

Report intermedio (2)

Rinormalizzazione non locale della
fase antiferromagnetica

Rinormalizzazione dei parametri: potenziale chimico, hopping e gap.

$$\tilde{\mu} \equiv \mu + 2znV$$

$$\tilde{t} \equiv t - w^{(0)}V$$

$$\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}} \equiv m(U + 2zV) + 2iw^{(\pi)}V [\cos(k_x) + \cos(k_y)]$$

Equazioni self-consistenti per i nuovi parametri HF

$$m = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{\mathbf{k} \in \text{MBZ}} \frac{\text{Re}\{\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}\}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \left[f(-\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) - f(\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) \right]$$

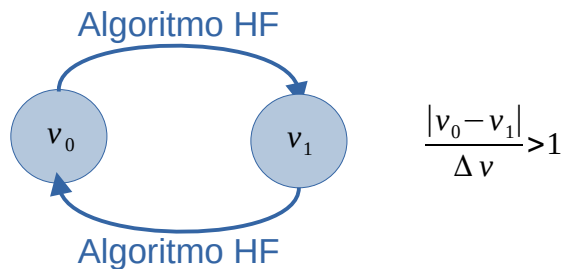
$$w^{(0)} = -\frac{1}{4L_x L_y} \sum_{\mathbf{k} \in \text{MBZ}} (\cos k_x + \cos k_y) \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \left[f(-\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) - f(\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) \right]$$

$$w^{(\pi)} = \frac{1}{4L_x L_y} \sum_{\mathbf{k} \in \text{MBZ}} (\cos k_x + \cos k_y) \frac{\text{Im}\{\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}\}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \left[f(-\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) - f(\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) \right]$$

Report intermedio (2)

Problemi computazionali

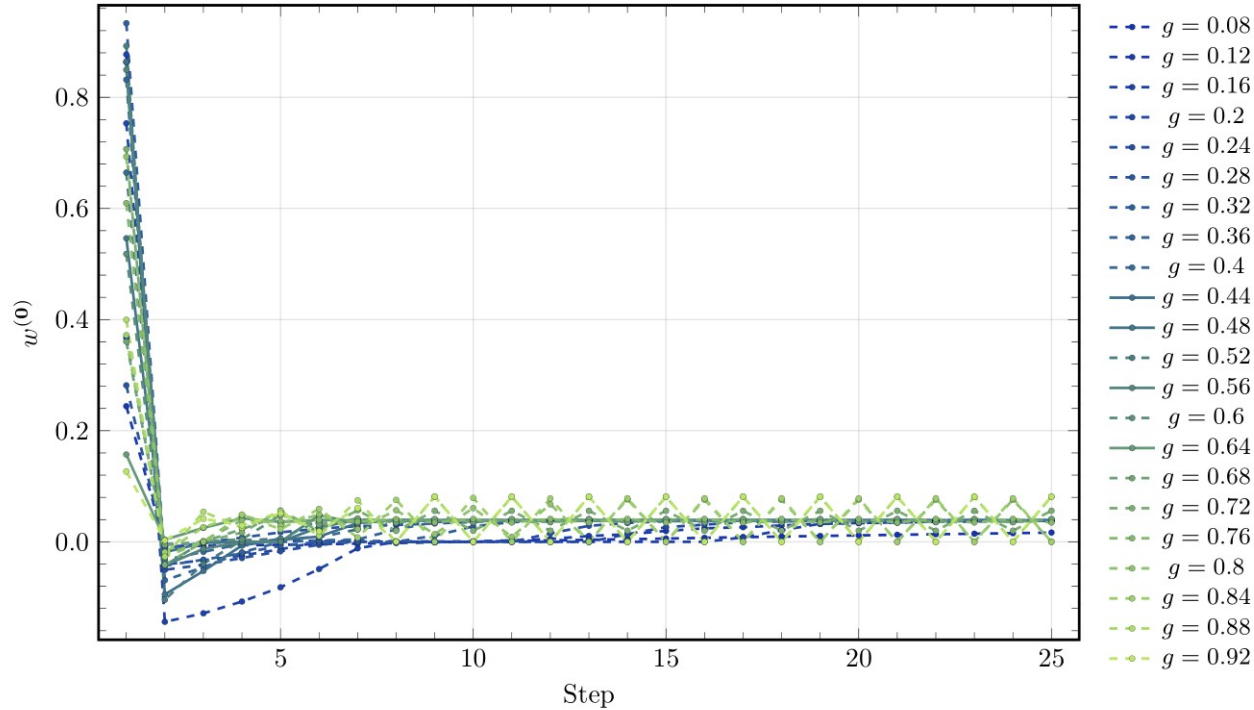
Contesto: scelta dei parametri algoritmici: p (numero massimo di iterazioni), g (mixing parameter), Δv (tolleranze sui parametri HF). Da varie simulazioni emergeva l'esistenza di set di soluzioni ai parametri HF metastabili e cicliche: accade che il parametro v oscilli ciclicamente tra due valori v_0 , v_1 tali che:



Quindi l'algoritmo prosegue all'infinito. In alcuni casi variando il mixing parameter si arriva a convergenza, in altri nessuna scelta di g porta a convergenza (vedi prossime slides).

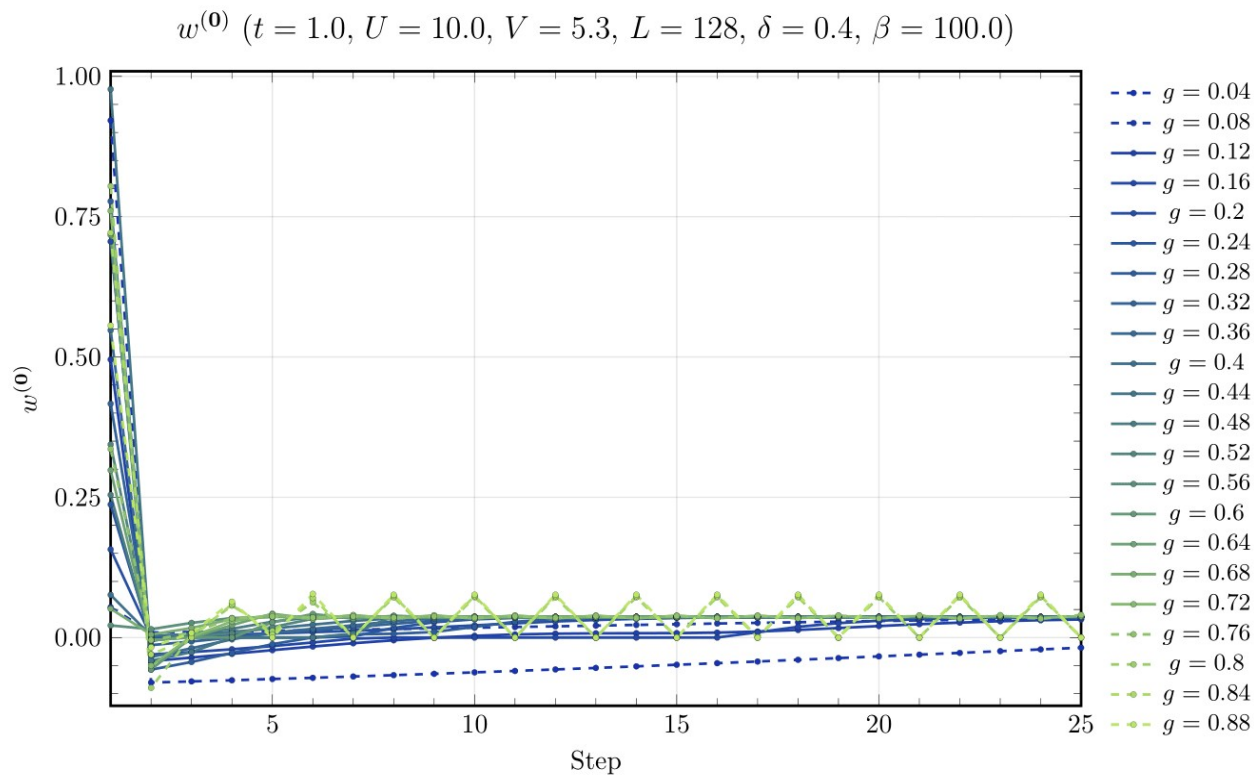
Esempio 1

$$w^{(0)} (t = 1.0, U = 10.0, V = 5.3, L = 32, \delta = 0.4, \beta = 100.0)$$



Linee tratteggiate:
convergenza raggiunta
entro $p=1000$ iterazioni
(plottate per chiarezza
solo le prime 25). Solo
per 4 scelte di g attorno
a 0.5 si ha
convergenza. Mixing
troppo piccoli
convergono troppo
lentamente mentre
mixing troppo grandi
rimangono piantati nei
cicli metastabili.

