \\ c_k^\dagger c_l &= -c_l c_k^\dagger + \delta_{k,l} \end{aligned}$$

On peut alors définir la base en fonction des opérateurs création :

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots (c_i^\dagger)^{n_i} \dots |0\rangle$$

Et on a donc :

$$c_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{s_i} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (1)$$

où $s_i = \sum_{k=1}^{i-1} n_k$, le nombre d'états occupés avant l'état i . De même :

$$c_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{s_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (2)$$

On va voir dans la suite que ces opérateurs permettent en fait de définir facilement des opérateurs très larges. Notamment, on exprimera les hamiltoniens de nos modèles en termes de ces opérateurs.

Représentation de Heisenberg :

Dans le formalisme de la mécanique quantique avec laquelle nous avons l'habitude de travailler, les observables \hat{A} sont constants, et le vecteur d'onde évolue dans le temps selon l'équation de Schrödinger. L'opérateur est déterminé par ses éléments de matrice, c'est à dire les éléments de la forme

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \varphi(t) \rangle$$

Ce formalisme est appelé **représentation de Schrödinger**. Remarquons que lorsque le hamiltonien est indépendant du temps, l'équation de Schrödinger donne $|\varphi(t)\rangle = e^{-itH} |\varphi(0)\rangle$, de façon à ce que l'on ait :

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \varphi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{itH} \hat{A} e^{-itH} | \varphi(0) \rangle$$

Ainsi, en définissant $\hat{A}(t) = e^{iHt} \hat{A} e^{-iHt}$, on peut supposer que le vecteur d'onde est constant, et que c'est l'opérateur qui décrit l'évolution temporelle du système. On obtient un nouveau formalisme appelé **Représentation de Heisenberg**. Celle-ci est complètement équivalente à la représentation de Schrödinger.

On peut également définir le **temps imaginaire** $\tau = it$, ce qui permet d'écrire :

$$\hat{A}(\tau) = e^{\tau H} \hat{A} e^{-\tau H}$$

Fonctions de Green :

Dans cette section, on définit un outil qui sera omniprésent dans la suite. Il s'agit de la **fonction de Green**, définie par

$$G_{ij}(\tau) = \langle \mathcal{T} c_i(\tau) c_j^\dagger(0) \rangle$$

où l'opérateur $c_i(\tau)$ est défini par la représentation de Heisenberg, et \mathcal{T} est l'opérateur d'ordonnement, défini par

$$\mathcal{T}c_i(\tau)c_j^\dagger(0) = \begin{cases} c_i(\tau)c_j^\dagger(0) & \text{Si } \tau \geq 0 \\ -c_j^\dagger(0)c_i(\tau) & \text{Sinon} \end{cases}$$

Intégrales de chemin

Nous ne développerons pas tous les détails, mais les intégrales de chemin jouent un rôle dans la définition d'un modèle que nous utilisons. Cette notion permet de généraliser la notion d'intégrales à des domaines comme l'ensemble des chemins que peut prendre une particule qui va d'un point à un autre dans l'espace.

La fonction de partition s'écrit, dans ce formalisme :

$$Z = \int \mathcal{D}(c^*, c) e^{-S}$$

Où S est l'action liée au modèle. En particulier, la connaissance de S entraîne la connaissance totale du système. En général, l'action s'écrit en fonction de la fonction de Green, ce qui impose que la connaissance de la fonction de Green permet la connaissance totale du système. Dans le cas d'un système régi par un hamiltonien H , on a

$$S = \int d\tau H(\tau)$$

II Le Modèle de Hubbard :

On peut maintenant définir le problème qui nous intéresse : le modèle de Hubbard. L'objectif dans toute la suite sera de résoudre numériquement ce modèle. Cette partie est inspirée de [Geo04] et [Ayr15].

Définitions

Intuitivement, le modèle de Hubbard décrit un solide cristallin, représenté par des sites (qui représentent chacun un atome), et des électrons qui peuvent passer d'un site voisin à un autre. Chaque site peut accueillir deux électrons de spins opposés. Si un site contient deux électrons, on suppose qu'ils interagissent à travers une force répulsive. Le modèle de Hubbard peut donc être décrit en deux parties :

1. Une partie cinétique : c'est le déplacement des électrons d'un site à un autre.
2. Une partie d'interactions : c'est la répulsion entre eux d'électrons localisés sur un même site.

Dans le formalisme de la seconde quantification, l'hamiltonien du modèle de Hubbard s'écrit :

$$H_{Hubb} = - \underbrace{\sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma})}_{H_{kin}} + \underbrace{U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}_{H_{int}} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})$$

Cette forme mérite quelques explications :

- Les indices i, j désignent les sites, et σ le spin.
- Le terme t_{ij} vaut $-\frac{t}{2}$ si les sites i et j sont voisins, et vaut 0 sinon. On applique des conditions aux bords périodiques.

On peut étudier quelques limites de ce modèle, à t fixé :

- Lorsque $U \rightarrow \infty$, pour un électron donné, le nombre de sites accessibles diminue : il ne peut se déplacer que vers un site vide, car sur un site occupé par un électron de spin opposé, la répulsion sera trop forte. En conséquence, les électrons sont **localisés**. On dit qu'ils sont **fortement corrélés**.

- Lorsque $U \rightarrow 0$, beaucoup de sites sont accessibles. Il est énergiquement favorable pour un électron de se déplacer : les électrons sont **délocalisés**.

En pratique, on observe un comportement assimilable à une transition de phase : pour un certain $U = U_c$, appelé U critique, le comportement des électrons change abruptement, passant de délocalisés à localisés : **le matériau passe de conducteur à isolant**.

Comment calculer U critique ?

Pour capturer plus précisément ces phénomènes, on peut s'intéresser à la double occupation d'un site i donné. On note $N_i = n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$. Cet opérateur admet pour valeur propre 0 ou 1 : tous les éléments de la base de seconde quantification sont vecteurs propres, de valeur propre 1 si et seulement si ils représentent un état dans lequel le site i est doublement occupé, par des électrons de spins opposés. Sa moyenne $\langle N_i \rangle = \langle \psi | N_i | \psi \rangle$ représente donc la probabilité que le site i soit doublement occupé. On peut faire les mêmes raisonnements à la limite, sur un site i donné :

- Lorsque $U \rightarrow 0$, les électrons ne sont pas corrélés. Ainsi, chaque possibilité (vide, un électron up, un électron down, deux électrons) sont équiprobables, et donc $\langle N_i \rangle \rightarrow 0.25$
- Lorsque U augmente, il devient de plus en plus énergétiquement défavorable d'avoir deux électrons sur un même site : $\langle N_i \rangle$ est une fonction décroissante de U

Pour obtenir U_c , on cherchera donc un saut de la fonction $\langle N_i \rangle$.

