

## **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

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

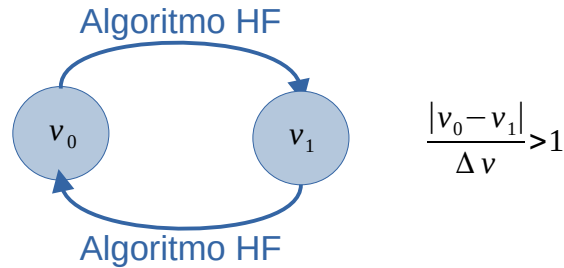
$$w^{(0)} = -\frac{1}{4L_x L_y} \sum_{\mathbf{k} \in \text{MBZ}} (\cos k_x + \cos k_y) \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \left[ f(-\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) - f(\tilde{E}_{\mathbf{k}}; \beta, \tilde{\mu}) \right]$$

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

# **Report intermedio (2)**

Problemi computazionali

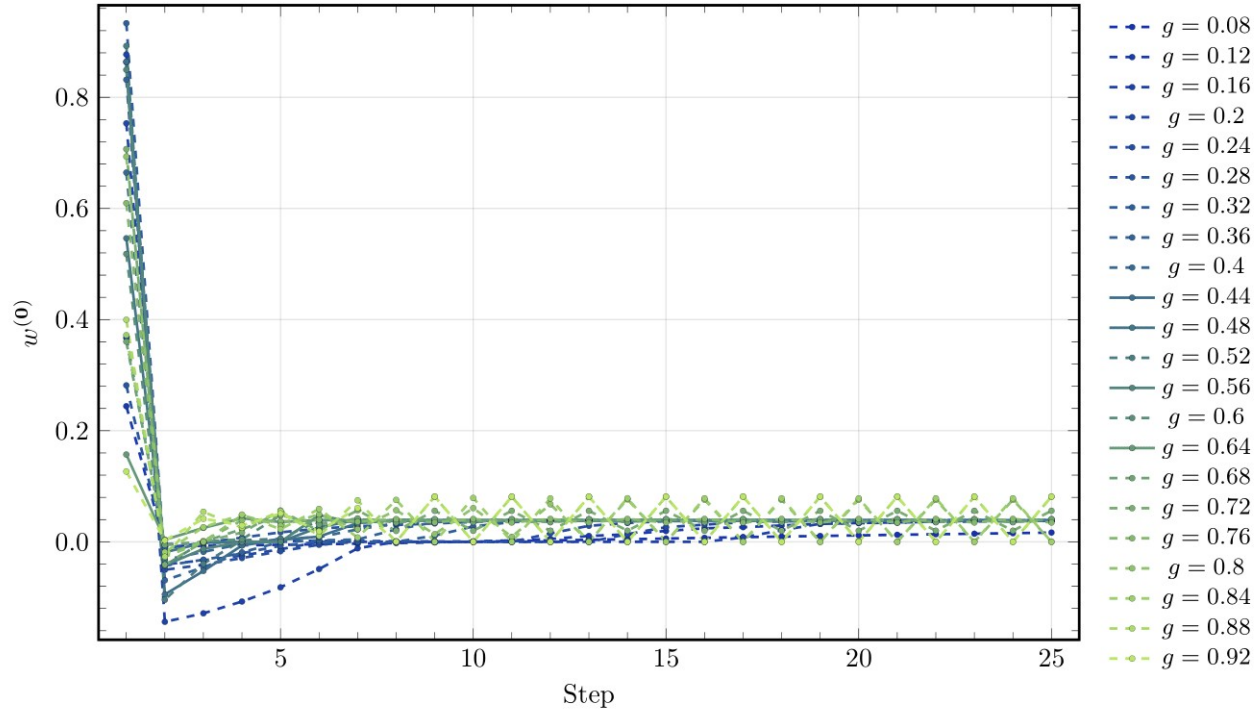
**Contesto:** scelta dei parametri algoritmici: p (numero massimo di iterazioni), g (mixing parameter),  $\Delta v$  (tolleranze sui parametri HF). Da varie simulazioni emergeva l'esistenza di set di soluzioni ai parametri HF metastabili e cicliche: accade che il parametro v oscilli ciclicamente tra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