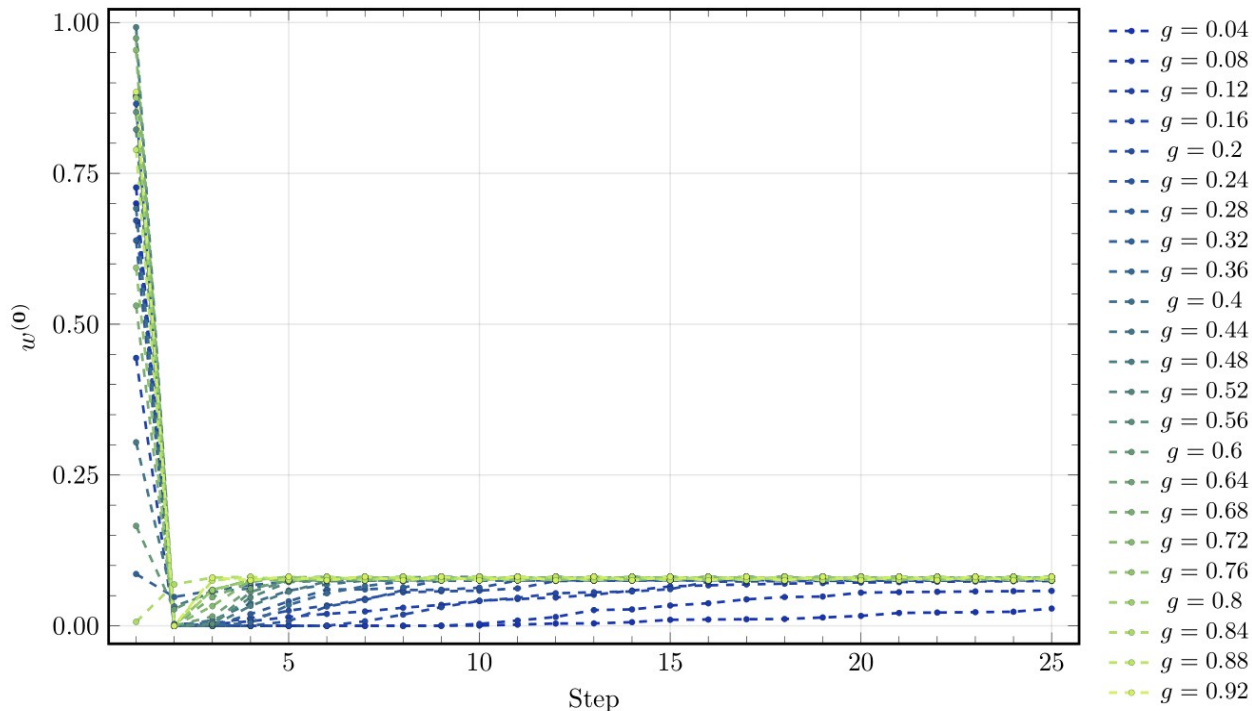
Esempio 1



Passando da $L=32$ a $L=128$ si stabilizza molto la situazione. Per piccole g rimane comunque troppo lenta la convergenza, mentre la metastabilità rimane sulle g troppo alte. Scegliendo quindi g nel range 0.4-0.6, per reticoli grandi, si aggira il problema.

Esempio 2

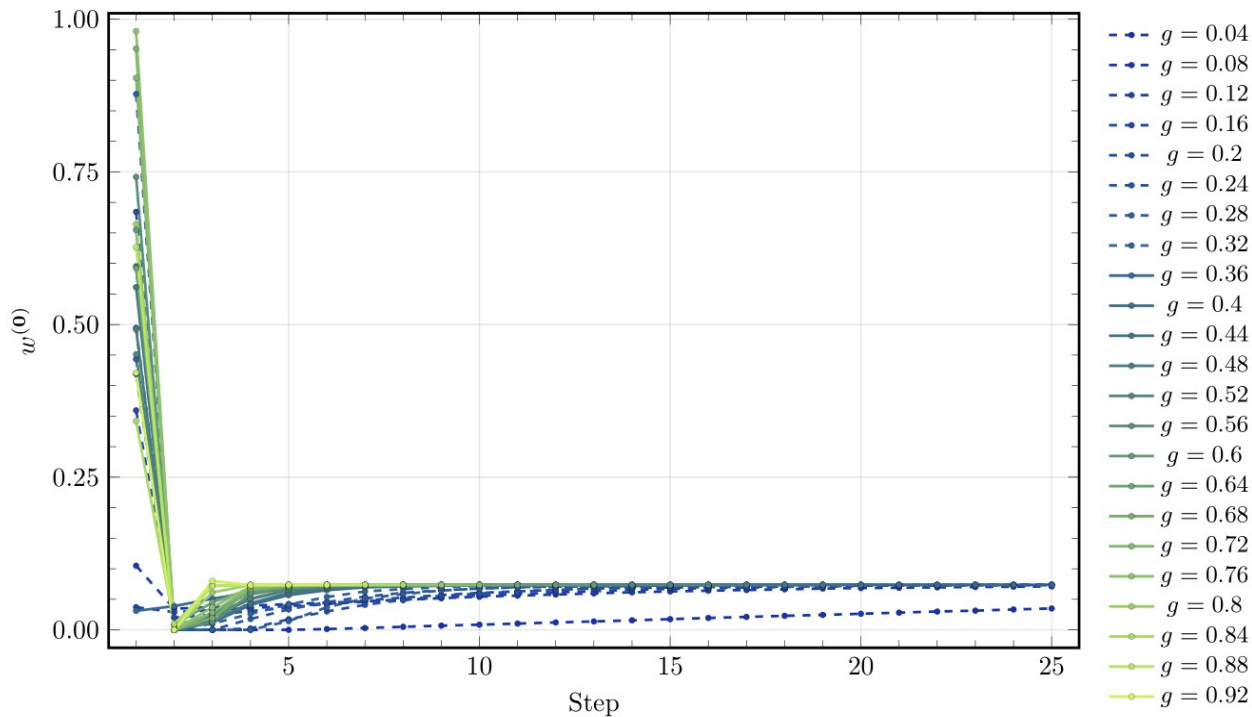
$$w^{(0)} (t = 1.0, U = 4.0, V = 0.8, L = 32, \delta = 0.4, \beta = Inf)$$



Per alcune configurazioni si hanno oscillazioni molto più piccole, ma comunque metastabili, che non portano a convergenza per nessuna scelta del parametro di mixing g . Qui la temperatura è allo zero assoluto, ma la discontinuità della Fermi-Dirac non sembra avere ruolo (vedi prossima slide).

Esempio 2

$$w^{(0)} (t = 1.0, U = 4.0, V = 0.8, L = 128, \delta = 0.4, \beta = \infty)$$



Aumentando la dimensione del reticolo scompaiono completamente i problemi a grande g , e la convergenza è molto rapida.

Scelgo di usare $L \geq 128$ e $1 \leq \beta \leq \infty$, con $g=0.5$ in tutte le successive simulazioni.

Report intermedio (2)

Risultati delle simulazioni

Studio dei parametri Hartree-Fock per la fase anti-ferromagnetica rinormalizzata $\{m, w^0, w^\pi\}$ al variare dei parametri del modello U, V, L , del doping e della temperatura.

$tt = [1.0]$

$UU = [4.0, 10.0, 20.0]$

$VV = [V \text{ for } V \text{ in } 0.0:0.1:3.0]$

$LL = [128, 256]$

$\delta\delta = [\delta \text{ for } \delta \text{ in } 0.0:0.05:0.45]$

$\beta\beta = [50.0, 100.0]$

$p = 100$

$\Delta v = \text{Dict}([$
 $"m" \Rightarrow 1e-4,$
 $"w0" \Rightarrow 1e-4,$
 $"wp" \Rightarrow 1e-4$