III Résolution numérique naïve :

On essaie maintenant de résoudre numériquement le modèle de Hubbard. Ce problème est en fait très compliqué, notamment car la taille d'une base de seconde quantification adaptée au problème croît exponentiellement en le nombre de site : la matrice correspondant à H_{Hubb} devient rapidement trop grande pour être manipulée explicitement.

On peut tout de même, dans un premier temps, essayer de résoudre le modèle de Hubbard de façon naïve, c'est à dire en construisant la matrice H_{Hubb} , et en la diagonalisant de manière explicite. De façon à optimiser au maximum un tel code, on fait les choix suivants :

- Un vecteur de base $|n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, \dots, n_{p\uparrow}, n_{p\downarrow}\rangle$ est représenté par un nombre en binaire $n_{1\uparrow}n_{1\downarrow}\dots n_{p\uparrow}, n_{p\downarrow}$. On définit l'action de H_{Hubb} en utilisant les opérations élémentaires sur les nombres binaires.
- La matrice H_{Hubb} est définie et diagonalisée en utilisant un module de type *sparse_matrix* qui permet de réduire la complexité en espace et en temps. Cette représentation est adaptée dans le cas de matrices creuses, c'est à dire admettant beaucoup de coefficients nuls, ce qui est le cas ici.

La partie difficile dans cette résolution est le calcul des coefficients de la matrice représentant H_{Hubb} . On détaille dans l'annexe la méthode utilisée.

On implémente ces méthodes en 2D. On peut calculer explicitement l'état fondamental associé à une grille de taille (n, m) , et des constantes (t, U) . Pour mettre en avant la transition de phase, on trace la double occupation, à t fixé, en fonction de U . Les résultats sont présentés en figures 1 et 2. On observe bien un saut de la fonction $\langle N_i \rangle$. Dans le cas $(n, m) = (2, 2)$ on a $U_c \approx 2$ et pour $(n, m) = (2, 3)$, on a $U_c \approx 3$.

Cependant, au delà d'une dizaine de site, sur un seul ordinateur, le temps de calcul, ainsi que la mémoire nécessaire (les deux croissent exponentiellement) deviennent trop importants. **La limite de cette méthode se situe donc autour de 10^1 sites.**

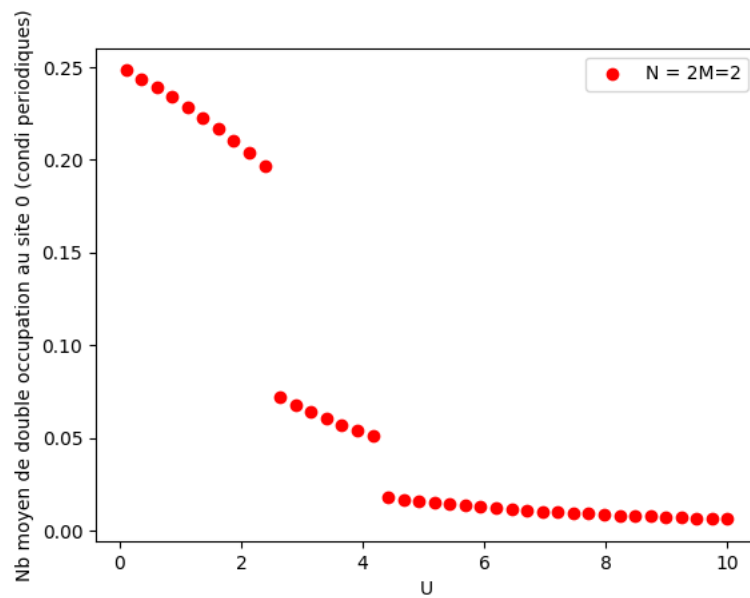


FIGURE 1 – Nombre de double occupation moyen à $t = 1$, $\beta = 10$, $\mu = U/2$ et pour $(n, m) = (2, 2)$

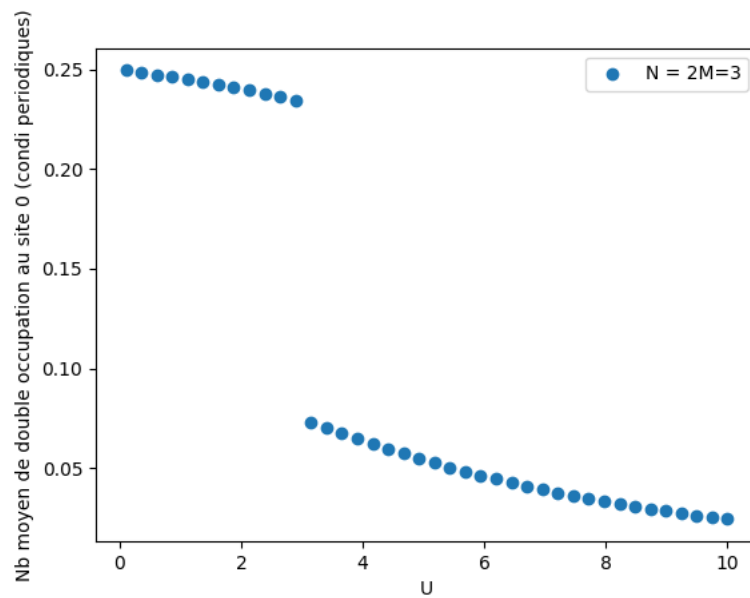


FIGURE 2 – Nombre de double occupation moyen à $t = 1$, $\beta = 10$, $\mu = U/2$ et pour $(n, m) = (2, 3)$

IV Méthode DMFT

Pour palier aux problèmes rencontrés ci-dessus, on utilise une méthode dite de Dynamical Mean Field Theory (DMFT). Dans un premier temps, on développe la théorie sous-jacente à la DMFT, et notamment quelques notions techniques utiles.