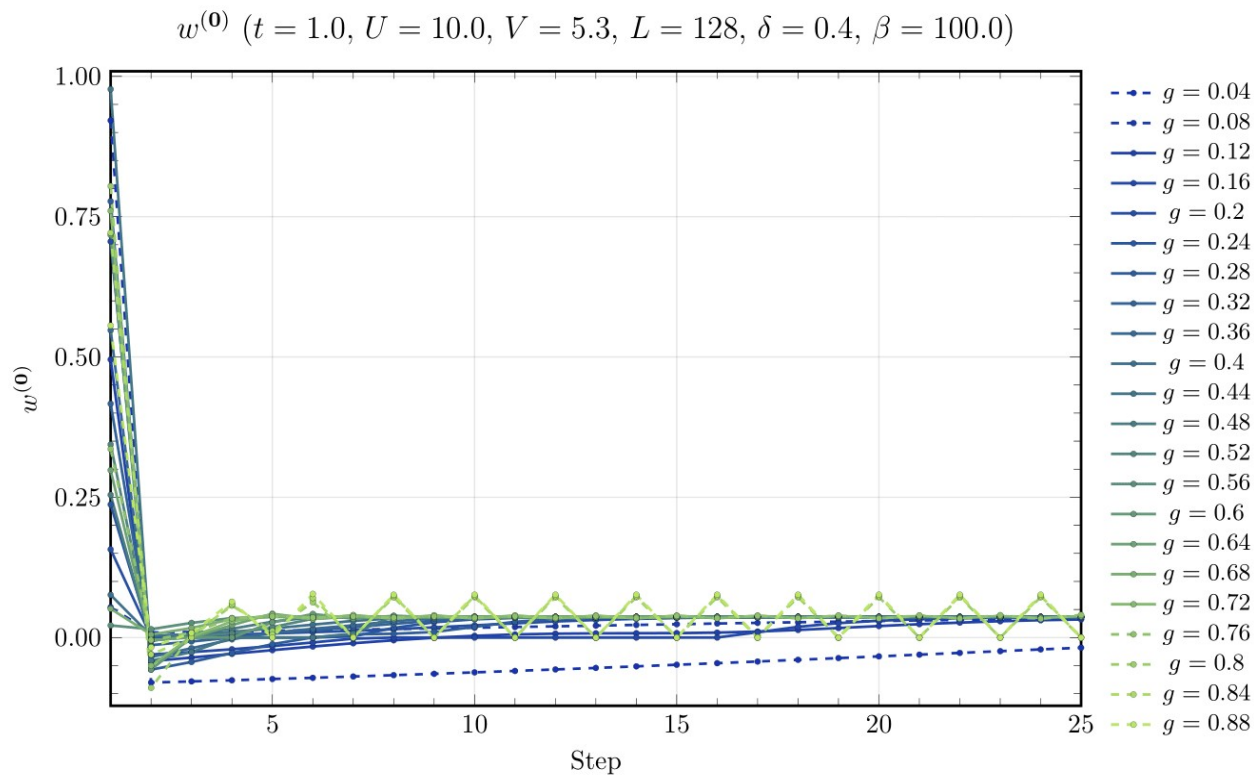
## Esempio 1

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



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.