$])$

$\Delta n = 1e-2$

$g = 0.5$

Repulsione locale U/t

Attrazione non-locale $\{0.0, 0.1, \dots, 3.0\}$

Dimensione (di un lato) del reticolo

Doping $\{0.0, 0.05, \dots, 0.45\}$

Temperature

Numero massimo di iterazioni

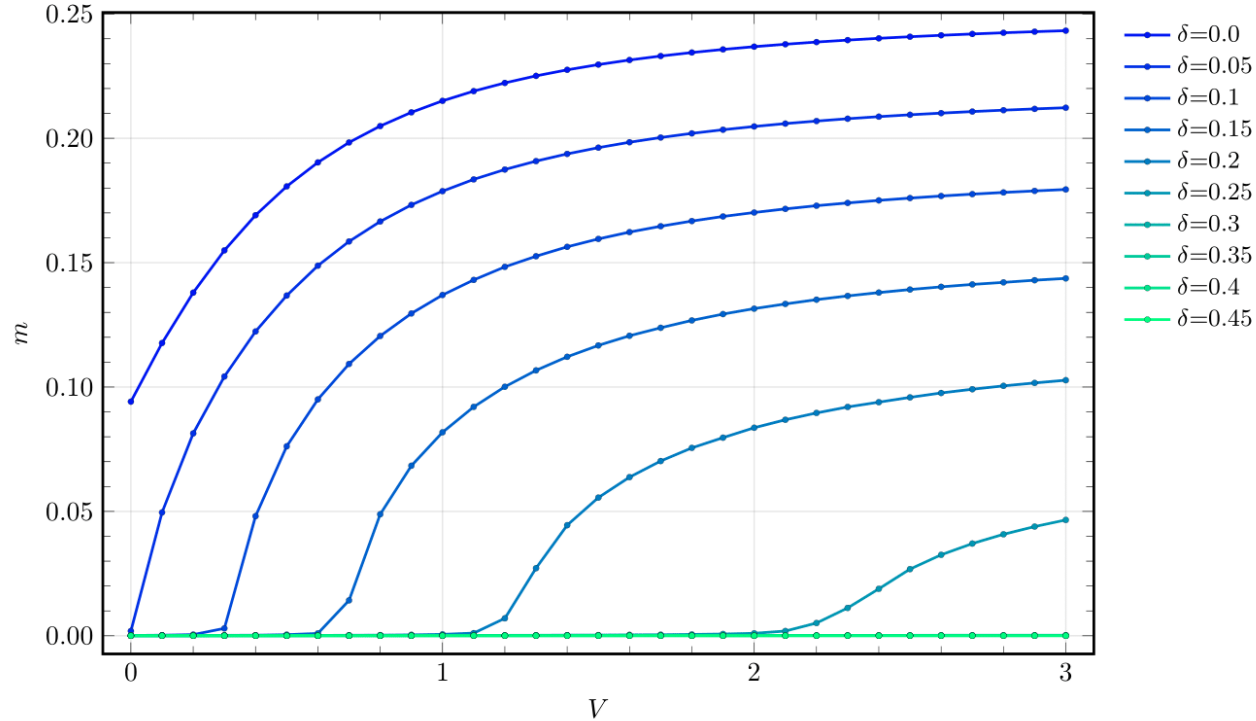
Tolleranza su ogni parametro HF

Tolleranza sulla stima della densità

Parametro di mixing

Parametro: m

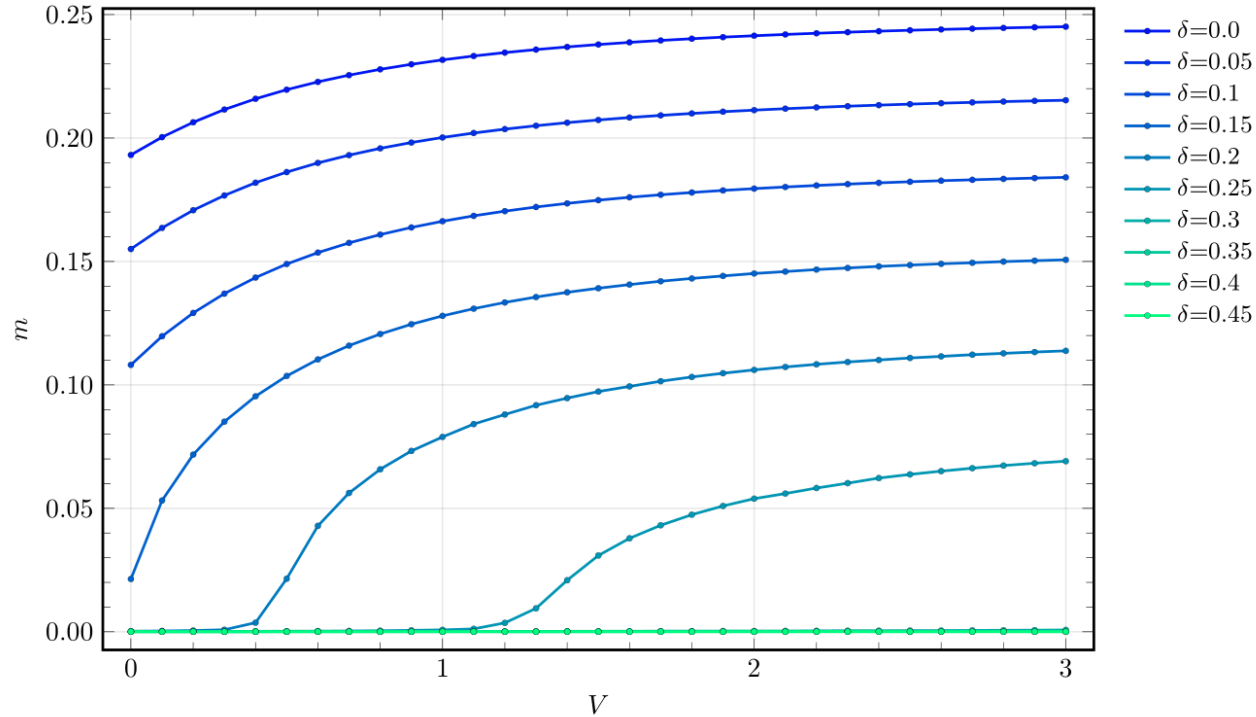
Magnetization ($t = 1.0$, $U = 4.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)



La magnetizzazione “naturale” del modello di Hubbard viene amplificata in modo continuo dall’interazione non-locale. Questo è coerente con la rinormalizzazione del gap antiferromagnetico,

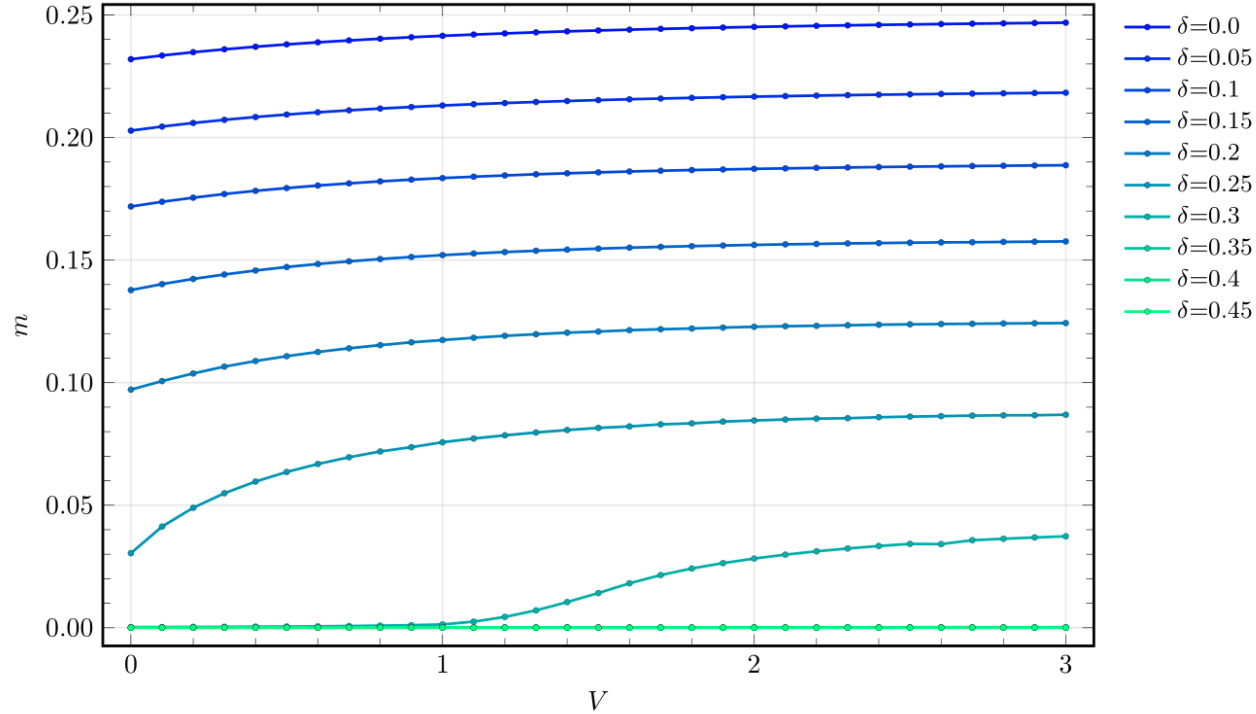
$$\Re\{\Delta_k\} = m(U + 2zV)$$

Magnetization ($t = 1.0$, $U = 10.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)



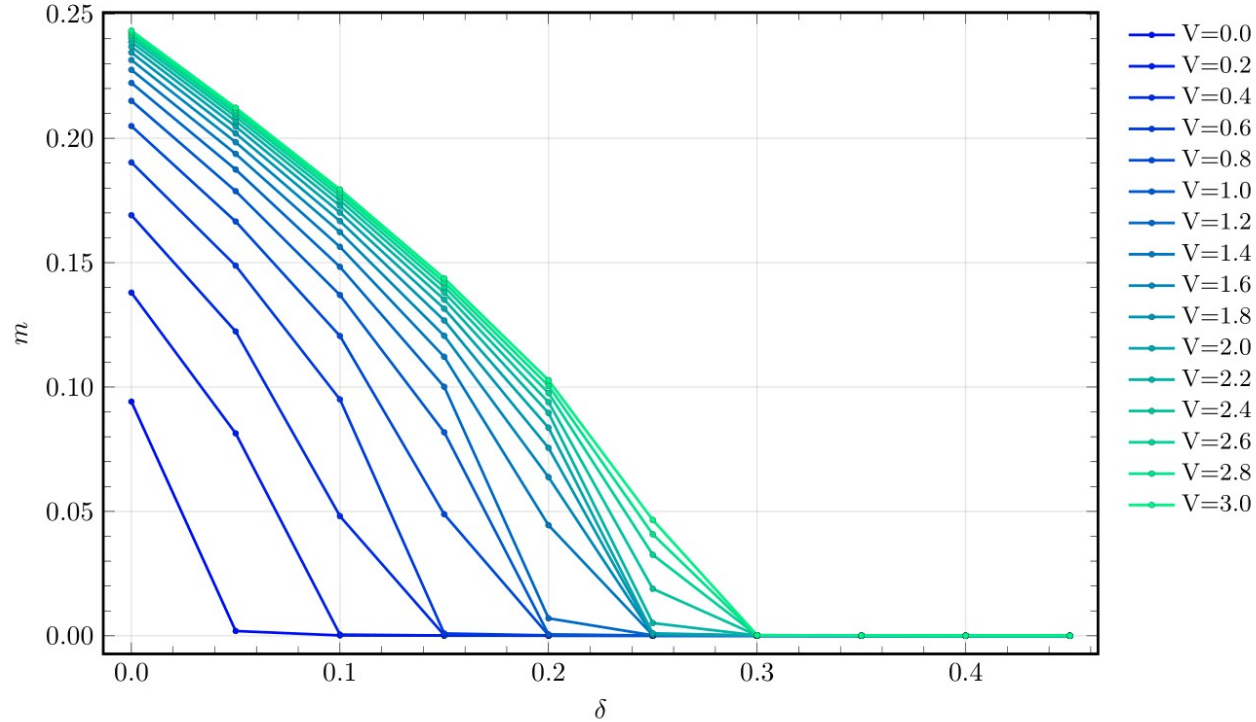
Aumentando il valore della repulsione locale si raggiunge rapidamente la saturazione. L'interazione non-locale agisce da "amplificatore" della magnetizzazione.