Transformation de Fourier, diagonalisation de H_{Hubb}

Pour désigner les sites, on peut aussi utiliser une notation vectorielle : on choisit une origine et un site i est déterminé par sa distance à l'origine \mathbf{r}_i . Si une fonction f prend comme paramètre un vecteur \mathbf{r} , on note sa transformée de Fourier :

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$$

où $n_{\mathbf{k}}$ désigne le cardinal de l'ensemble des impulsions \mathbf{k} accessibles. En effet, remarquons que si on applique à la fonction $f(\mathbf{r})$ des conditions aux bords périodiques, par exemple $f(\mathbf{L}) = f(\mathbf{0})$, on obtient une quantification des impulsions par la condition

$$e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{L}} = 1 \Leftrightarrow \mathbf{k} \cdot \mathbf{L} = 0 [2\pi]$$

On a également la relation de transformée de Fourier inverse :

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{k})$$

On peut voir l'opérateur $c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ comme une fonction de $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. La transformée de Fourier (inverse) s'écrit alors :

$$c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

Et on a donc :

$$c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} = \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

Pour la DMFT, il sera utile d'étudier le cas $U = 0$ de Hubbard. Regardons à

quoi ressemble ce hamiltonien en impulsion :

$$\begin{aligned} H_{Hubb}(U=0) &= - \sum_{ij\sigma} t_{ij} \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} 2 \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \underbrace{\sum_{ij} \frac{-t_{ij}}{n_{\mathbf{k}}} 2 \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))}_{\varepsilon(\mathbf{k})} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned}$$

On vient de diagonaliser le hamiltonien !

$$H_{Hubb}(U=0) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

Remarque : l'ensemble des \mathbf{k} est déterminé par les conditions aux bords périodiques. Faisons le calcul dans le cas d'un solide cristallin cubique en dimension 3, en prenant 1 comme unité de longueur du cube. Si on considère que le solide a comme nombre de sites par cotés p_1, p_2, p_3 , alors on a :

$$\mathbf{k}_\alpha = \begin{pmatrix} \frac{2\pi\alpha_1}{p_1} \\ \frac{2\pi\alpha_2}{p_2} \\ \frac{2\pi\alpha_3}{p_3} \end{pmatrix}$$

Pour $0 \leq \alpha_i < p_i$. On a alors :

$$\varepsilon(\mathbf{k}_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3}) = -2t \left(\cos\left(\frac{2\pi\alpha_1}{p_1}\right) + \cos\left(\frac{2\pi\alpha_2}{p_2}\right) + \cos\left(\frac{2\pi\alpha_3}{p_3}\right) \right)$$

Fonctions de Green du modèle de Hubbard

On définit la fonction de Green en impulsion du modèle pour $U=0$ (toutes les quantités avec subscript 0 correspondent au cas $U=0$) :

$$G_0(\mathbf{k}, \tau) = -\langle \mathcal{T} c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}}(0) \rangle$$

Cette fonction est β anti-périodique. On peut considérer sa transformée de Fourier (en temps), pour obtenir, en fréquence :

$$G_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$

Avec

$$\omega_n = (2n + 1) \frac{2\pi}{\beta}$$

Revenons au cas $U \neq 0$. Le changement de comportement dû aux interactions est déterminé par l'énergie propre $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$, définie par :

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_0(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1} - G(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1}$$

On a alors

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}$$

On définit alors la fonction de Green locale (dans toute la suite, on omettra d'écrire $\frac{1}{n_{\mathbf{k}}}$ mais les sommes sur \mathbf{k} sont bien normalisées.

$$G_{loc}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}$$

Remarque : on peut également définir la fonction de Green par couple de site :

$$G_{ij}(\tau) = -\langle \mathcal{T} c_i(\tau) c_j^\dagger(0) \rangle$$

Qu'on peut aussi voir comme une fonction vectorielle : $G_{ij}(\tau) = G(\mathbf{r} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau)$. Mais alors on a la relation de Fourier :

$$G(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} G(\mathbf{k})$$

Et donc

$$G_{ii} = G(\mathbf{r} = 0) = \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) = G_{loc}$$

Et on peut donc utiliser les notations G_{ii} et G_{loc} de façon indifférente.

Modèle d'impureté d'Anderson

Dans l'optique de faire un raisonnement de type "champ moyen", on peut considérer un modèle (complètement équivalent à Hubbard), dans lequel un seul atome est couplé à un bain. Ce calcul est fait en termes d'actions. On part du modèle de Hubbard, on choisit un site (le site 0 par exemple) et on va intégrer sur tous les autres sites. On obtient une action S_{imp} (les calculs

sont compliqués et détaillés dans [NO98]) qui définit notre nouveau modèle, dit d'impureté. On fait la limite quand $d \rightarrow +\infty$ (où d est la dimension du problème). C'est ici que le modèle d'impureté n'est plus rigoureusement égal à notre modèle de Hubbard de départ. Dans cette limite, on a :

$$S_{imp} = \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' c^*(\tau) \{ -\mathcal{G}^{-1}(\tau - \tau') \} c(\tau') + \int_0^\beta d\tau U n_\uparrow(\tau) n_\downarrow(\tau)$$

Où \mathcal{G} joue le rôle de G_0 dans le modèle de Hubbard. On peut donc définir de la même façon :

$$G_{imp} = -\langle \mathcal{T} c^\dagger(\tau) c(0) \rangle$$

et

$$\Sigma_{imp} = \mathcal{G}^{-1} - G_{imp}^{-1}$$

D'autre part, on remarque que l'action S_{imp} n'est pas de façon évident sous la forme $\int d\tau H(\tau)$ où H serait l'hamiltonien du système (qui n'agit pas forcément dans l'espace initial de Hilbert). On peut pallier partiellement à ce problème : il est possible de trouver un hamiltonien tel qu'on ait, pour toute observable X :

$$\langle X \rangle = Tr \left(\frac{1}{Z} e^{-\beta H} X \right)$$

Cet hamiltonien, qu'on note H_{AIM} se décompose en trois parties (Antoine Georges) :

$$H_{AIM} = H_{atom} + H_{coupling} + H_{bath}$$

Avec :

$$H_{atom} = U n_\uparrow n_\downarrow - \mu(n_\uparrow + n_\downarrow)$$

qui décrit l'énergie d'interaction sur le site,

$$H_{bath} = \sum_{l\sigma} \tilde{\varepsilon}_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma}$$

l'énergie de chaque atome, et

$$H_{coupling} = \sum_{l\sigma} V_l \left(a_{l\sigma}^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_{l\sigma} \right)$$

qui modélise la probabilité de saut entre le site et le bain. Ces paramètres sont reliés aux fonctions de Green à travers la fonction d'hybridation :

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}$$

par

$$\mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n)$$

Boucle DMFT

Revenons à la DMFT. L'idée de faire l'approximation

$$\Sigma_{imp} = \Sigma(\mathbf{k})$$

Le modèle d'impureté n'est maintenant plus équivalent au modèle de Hubbard. On impose donc

$$G_{imp} = G_{loc}$$

On a toutes les équations pour définir le programme DMFT.