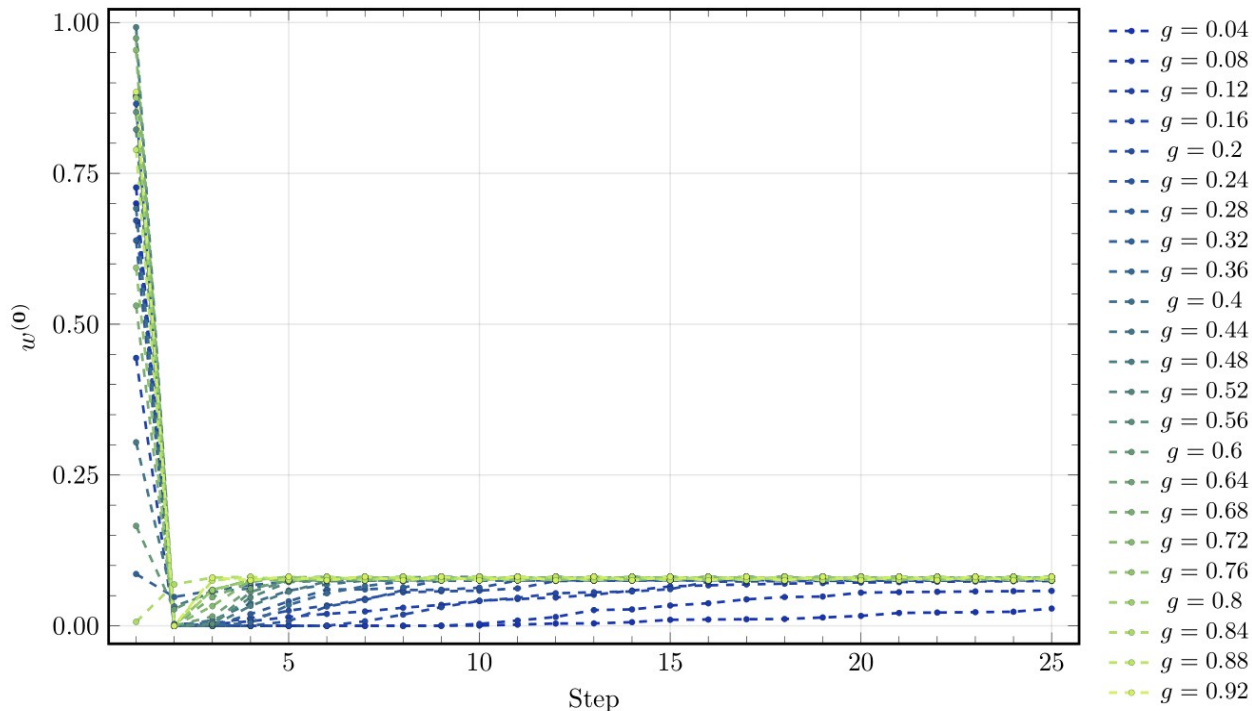
## Esempio 1



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

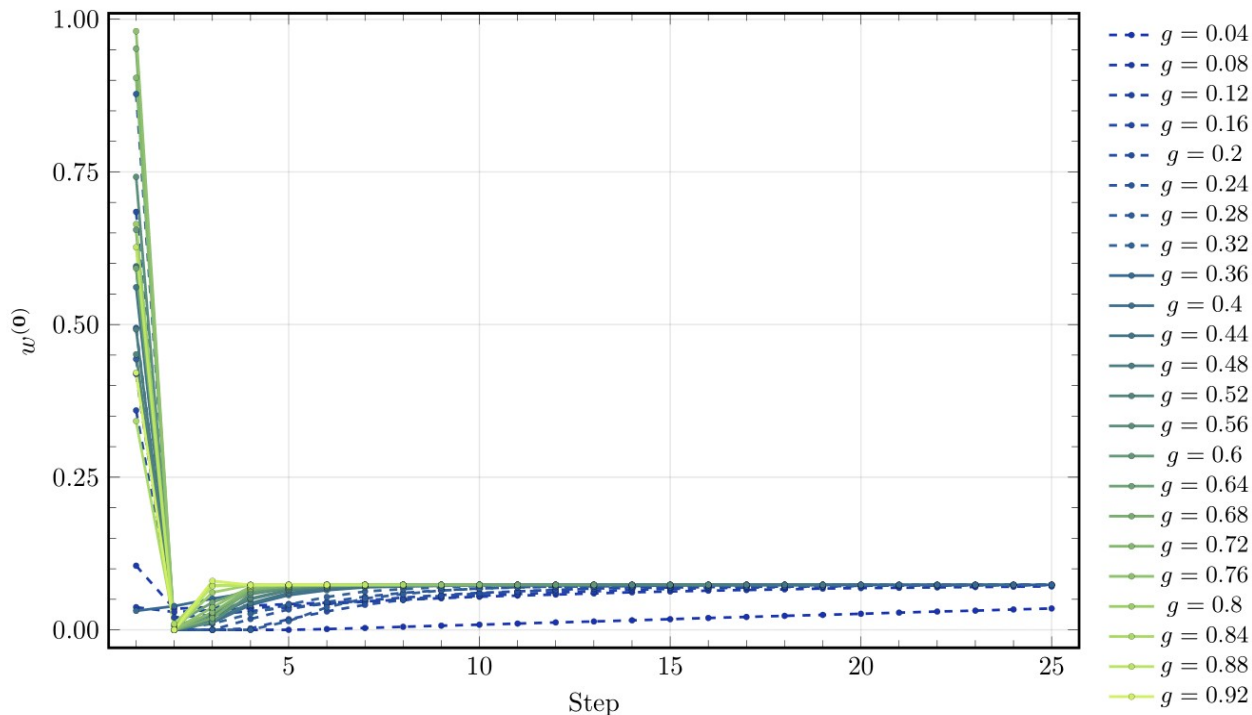
$$w^{(0)} (t = 1.0, U = 4.0, V = 0.8, L = 32, \delta = 0.4, \beta = Inf)$$