Magnetization ($t = 1.0$, $U = 20.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)



Aumentando il valore della repulsione locale si raggiunge rapidamente la saturazione. L'interazione non-locale agisce da "amplificatore" della magnetizzazione.

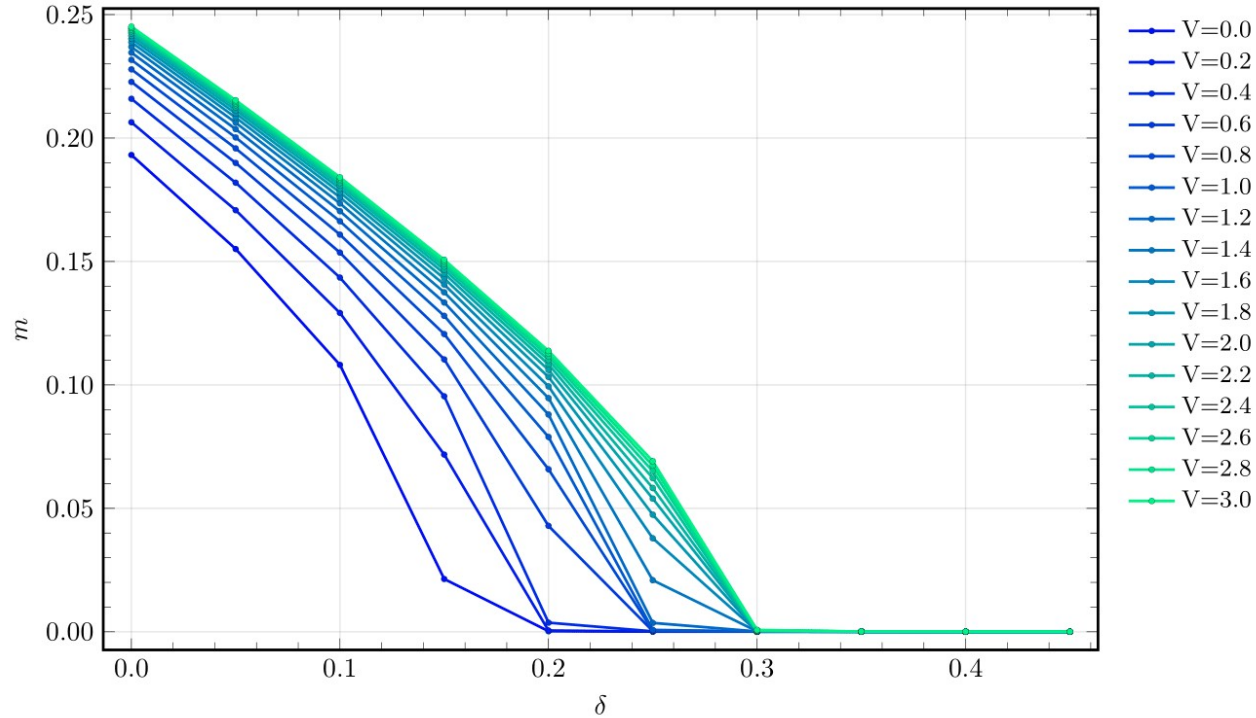
Magnetization ($t = 1.0$, $U = 4.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying V)



Guardando in funzione del doping, al crescere di V la magnetizzazione cresce per ogni doping “asintotizzando” alla curva più chiara.

(Non tutte le V sono plottate)

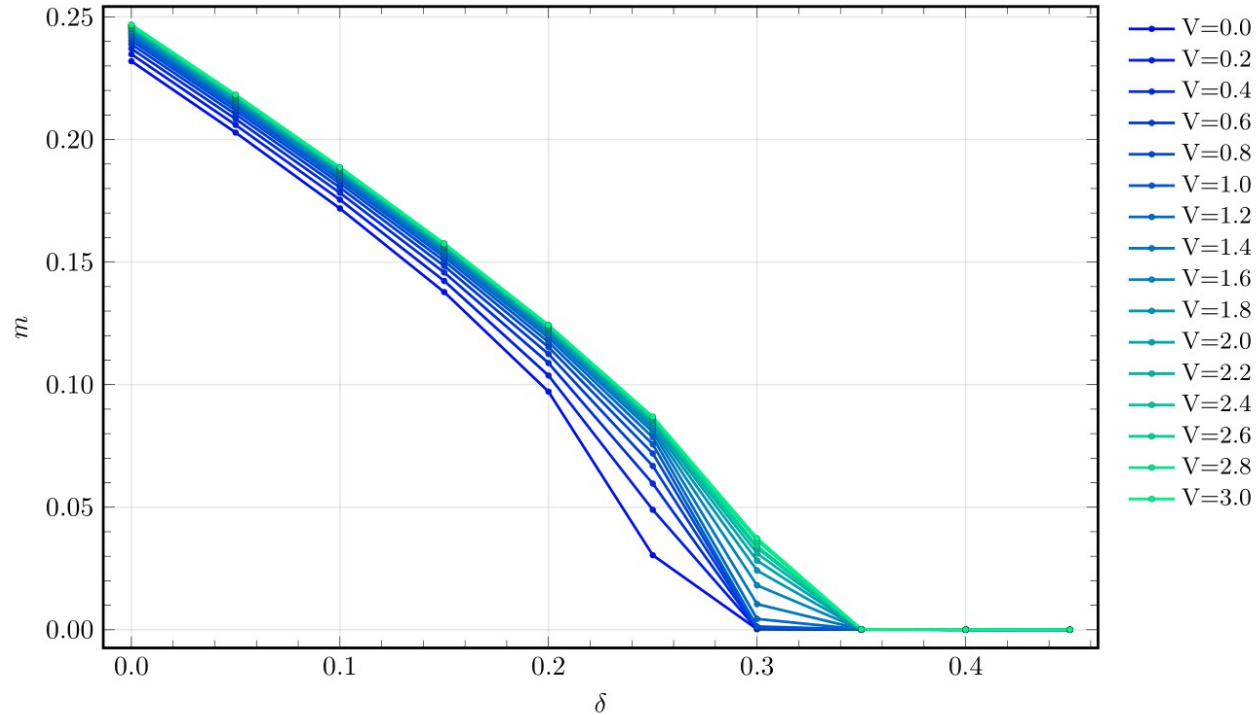
Magnetization ($t = 1.0$, $U = 10.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying V)



Guardando in funzione del doping, al crescere di V la magnetizzazione cresce per ogni doping “asintotizzando” alla curva più chiara.

(Non tutte le V sono plottate)

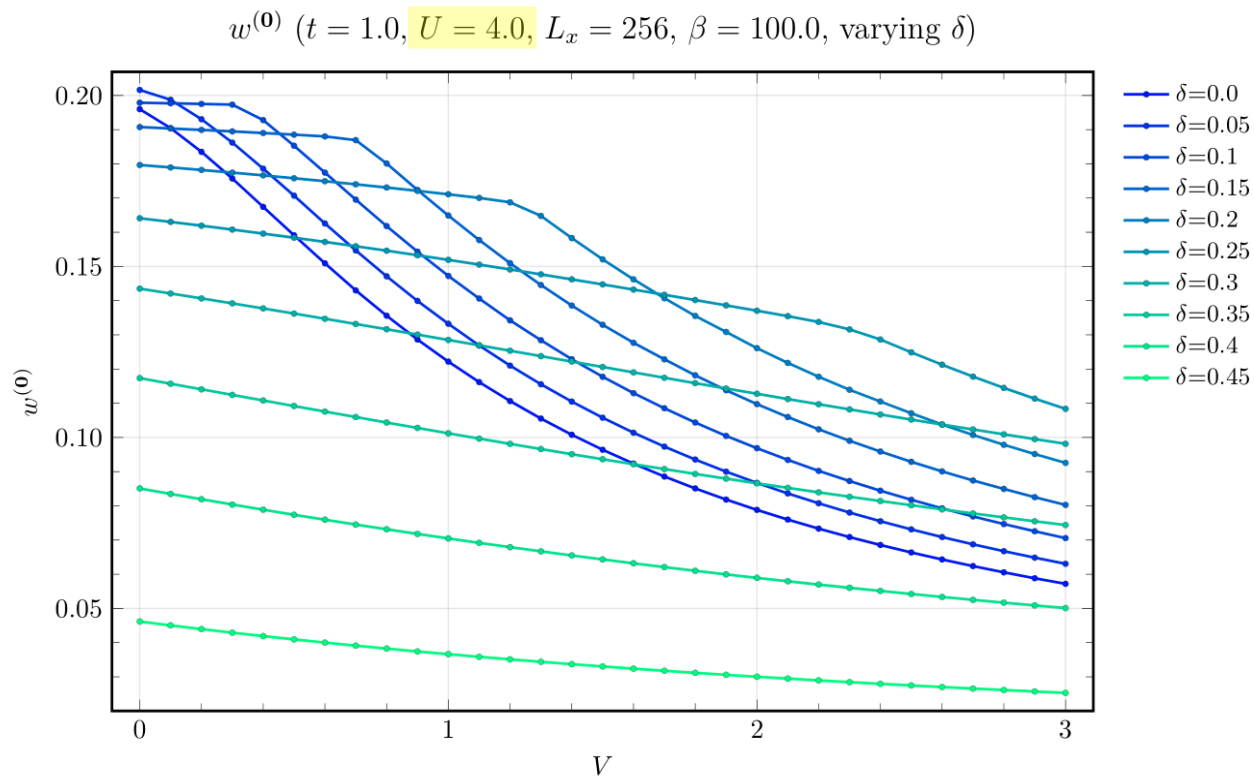
Magnetization ($t = 1.0$, $U = 20.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying V)



Guardando in funzione del doping, al crescere di V la magnetizzazione cresce per ogni doping “asintotizzando” alla curva più chiara. Per U grandi si magnetizza il sistema anche per doping superiori a 0.3.