Pour les calculs explicite, on a besoin de la formule de Lehman :

$$G_{ab}(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \sum_{i,j} \frac{(e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) \langle \Psi_i | c_a | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j | c_b^\dagger | \Psi_i \rangle}{E_j - E_i - i\omega_n}$$

On présente maintenant l'algorithme DMFT :

1. On choisit une valeur arbitraire pour Σ_{imp} . Par exemple, $\Sigma_{imp} = 0$.
2. On calcule $G_{loc}(i\omega_n)$ avec l'approximation $\Sigma_{imp} = \Sigma(\mathbf{k})$:

$$G_{loc}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}$$

3. On peut alors calculer le champ effectif \mathcal{G} avec la relation de cohérence $G_{imp} = G_{loc} : \mathcal{G} = (\Sigma_{imp} + G_{imp}^{-1})^{-1}$ puis $\Delta(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Sigma_{imp}(i\omega_n) - G_{imp}^{-1}(i\omega_n)$.

4. On peut alors trouver des coefficients V_l et $\tilde{\varepsilon}_l$ tels qu'on retrouve l'égalité

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}$$

5. On résout le modèle d'impureté pour ces coefficients : on obtient une nouvelle fonction G_{imp} avec la formule de Lehman. Dans notre cas on a

$$G_{imp}(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \sum_{i,j} \frac{(e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle|^2}{E_j - E_i - i\omega_n}$$

et on peut alors extraire l'énergie propre $\Sigma_{imp} = \mathcal{G}^{-1} - G_{imp}^{-1}$. On revient au point 2 jusqu'à convergence de G_{imp} .

Cet algorithme mérite une explication. Il est important de comprendre que notre objectif est de calculer G_{imp} : ainsi, quand on écrit $G_{imp} = G_{loc}$ comme relation de cohérence, cela ne signifie pas qu'on fixe G_{imp} . Cette relation de cohérence nous permet seulement d'obtenir le champ effectif \mathcal{G} qui nous permet de définir un modèle d'impureté le plus proche possible du modèle de Hubbard.

Résultats

Nous disposons de nouvelles variables (G_{imp}, Σ_{imp}), et celles ci vont nous donner des informations sur le système assez facilement. En particulier, on remarque que Σ_{imp} mesure l'écart à un modèle sans interaction. Ainsi, $\Sigma_{imp} \neq 0$ correspond à un cas où on ne peut pas négliger l'interaction entre atomes, c'est à dire au cas où le matériau est isolant. Ainsi, un saut de $\Sigma_{imp}(i\omega_n)$ (par exemple en $\omega = 0$), qui passe de 0 à une valeur non nulle, correspond à une transition entre conducteur et isolant.

Les résultats sont présentés en figure (IV). Ici, on a donc $U_c \approx 7$. On remarque qu'avec DMFT, on peut résoudre un modèle de Hubbard à 100 sites, la où on était limité à 10 sites avec une résolution naïve.

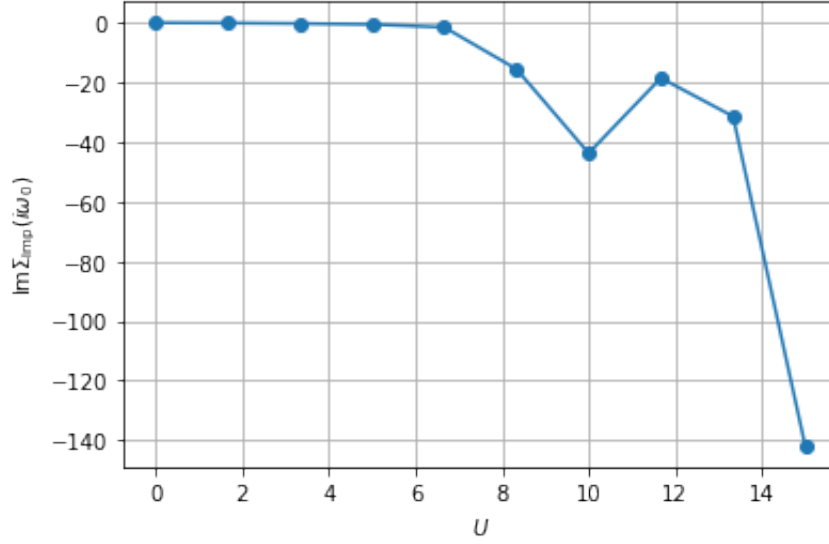


FIGURE 3 – $\mathcal{I}(\Sigma_{imp}(i\omega_o))$ pour différentes valeurs de U , à $t = 1$, $\beta = 10$, $\mu = U/2$ et pour $(n, m) = (10, 10)$

Comment vérifier nos résultats ?

Un problème apparait rapidement : il est difficile de vérifier les résultats qu'on obtient. D'une part, il faut vérifier que tous les calculs fait sont bons. D'autre part, il convient de vérifier que le résultat est bien proche du résultat réel, c'est à dire que les approximations utilisées ne sont pas trop restrictives. On présente ici, pour chaque étape de la boucle DMFT, les vérifications faites pour essayer de résoudre ce problème.

1. Pas de vérification à faire
2. On vérifie que $\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$
3. On vérifie l'asymptotique de Δ , c'est à dire que $\mathcal{R}(\Delta(i\omega_n)) \rightarrow 0$ et $\mathcal{I}(\Delta(i\omega_n)) \frac{\omega_n}{6t^2} \rightarrow -1$ quand $n \rightarrow +\infty$ (voir annexe)
4. Le programme de fit fournit une estimation de l'écart à la valeur réelle : on s'assure il est assez faible
5. On vérifie l'asymptotique de G_{imp} , c'est à dire que $\mathcal{R}(\Delta(i\omega_n)) \rightarrow 0$ et $\mathcal{I}(G_{imp}(i\omega_n)) \omega_n \rightarrow -1$ quand $n \rightarrow +\infty$ (voir annexe). On vérifie également que $\Sigma_{imp} \rightarrow 0$.

Dans l'annexe, on effectue tous les calculs d'asymptotiques des différentes fonctions mises en jeu.

V Algorithmes quantiques

On a vu les limitations, même avec une boucle DMFT, de l'ordinateur classique pour résoudre ce problème. L'idée est maintenant de regarder si on peut améliorer ces performances avec un ordinateur quantique. L'objectif sera donc de remplacer la partie coûteuse de l'algorithme DMFT (la résolution du modèle d'impureté, c'est à dire l'algorithme qui, à H_{AIM} donné, renvoie G_{imp}) par un algorithme quantique, qui converge (en théorie, c'est à dire si on possède un ordinateur quantique sans erreur) plus rapidement. Cette partie est inspirée de [Ayr+]

Principe général de l'ordinateur quantique

L'idée est d'utiliser un ordinateur quantique, c'est à dire un ordinateur, dont les bits classiques sont remplacés par des qubits, quantiques. Quand un bit peut seulement prendre les valeurs 0 ou 1, un qubit est dans une superposition d'état, $\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle$. On peut penser par exemple à la polarisation d'un photon, ou au spin d'un électron. Évidemment, la mesure des qubits renvoie toujours les valeurs 0 ou 1, mais l'exploitation des propriétés quantiques, et notamment de l'intrication, vont permettre d'améliorer la puissance de calcul.

Dans un ordinateur quantique, les portes classiques (ET, OU, NON...) sont remplacées par des portes quantiques, qui sont simplement des opérateurs unitaires qui agissent sur les qubits. Ces portes sont donc représentées par des matrices de taille 2^{2n} où n est le nombre de qubits sur lequel la porte agit. Évidemment, nous n'avons pas accès à un ordinateur quantique. Pour expérimenter ces méthodes, nous utilisons une librairie Python (MyQLM) qui simule un ordinateur quantique. Ainsi, la performance ne pourra être meilleure que celle d'un ordinateur classique. L'idée est seulement de vérifier que ces méthodes convergent bien.

Transformée de Jordan Wigner :

La première étape consiste à transformer les données de notre problème, c'est à dire un Hamiltonien de fermions, en un hamiltonien adapté à un ordinateur quantique, c'est à dire un hamiltonien de spin. Ceci est fait au moyen de la transformation de Jordan-Wigner. L'objectif est d'exprimer l'hamiltonien dans














Operator	Gate(s)	Matrix
Pauli-X (X)	 	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y (Y)		$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z (Z)		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
Hadamard (H)		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Phase (S, P)		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
$\pi/8$ (T)		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$
Controlled Not (CNOT, CX)		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Controlled Z (CZ)	 	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
SWAP	 	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Toffoli (CCNOT, CCX, TOFF)		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

FIGURE 4 – Quelques portes quantiques importantes

la base des matrices de Pauli :

$$H = \sum_k \lambda_k P_k$$

où P_j est un produit de matrices de Pauli. L'idée, pour cela, est de remarquer que pour un seul spin, on a une correspondance :

$$\begin{cases} |\uparrow\rangle = c^\dagger |0\rangle \\ |\downarrow\rangle = |0\rangle \end{cases}$$

Ainsi, on peut prendre

$$\begin{aligned} c^\dagger &= S^+ = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) \\ c &= S^- = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) \end{aligned}$$

Et on a également

$$\begin{aligned} S_z &= \frac{1}{2} [|\uparrow\rangle \langle\uparrow| - |\downarrow\rangle \langle\downarrow|] \\ &= \frac{1}{2} [c^\dagger c - (1 - c^\dagger c)] \\ &= c^\dagger c - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Pour plusieurs spins, il faut ajouter une phase, conformément aux formules (1) et (2) :

$$c_j^+ = (-1)^{s_i} S_j^+ = e^{i\phi_j} S_j^+$$

où $\phi_j = \pi \sum_{l < j} n_l$

Remarquons qu'il y a un nombre polynomiale de termes dans la décomposition en matrice de Pauli. C'est important pour la complexité finale de l'algorithme, que nous étudions dans les sections suivantes.

Trotterization :

Il sera dans la suite utile de calculer, à l'aide d'un ordinateur quantique, des opérateurs de la forme

$$e^{-iHt}$$

Grâce à la transformée de Jordan-Wigner, on la décompose :

$$H = \sum_k \lambda_k P_k$$

et on cherche donc à calculer

$$e^{-iHt} = e^{-\sum_k \lambda_k P_k}$$

La difficulté provient du fait que les termes de la somme ne commutent pas. Or, on a la limite :

$$\lim_{N_t \rightarrow +\infty} \left(\prod_{k=1}^m e^{-i\lambda_k P_k \frac{t}{N_t}} \right)^{N_t} = e^{-\sum_k \lambda_k P_k}$$

On choisit donc un N_t grand, et on écrit :

$$e^{-iHt} = \left(\prod_{j=1}^m e^{-i\lambda_j P_j \frac{t}{N_t}} \right)^{N_t}$$

Cette approximation est appelée **formule de Suzuki-Trotter**.

Algorithmes variationnels quantiques

L'étape suivante est de trouver l'état fondamental de l'hamiltonien. Ceci est fait au moyen d'un algorithme variationnel. L'idée générale est de trouver une famille d'états $(|\psi(\theta)\rangle)_{\theta \in \mathbb{R}^m}$, telle qu'on ait

$$\min_{\theta} \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle \approx E_0$$

Où E_0 est l'énergie fondamentale de H_{AIM} . On supposera que les états s'obtiennent par des transformations unitaires

$$|\psi(\theta)\rangle = U(\theta) |\psi_0\rangle$$

La minimisation se fera à l'aide d'algorithmes d'optimisation classiques. L'ordinateur quantique sera utile pour le calcul des $E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$. Toute la difficulté provient du choix de la famille d'états $(|\psi(\theta)\rangle)_{\theta \in \Theta}$, appelé **Ansatz**.

Un ansatz classique est le **Hamiltonian Variational Ansatz** (HVA), dont le principe est le suivant. On suppose qu'on a une décomposition

$$H = \sum_k H_k$$

telle que $[H_k, H_{k'}] \neq 0$ pour $k \neq k'$ (pour le modèle d'Anderson, il s'agira de la décomposition de Jordan Wigner) et on prend

$$|\psi(\theta)\rangle = \prod_{l=1}^L \left(\prod_{k=1}^m e^{-i\theta_k^l H_k} \right) |\psi_0\rangle \quad (3)$$

où $|\psi_0\rangle$ est l'état fondamental d'un des H_k . L est appelée la **profondeur** de l'ansatz.

Comment expliquer cette forme? L'idée de départ est que, dans le cas de Hubbard, on sait diagonaliser l'hamiltonien sans interaction. Avec la même technique, on peut diagonaliser l'hamiltonien de Anderson sans interaction :

$$H_0 = H_{AIM}(U = 0) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$$

où, pour simplifier, on a noté $a_{0\sigma}^\dagger = c_\sigma^\dagger$. Le résultat important, que nous allons utiliser est le **théorème adiabatique** qui stipule que si l'évolution dans le temps d'un hamiltonien $H(t)$ est assez lente, et que $|\psi_0\rangle$ est préparé dans l'état fondamental de $H_0 = H(0)$, alors l'état après évolution :

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{T} e^{-i \int_0^t H(\tau) d\tau} |\psi_0\rangle$$

est l'état fondamental de $H(t)$.