(Non tutte le V sono plottate)

Parametro: w^0



Il parametro controlla la rinormalizzazione dell'hopping,

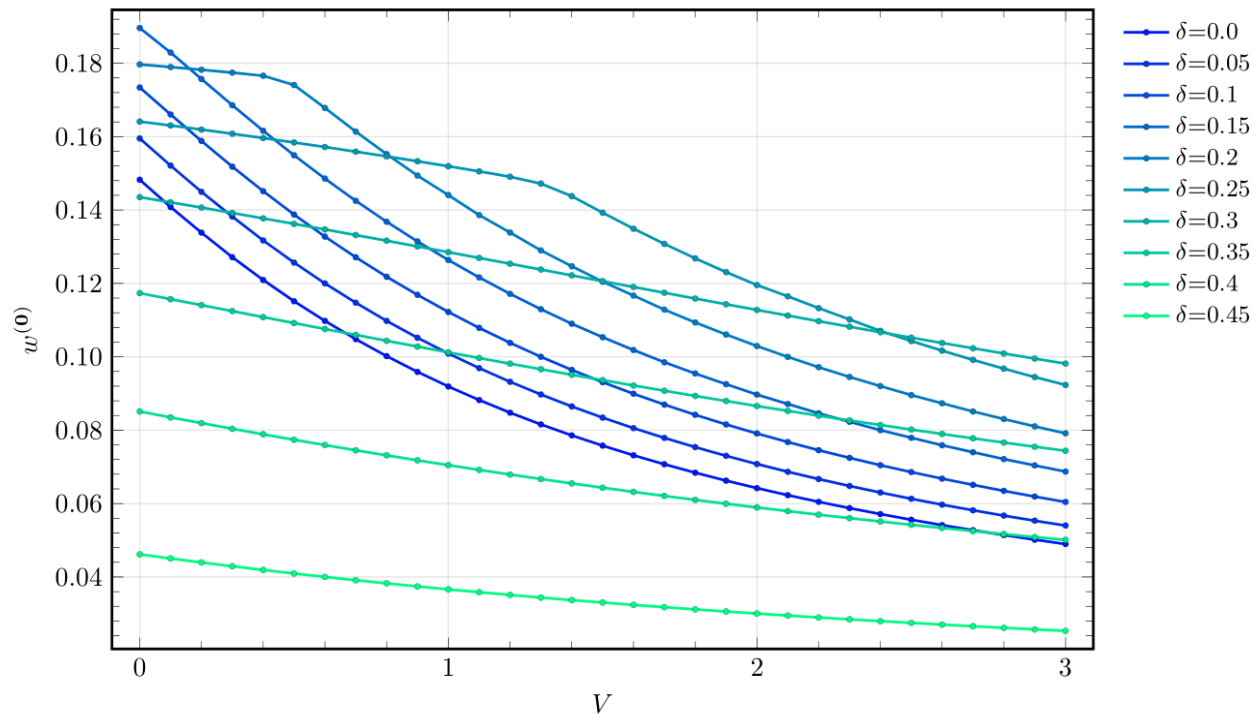
$$t - w^0 V$$

Quindi potrebbe portare a un annullamento dell'hopping effettivo e quindi a una localizzazione. Per il range di parametri esplorati, tutte le curve in funzione di V soddisfano la relazione

$$w^0 < t/V$$

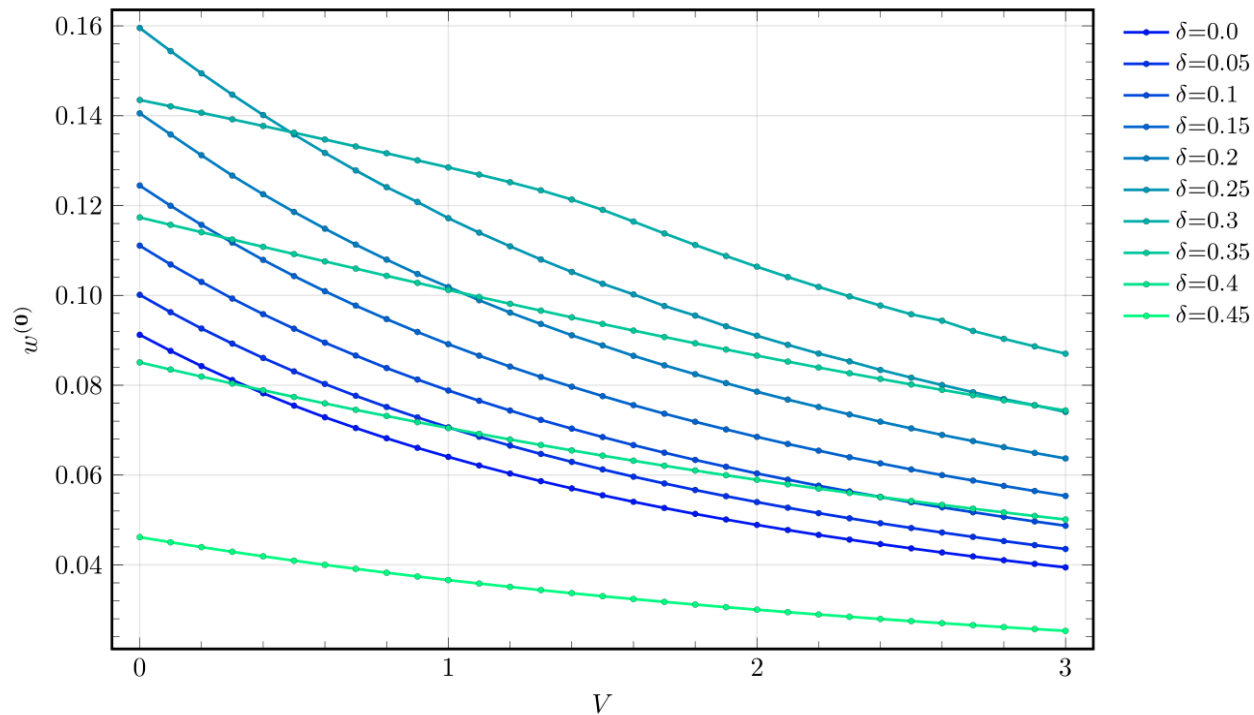
per cui non si ha annullamento dell'hopping. Intorno al doping 0.2 si ha un cambio di dipendenza funzionale da V importante.

$w^{(0)}$ ($t = 1.0$, $U = 10.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)