Ansi, en utilisant ce résultat, on peut définir :

$$H(s(t)) = (1 - s(t))H_0 + s(t)H_f$$

où H_f est l'hamiltonien qu'on souhaite diagonaliser, et s une fonction à variation lente telle que $s(0) = 0$ et $s(T) = 1$. En définissant alors :

$$|\psi_f\rangle = \mathcal{T} e^{i \int_0^T H(\tau) d\tau} |\psi_0\rangle$$

On dispose d'un bon candidat pour l'état fondamental de H_f . Or, il est difficile de calculer l'exponentielle l'intégrale $\int_0^T H(s(\tau)) d\tau$ sur un ordinateur quantique. On divise donc l'intervalle $[0, T]$ en subdivisions de taille $\Delta\tau$ et on écrit :

$$\int_0^T H(s(\tau)) d\tau = \sum_{l=1}^L H((l\Delta\tau)) \Delta\tau = \sum_{l=1}^L [(1 - s(l\Delta\tau))H_0 + s(l\Delta\tau)H_f] \Delta\tau$$

On alors, en utilisant la trotterization :

$$|\psi_f\rangle \approx \left(\prod_{l=1}^L e^{-i(1-s(l\Delta\tau))H_0 \frac{\Delta\tau}{N}} e^{-is(l\Delta\tau)H_f \frac{\Delta\tau}{N}} \right)^N$$

et on retrouve une forme qui se rapproche de 3

Résultats et comparaisons des différentes méthodes

On utilise un ansatz déjà implémenté dans MyQLM appelé LDCA. On présente les résultats, qu'on compare aux valeurs obtenues par diagonalisation exacte, dans les figures 5, 6 et 7. Pour le problème d'optimisation, on utilise la méthode COBYLA. Évidemment, le fait qu'il s'agisse d'une simulation, et non d'un vrai ordinateur quantique, limite les calculs. Dans le cas de la diagonalisation d'Anderson à 1+1 et 2+1 sites, on observe bien une convergence vers la valeur exacte de l'énergie fondamentale. Pour 3+1 sites, il est déjà plus compliqué d'obtenir cette convergence en un nombre raisonnable d'itérations : il faudrait présumablement augmenter la profondeur de l'ansatz, mais notre puissance de calcul pour la simulation est limitée.

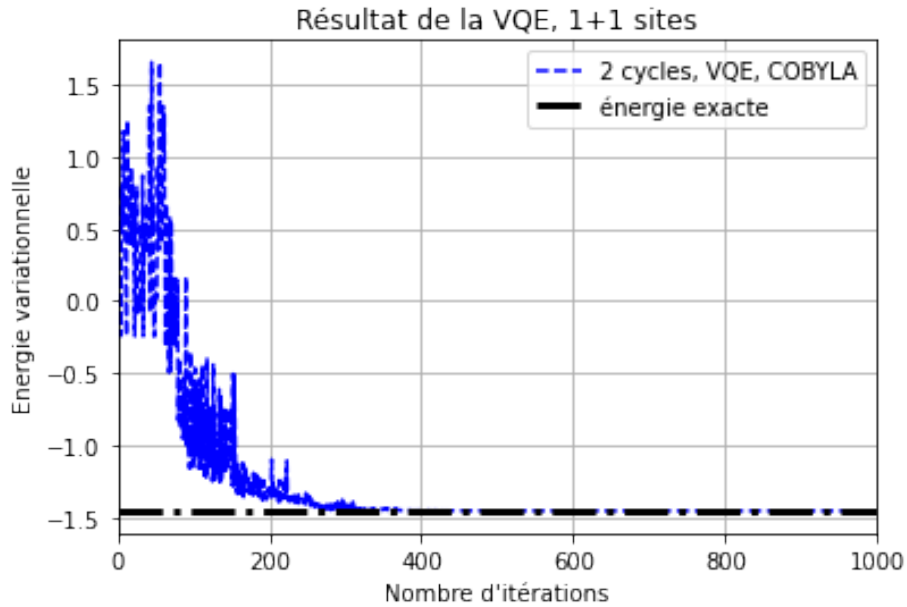


FIGURE 5 – Convergence de l'algorithme variationnel, pour 1+1 sites, à $U = 1$, $\tilde{\varepsilon} = [1]$, $v = [1]$ et $\mu = U/2 = 1/2$

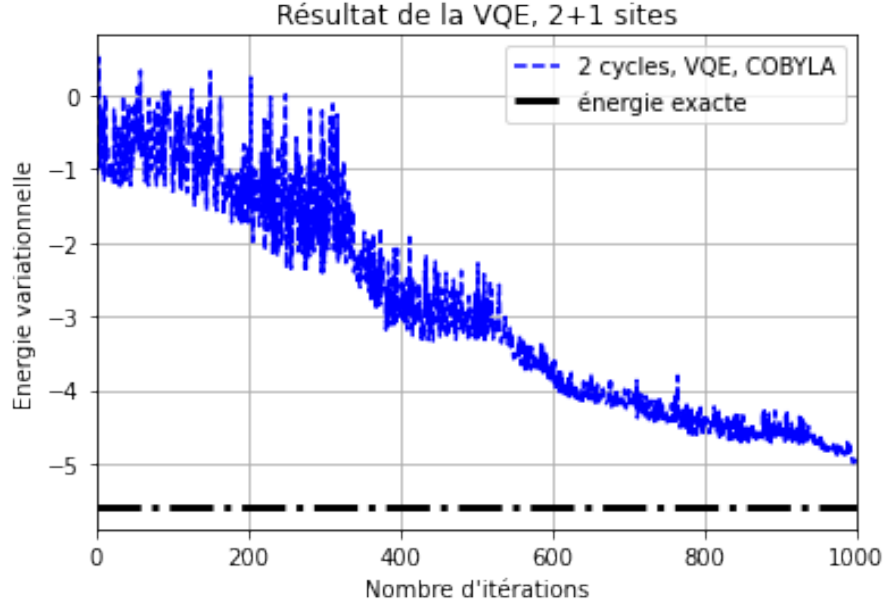


FIGURE 6 – Convergence de l’algorithme variationnel, pour 2+1 sites, à $U = 1$, $\tilde{\varepsilon} = [1, 2]$, $v = [1, -1]$ et $\mu = U/2 = 1/2$

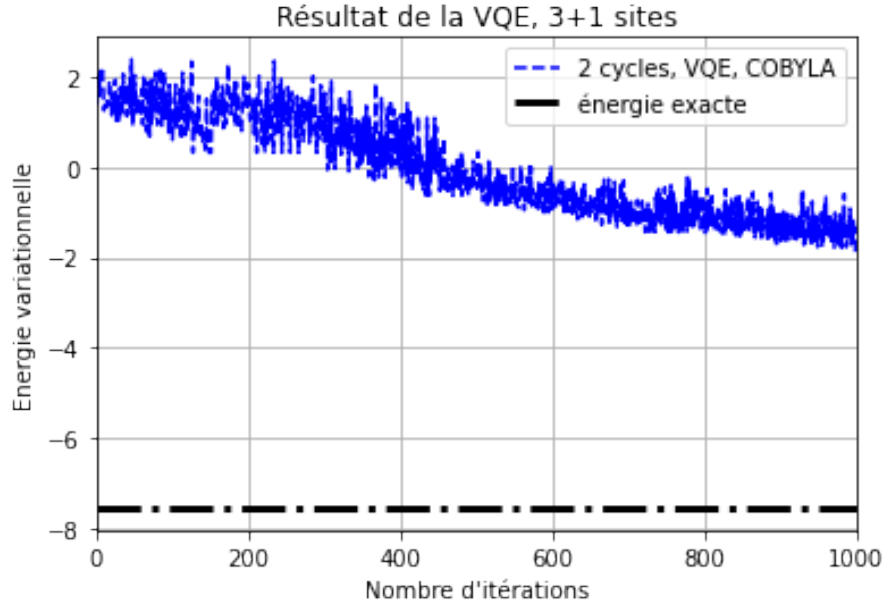


FIGURE 7 – Convergence de l’algorithme variationnel, pour 3+1 sites, à $U = 1$, $\tilde{\varepsilon} = [1, 2, 3]$, $v = [1, -1, 2]$ et $\mu = U/2 = 1/2$

Annexe :

Calcul de l'hamiltonien de Hubbard :

On cherche à calculer les éléments de matrice

$$\langle \phi_k | H_{hubb} | \phi_l \rangle$$

Par exemple, on veut calculer :

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | c_i^\dagger c_j | \phi_l \rangle &= \langle l_0 \dots l_j = 0 \dots l_i = 1 \dots l_n | c_i^\dagger c_j | l_0 \dots l_j = 1 \dots l_i = 0 \dots l_n \rangle \\ &= \langle l_0 \dots l_j = 0 \dots l_i = 1 \dots l_n | c_i^\dagger (-1)^{s_j} | l_0 \dots l_j = 0 \dots l_i = 0 \dots l_n \rangle \\ &= \langle l_0 \dots l_j = 0 \dots l_i = 1 \dots l_n | (-1)^{s_i + \varepsilon} (-1)^{s_j} | l_0 \dots l_j = 0 \dots l_i = 1 \dots l_n \rangle \\ &= (-1)^{s_i + \varepsilon + s_j} \end{aligned}$$

où ε vaut 1 si $j < i$, 1 sinon.

Asymptotiques :

Asymptotique de $\Delta(i\omega_n)$: On souligne ici l'importance de normaliser la somme sur \mathbf{k} . Regardons par exemple la première étape de l'algorithme DMFT. Comme on part avec $\Sigma_{imp} = 0$, on a

$$\Delta(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \left(\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right)^{-1}$$

Et on veut une égalité du type :

$$i\omega_n + \mu - \left(\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right)^{-1} = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l}$$

On a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}} &= \frac{1}{i\omega_n} \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 + \frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{i\omega_n}} \\ &= \frac{1}{i\omega_n} \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} + \left(\frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\frac{1}{(i\omega_n)^3} \right) \right) \\ &= \frac{1}{i\omega_n} \left(1 - \frac{\mu}{i\omega_n} + \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\frac{1}{(i\omega_n)^3} \right) \right) \end{aligned}$$

Où on a utilisé $\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$. On développe séparément :

$$\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} \right)^2 = \frac{1}{(i\omega_n)^2} \sum_{\mathbf{k}} (\mu^2 - 2\mu\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2) = \frac{1}{(i\omega_n)^2} \left(\mu^2 + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 \right)$$

Et il n'est pas dur de voir que :

$$\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} (2t)^2 \sum_{0 \leq \alpha_i < p_i} \left[\cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_1}{p_1} \right) + \cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_2}{p_2} \right) + \cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_3}{p_3} \right) \right]$$

Donc

$$\begin{aligned} \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} 4t^2 \left(p_2 p_3 \sum_{0 \leq \alpha_1 < p_1} \cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_1}{p_1} \right) \right. \\ &\quad \left. + p_1 p_3 \sum_{0 \leq \alpha_2 < p_2} \cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_2}{p_2} \right) + p_1 p_2 \sum_{0 \leq \alpha_3 < p_3} \cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_3}{p_3} \right) \right) \end{aligned}$$

Mais

$$\cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_i}{p_i} \right) = \frac{\cos \left(\frac{4\pi\alpha_i}{p_i} \right) + 1}{2}$$

Donc

$$\sum_{0 \leq \alpha_i < p_i} \cos^2 \left(\frac{2\pi\alpha_i}{p_i} \right) = \sum_{0 \leq \alpha_i < p_i} \frac{\cos \left(\frac{4\pi\alpha_i}{p_i} \right) + 1}{2} = \frac{1}{2} \sum_{0 \leq \alpha_i < p_i} \cos \left(\frac{4\pi\alpha_i}{p_i} \right) + \frac{p_i}{2} = \frac{p_i}{2}$$

Donc

$$\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} 4t^2 \frac{3}{2} p_1 p_2 p_3 = \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} 6 p_1 p_2 p_3 t^2$$

Or $n_{\mathbf{k}} = p_1 p_2 p_3$. Donc :

$$\begin{aligned} \frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 &= 6t^2 \\ \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}} &= \frac{1}{i\omega_n} \left(1 - \frac{\mu}{i\omega_n} + \frac{1}{(i\omega_n)^2} (\mu^2 + 6t^2) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(i\omega_n)^3}\right) \right) \\ \left(\frac{1}{n_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right)^{-1} &= i\omega_n \frac{1}{1 - \frac{\mu}{i\omega_n} + \frac{1}{(i\omega_n)^2} (\mu^2 + 6t^2) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(i\omega_n)^3}\right)} \\ &= i\omega_n \left(1 + \frac{\mu}{i\omega_n} - \frac{1}{(i\omega_n)^2} (\mu^2 + 6t^2) + \frac{\mu^2}{(i\omega_n)^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(i\omega_n)^3}\right) \right) \end{aligned}$$

C'est à dire que :

$$\Delta(i\omega_n) = \frac{6t^2}{i\omega_n} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(i\omega_n)^2}\right)$$

Dans le cas général, c'est à dire $\Sigma_{imp} \neq 0$, on peut montrer que qu'on garde à chaque étape de la boucle $\Sigma_{imp}(i\omega_n) \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow +\infty$. Ainsi, cette estimation reste vraie dans toutes les étapes de la boucle.