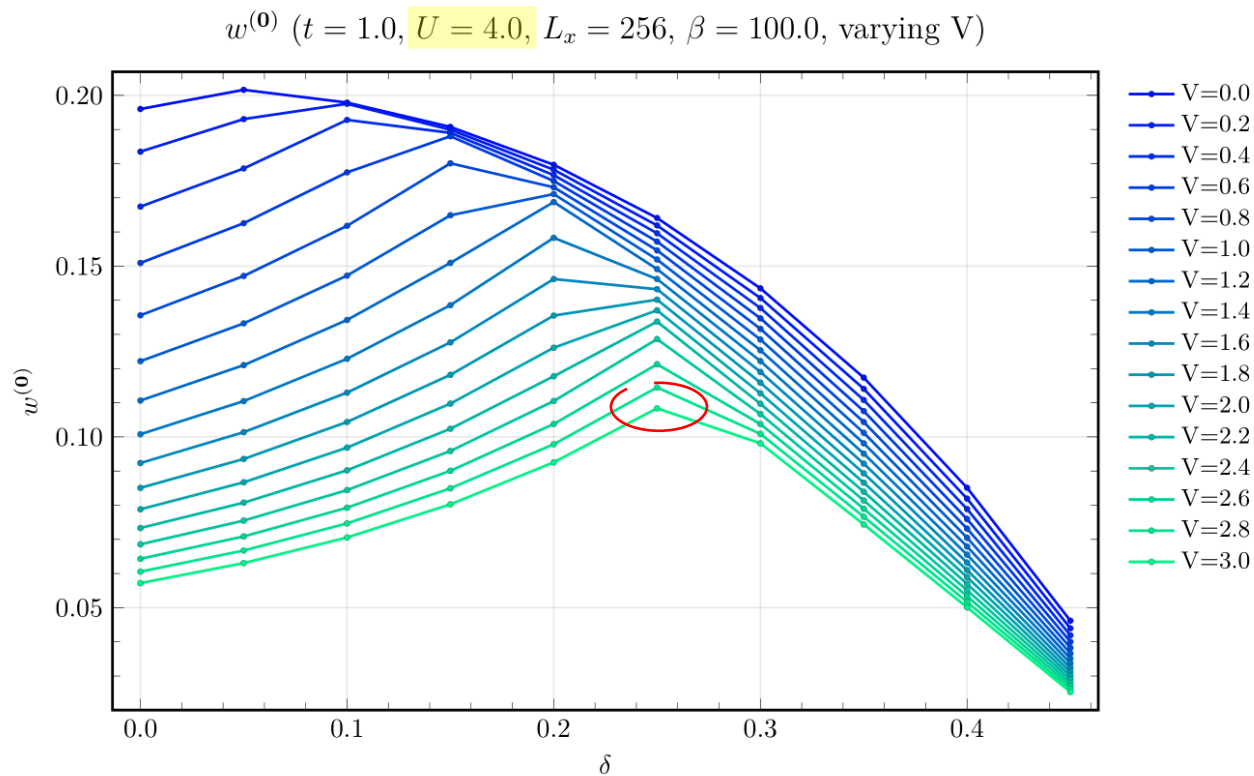


Aumentando il valore della repulsione locale si vedono ancora più chiaramente le due dipendenze funzionali in base al doping, e le gobbe iniziano a sparire.

$w^{(0)}$ ($t = 1.0$, $U = 20.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)



Aumentando il valore della repulsione locale si vedono ancora più chiaramente le due dipendenze funzionali in base al doping, e le gobbe iniziano a sparire.

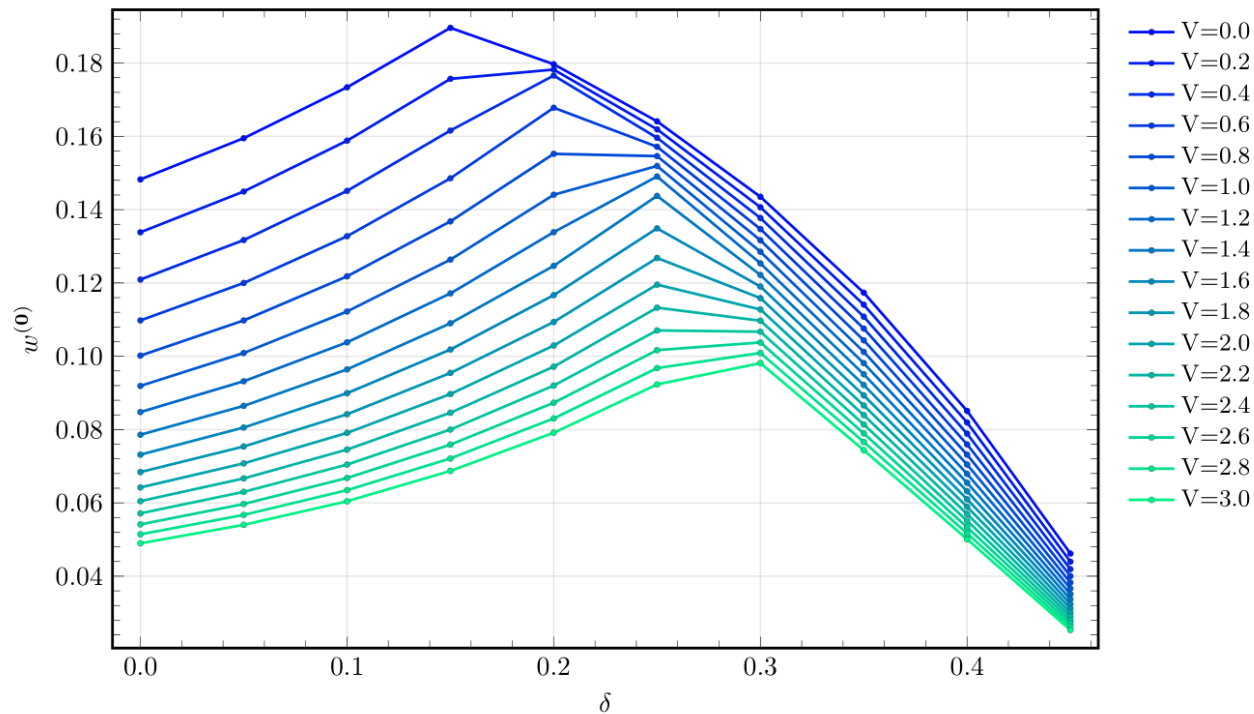


Guardando in funzione del doping, al crescere di V si vede chiaramente che si forma un massimo la cui posizione si sposta in funzione di V . Per $V=3.0$, a doping circa 0.25 si ha una soppressione dell'hopping del 30%.

Inoltre le curve per V grande stanno sotto quelle per V piccole: forse aumentando ancora V si raggiunge soppressione del 100%?

(Non tutte le V sono plottate)

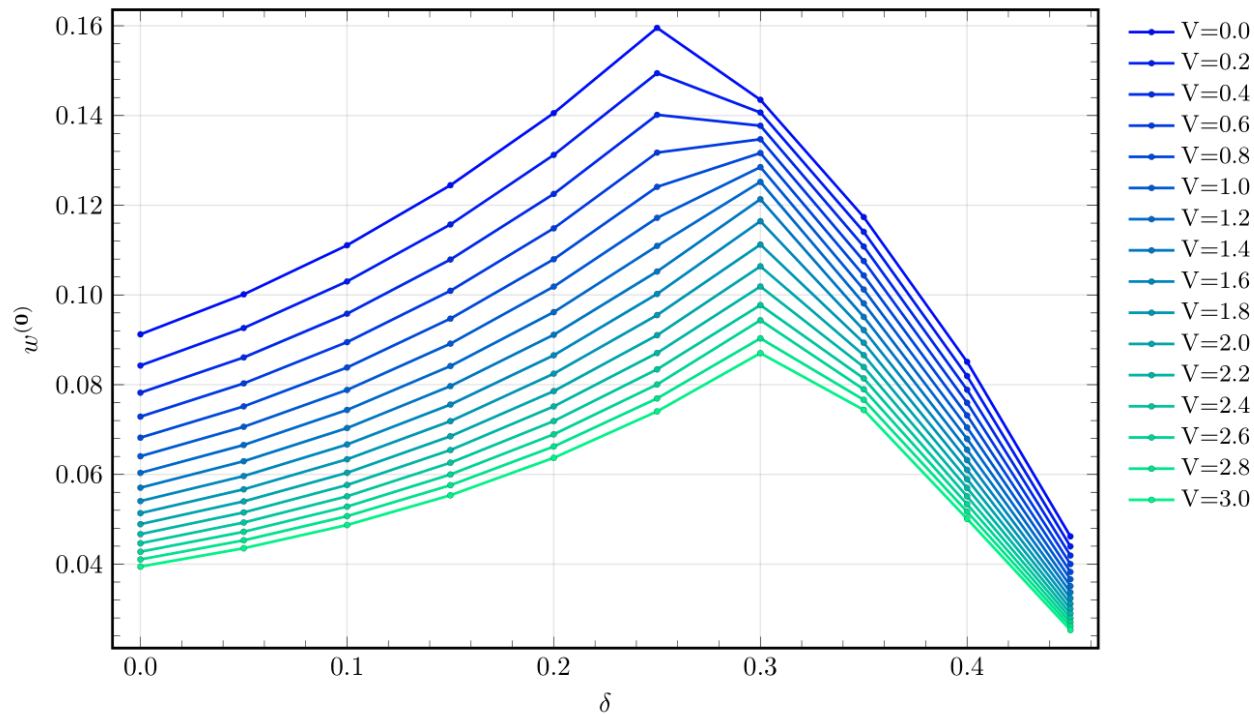
$w^{(0)}$ ($t = 1.0$, $U = 10.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying V)



Al crescere della repulsione locale U la posizione del massimo si sposta.

(Non tutte le V sono plottate)

$w^{(0)}$ ($t = 1.0$, $U = 20.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying V)

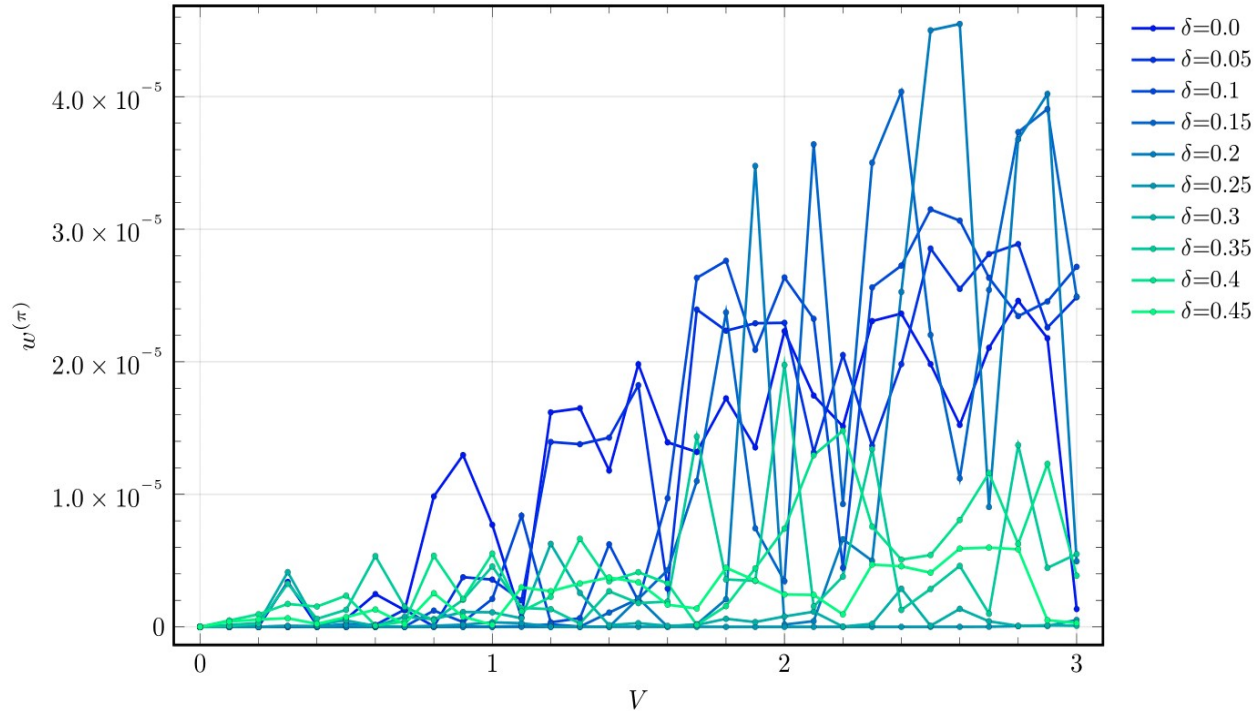


Al crescere della repulsione locale U la posizione del massimo si sposta.

(Non tutte le V sono plottate)

Parametro: W^{π}

$w^{(\pi)}$ ($t = 1.0$, $U = 4.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)

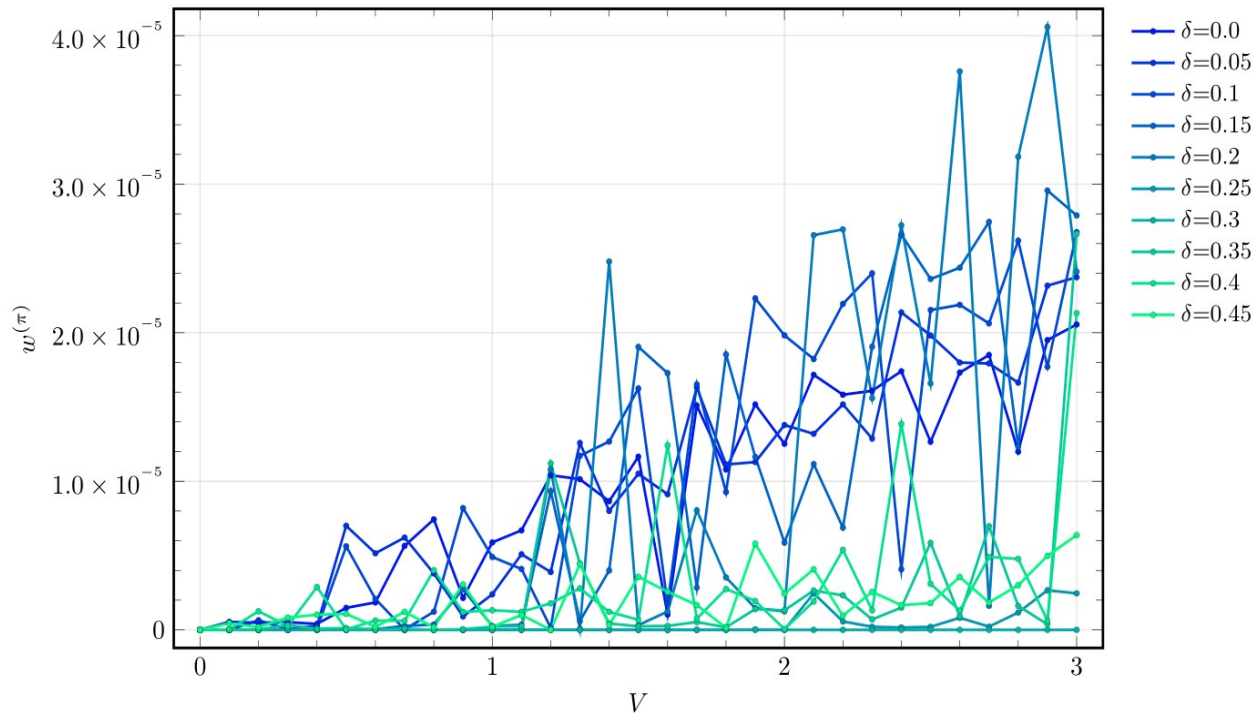


Il parametro controlla la rinormalizzazione della parte immaginaria del gap

$$\Im\{\Delta_k\} = 2w^\pi V (\cos k_x + \cos k_y)$$

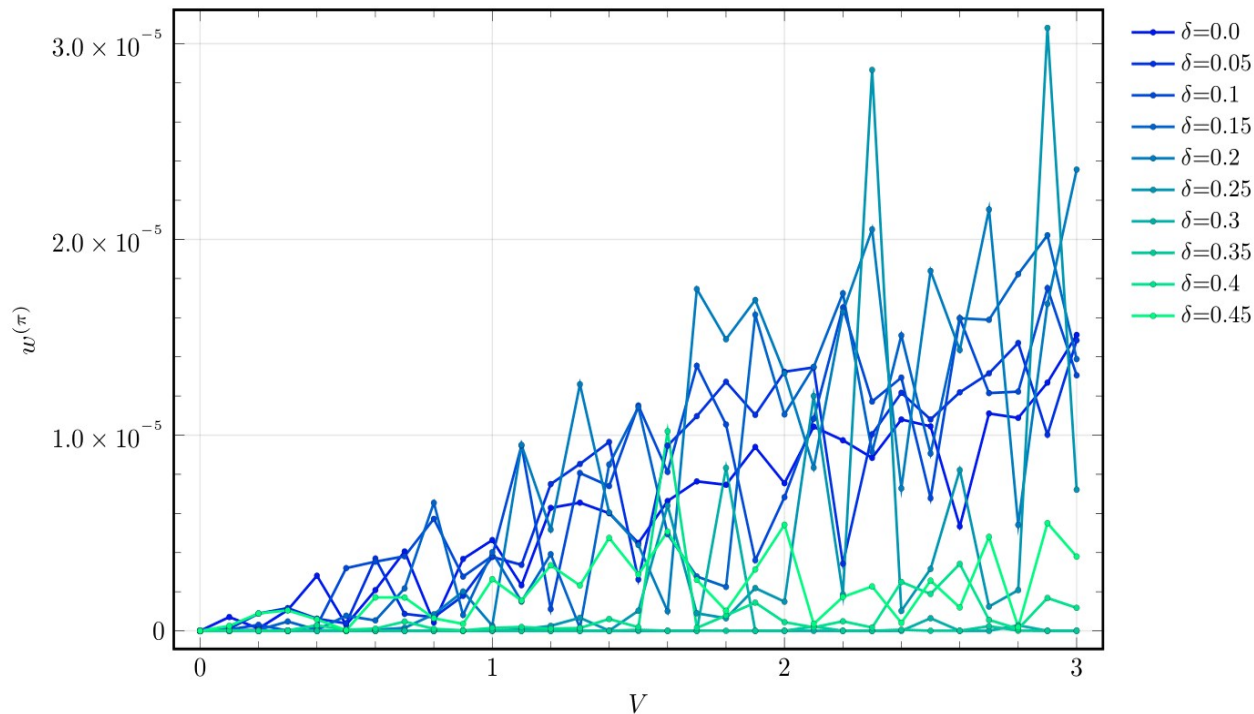
Dalle simulazioni si vede che il parametro fluttua su scale molto piccole, quindi probabilmente questi grafici non sono molto affidabili. Si vede comunque che l'ampiezza delle oscillazioni cresce con V e decresce con il doping, ma comunque quasi non influisce sul gap che è $O(1)$.