D'autre part, de la même façon :

$$\sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_l} = \frac{1}{i\omega_n} \sum_l \frac{|V_l|^2}{1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_l}{i\omega_n}} = \frac{1}{i\omega_n} \sum_l |V_l|^2 \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{i\omega_n}\right) \right)$$

L'optimisation $\Delta(i\omega_n)$ est donc cohérente, en tout cas asymptotiquement.

Asymptotique de $G_{imp}(i\omega_n)$: On cherche à trouver le comportement asymptotique de

$$G_{imp}(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \sum_{i,j} \frac{(e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle|^2}{E_j - E_i - i\omega_n}$$

On peut remarquer que le comportement à l'infini est dicté par

$$\frac{1}{Z i\omega_n} \sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_i | c | \Psi_j \rangle|^2$$

Mais

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle|^2 &= \sum_{i,j} e^{-\beta E_j} \langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | c | \Psi_j \rangle \\
&\quad + \sum_{i,j} e^{-\beta E_i} \langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | c | \Psi_j \rangle \\
&= \sum_j e^{-\beta E_j} \langle \Psi_j | c^\dagger \left(\sum_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \right) c | \Psi_j \rangle \\
&\quad + \sum_{i,j} e^{-\beta E_i} \langle \Psi_i | c | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle \\
&= \sum_j e^{-\beta E_j} \langle \Psi_j | c^\dagger \left(\sum_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \right) c | \Psi_j \rangle \\
&\quad + \sum_i e^{-\beta E_i} \langle \Psi_i | c \left(\sum_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \right) c^\dagger | \Psi_i \rangle
\end{aligned}$$

Or $\left(\sum_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \right) = 1$. Donc

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle|^2 &= \sum_j e^{-\beta E_j} \langle \Psi_j | c^\dagger c | \Psi_j \rangle + \sum_i e^{-\beta E_i} \langle \Psi_i | c c^\dagger | \Psi_i \rangle \\
&= \sum_j e^{-\beta E_j} \langle \Psi_j | c^\dagger c + c c^\dagger | \Psi_j \rangle
\end{aligned}$$

Or $c^\dagger c + c c^\dagger = 1$. Donc

$$\sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle|^2 = Z$$

D'où :

$$G_{imp}(i\omega_n) \sim \frac{1}{i\omega_n}$$

Calcul de la formule de Lehman :

En pratique, le calcul de G_{imp} par la formule de Lehman peut être périlleux, du fait que les énergies E_i sont potentiellement non bornés, et donc les expo-

nentielles $e^{-\beta E_i}$ très grandes. En pratique, on calculera donc plutôt :

$$\begin{aligned} G_{imp}(i\omega_n) &= -\frac{1}{\sum_k e^{-\beta E_k}} \sum_{i,j} \frac{(e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle|^2}{E_j - E_i - i\omega_n} \\ &= -\frac{1}{\sum_k e^{-\beta(E_k - E_0)}} \sum_{i,j} \frac{(e^{-\beta(E_i - E_0)} + e^{-\beta(E_j - E_0)}) |\langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle|^2}{E_j - E_i - i\omega_n} \end{aligned}$$

Pour le calcul du produit scalaire, on fixe $\{|\phi_k\rangle = |k_n \dots k_0\rangle\}$ la base de seconde quantification et on écrit :

$$|\Psi_i\rangle = \sum_{k=0}^{2^{n+1}-1} a_k^{(j)} |\phi_k\rangle = \sum_{k_0=0}^1 \dots \sum_{k_n=0}^1 a_{\overline{k_n \dots k_0}}^{(i)} |k_0 \dots k_n\rangle$$

où $\overline{k_n \dots k_0}$ est la décomposition en binaire de k , et représente le ket

$$|n_0 = k_0, \dots, n_n = k_n\rangle$$

On utilise la convention : $i = (k, \sigma) = 2k + \sigma$, c'est à dire que $k_i = 1$ si et seulement si le site k est occupé par un fermion de spin σ . On a donc par exemple $n = 2n_{site} - 1$. On choisit de placer le site d'impureté en k maximale, c'est à dire que ce site correspond aux bits $n - 1$ et n . Comme cela n'a pas d'importance, on prend $c = c_{\sigma=1}$, c'est à dire que c agit sur le bit k_n . Plus précisément :

$$\begin{aligned} c^\dagger |\Psi_i\rangle &= \sum_{k_0=0}^1 \dots \sum_{k_{n-1}=0}^1 a_{\overline{0k_{n-1} \dots k_0}}^{(i)} c^\dagger |k_0 \dots k_{n-1} 0\rangle \\ &= \sum_{k_0=0}^1 \dots \sum_{k_{n-1}=0}^1 a_{\overline{0k_{n-1} \dots k_0}}^{(i)} (-1)^{n_{un}(k)} |k_0 \dots k_{n-1} 1\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{2^n-1} a_k^{(i)} (-1)^{n_{un}(k)} |\phi_{k+2^n}\rangle \end{aligned}$$

où $n_{un}(k)$ est le nombre de chiffre un dans $k = \overline{k_{n-1} \dots k_0}$. Donc

$$\begin{aligned} \langle \Psi_j | c^\dagger | \Psi_i \rangle &= \sum_{l=0}^{2^{n+1}-1} (a_l^{(j)})^* \sum_{k=0}^{2^n-1} a_k^{(i)} (-1)^{n_{un}(k)} \langle \phi_l | | \phi_{k+2^n} \rangle \\ &= \sum_{k=0}^{2^n-1} (a_{k+2^n}^{(j)})^* a_k^{(i)} (-1)^{n_{un}(k)} \end{aligned}$$

Références

- [Ayr+] Thomas AYRAL et al. “Quantum computing with and for many-body physics”.
- [Ayr15] Thomas AYRAL. “Nonlocal Coulomb Interactions and Electronic Correlations : Novel Many-Body Approaches”. Theses. Ecole Polytechnique, sept. 2015. URL : <https://hal.science/tel-01247625>.
- [Geo04] Antoine GEORGES. “Strongly Correlated Electron Materials : Dynamical Mean-Field Theory and Electronic Structure”. In : *AIP Conference Proceedings*. AIP, 2004. DOI : 10.1063/1.1800733. URL : <https://doi.org/10.1063%2F1.1800733>.
- [NO98] John W. NEGELE et Henri ORLAND. *Quantum Many-particle Systems*. Westview Press, nov. 1998. ISBN : 0738200522. URL : <http://www.worldcat.org/isbn/0738200522>.