$w^{(\pi)}$ ($t = 1.0$, $U = 10.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)



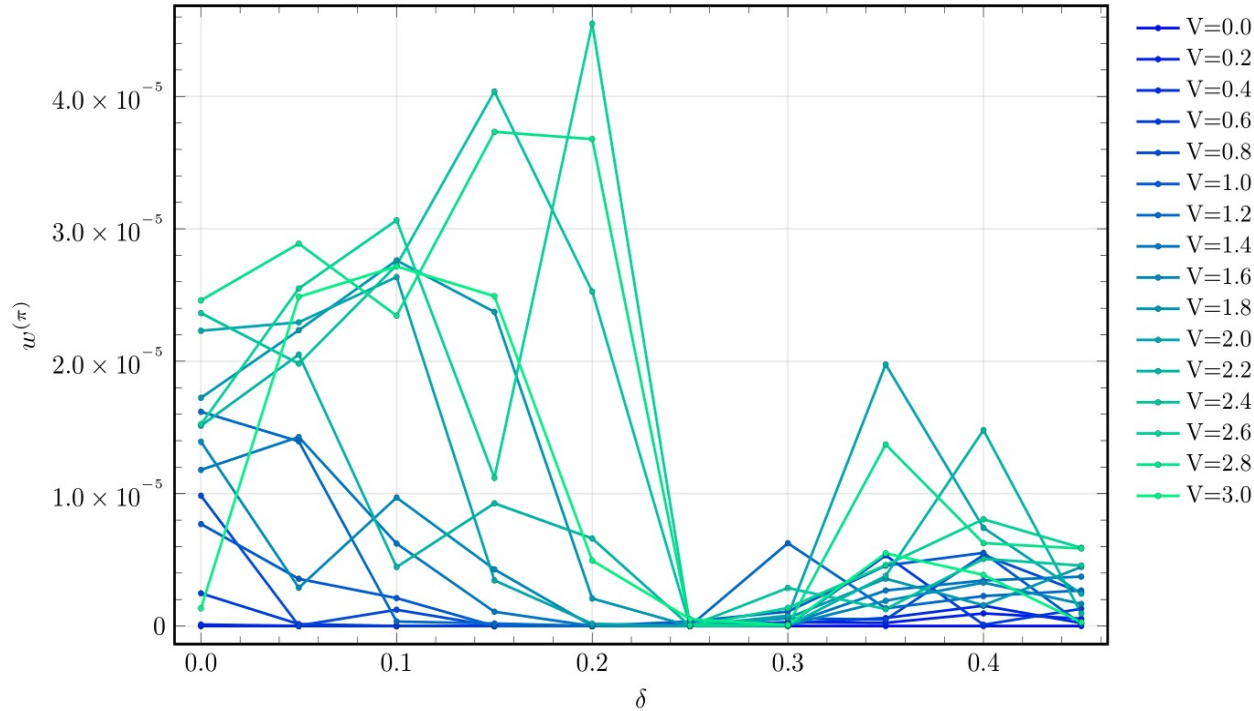
Aumentando il valore della repulsione locale l'ampiezza delle oscillazioni sembra diminuire. Inoltre sembra che per doping inferiore a 0.2-0.25 il parametro cresca linearmente con V , mentre per doping superiori sia soppresso.

$w^{(\pi)}$ ($t = 1.0$, $U = 20.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying δ)



Aumentando il valore della repulsione locale l'ampiezza delle oscillazioni sembra diminuire. Inoltre sembra che per doping inferiore a 0.2-0.25 il parametro cresca linearmente con V , mentre per doping superiori sia soppresso.

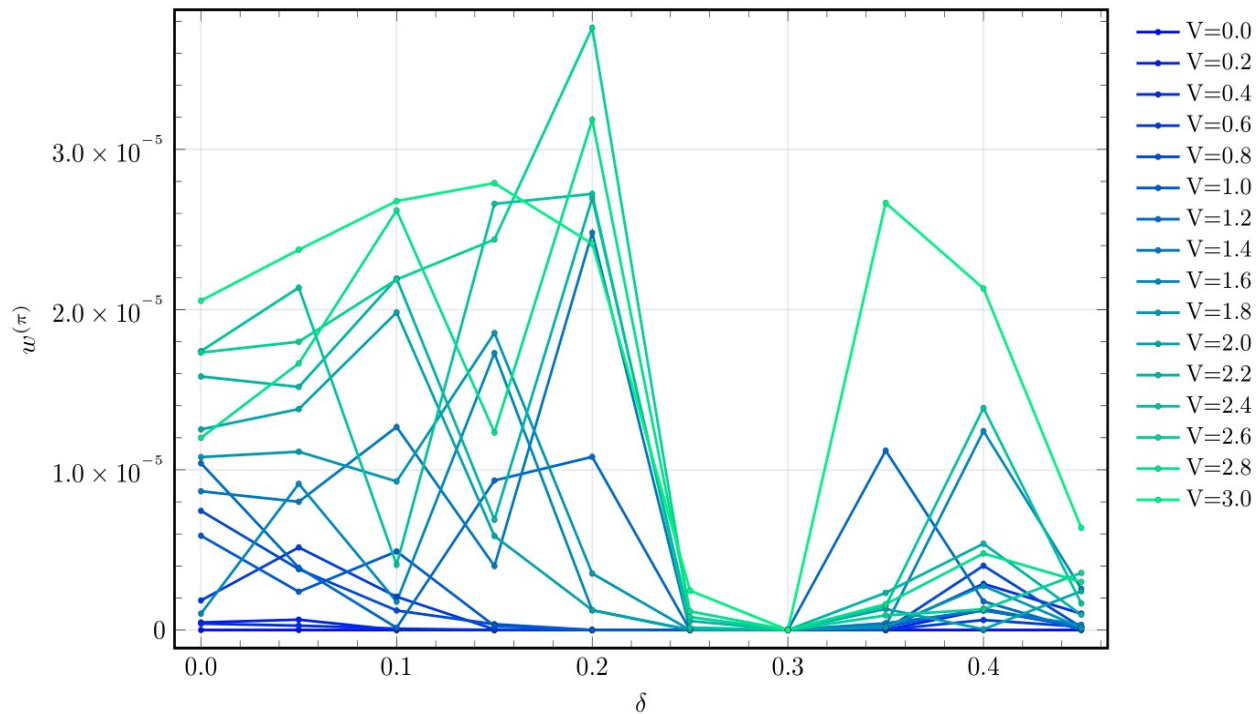
$w^{(\pi)} (t = 1.0, U = 4.0, L_x = 256, \beta = 100.0, \text{varying } V)$



Guardando in funzione del doping, si vedono ancora oscillazioni con una sorta di “nodo” per doping nella zona 0.25-0.3.

(Non tutte le V sono plottate)

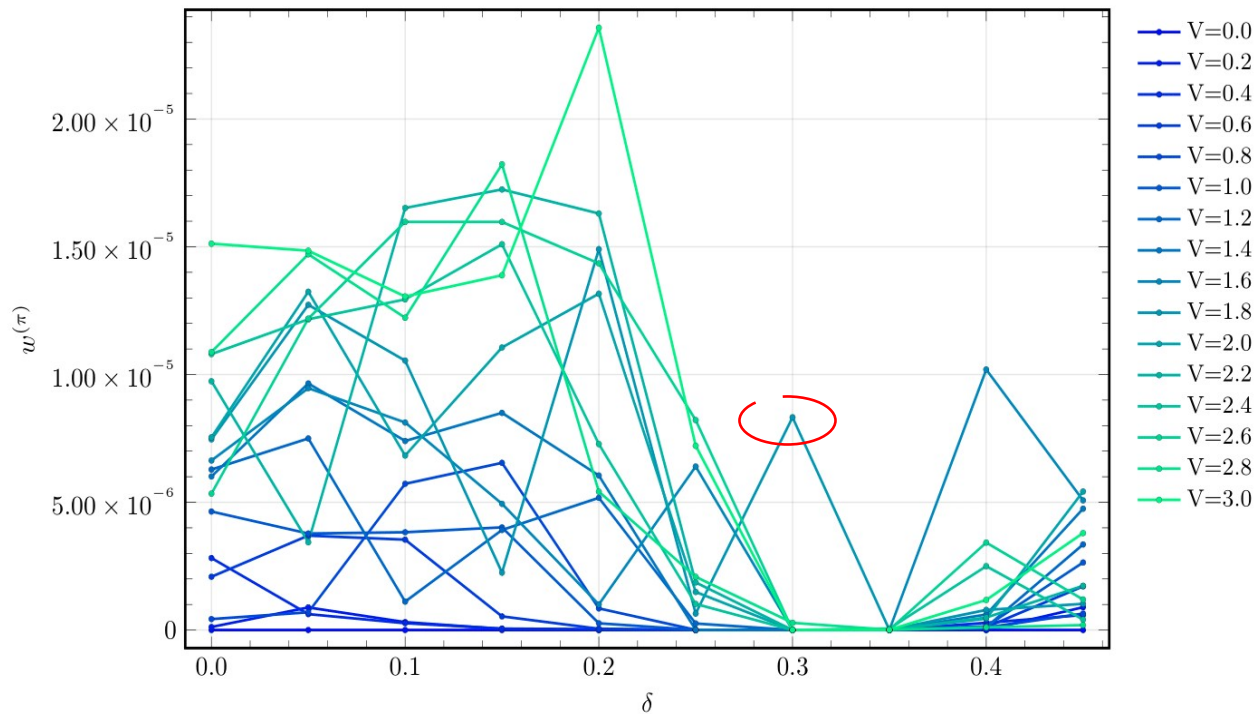
$w^{(\pi)}$ ($t = 1.0$, $U = 10.0$, $L_x = 256$, $\beta = 100.0$, varying V)



Al crescere della repulsione locale U il “buco” si vede più chiaramente...

(Non tutte le V sono plottate)

$w^{(\pi)} (t = 1.0, U = 20.0, L_x = 256, \beta = 100.0, \text{varying } V)$



... ma aumentando ancora si vede che si sposta a doping $0.3-0.35$ (e c'è un'oscillazione a basso V che potrebbe essere un artefatto numerico).

(Non tutte le V sono plottate)

Cose che vorrei vedere meglio:

- evidentemente c'è un doping critico per il quale, fissati i vari parametri, succede “qualcosa”. Il massimo di w^0 (vedi slide 22 e seguenti) avviene vicino a dove c'è una singolarità nella derivata di m (vedi slide 15 e seguenti).
- non mi è chiaro se in qualche configurazione si riesce ad annullare l'hopping tramite la rinormalizzazione. Forse aumentando molto V ?
- il comportamento di w^π è strano, sia in termini di ordini di grandezza che di andamento in funzione di V (vedi slide 26 e seguenti)