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

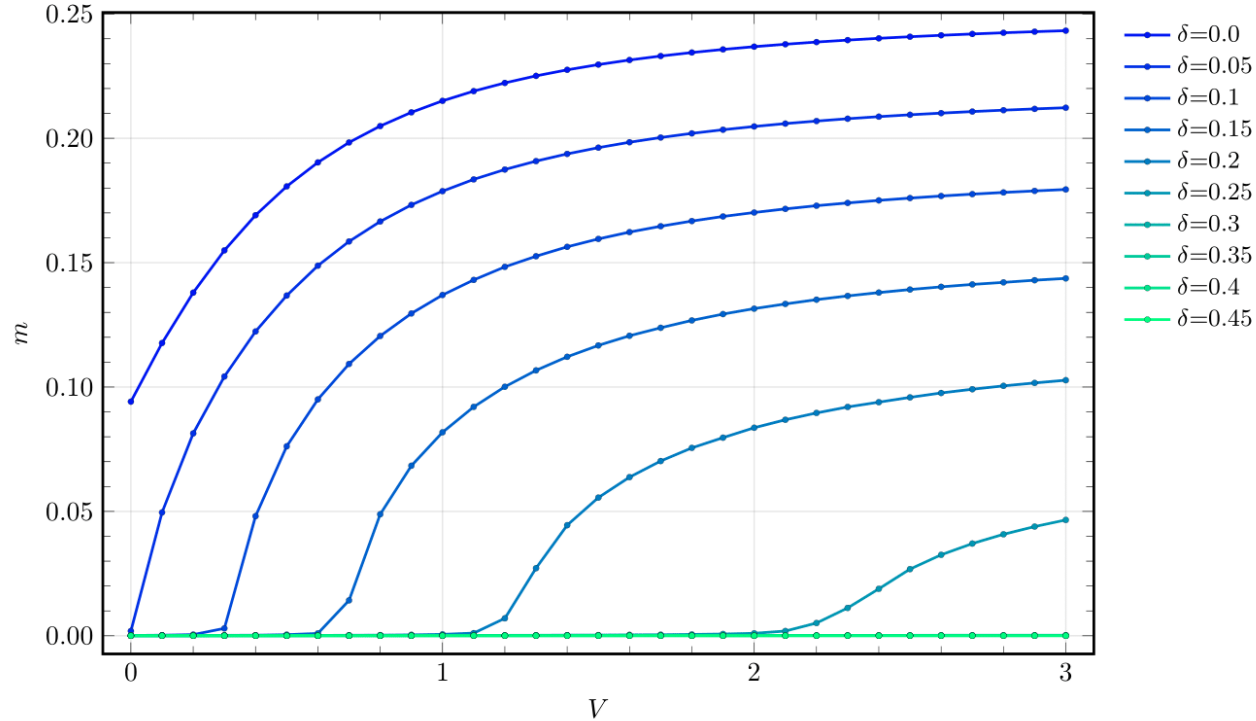
# Tolleranza su ogni parametro HF

# Tolleranza sulla stima della densità

# Parametro di mixing

**Parametro: m**

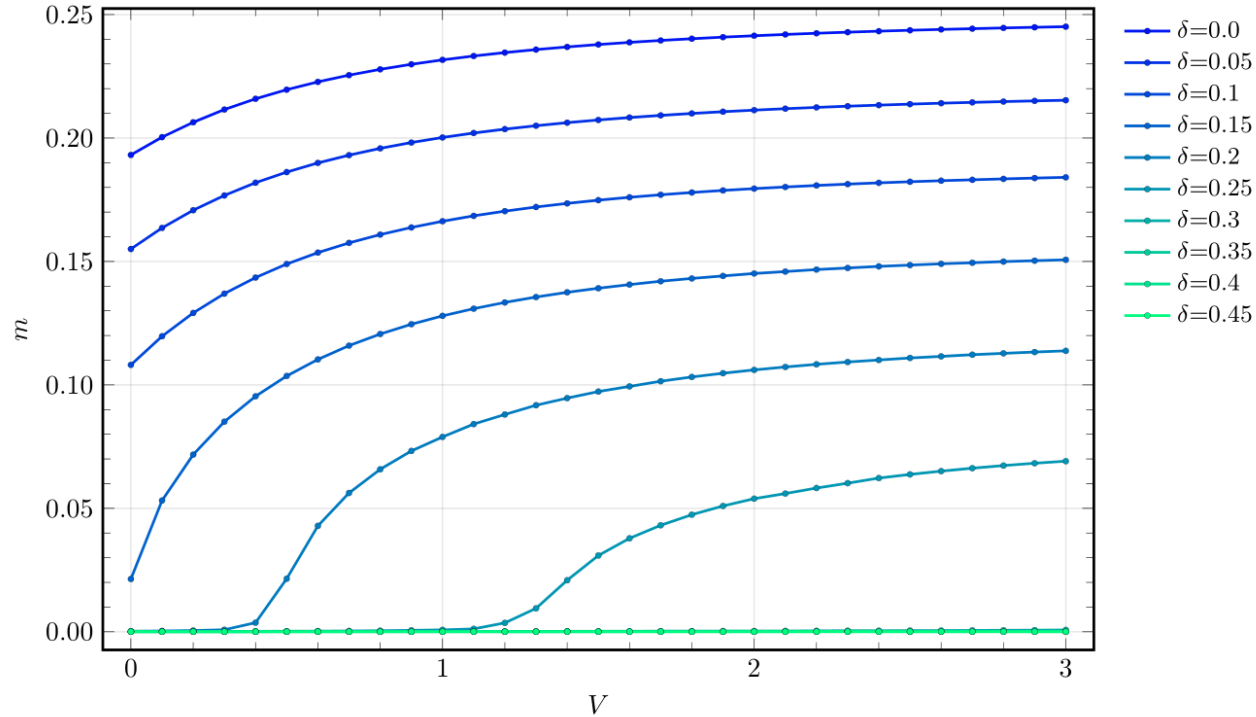
Magnetization ( $t = 1.0$ ,  $U = 4.0$ ,  $L_x = 256$ ,  $\beta = 100.0$ , varying  $\delta$ )



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,

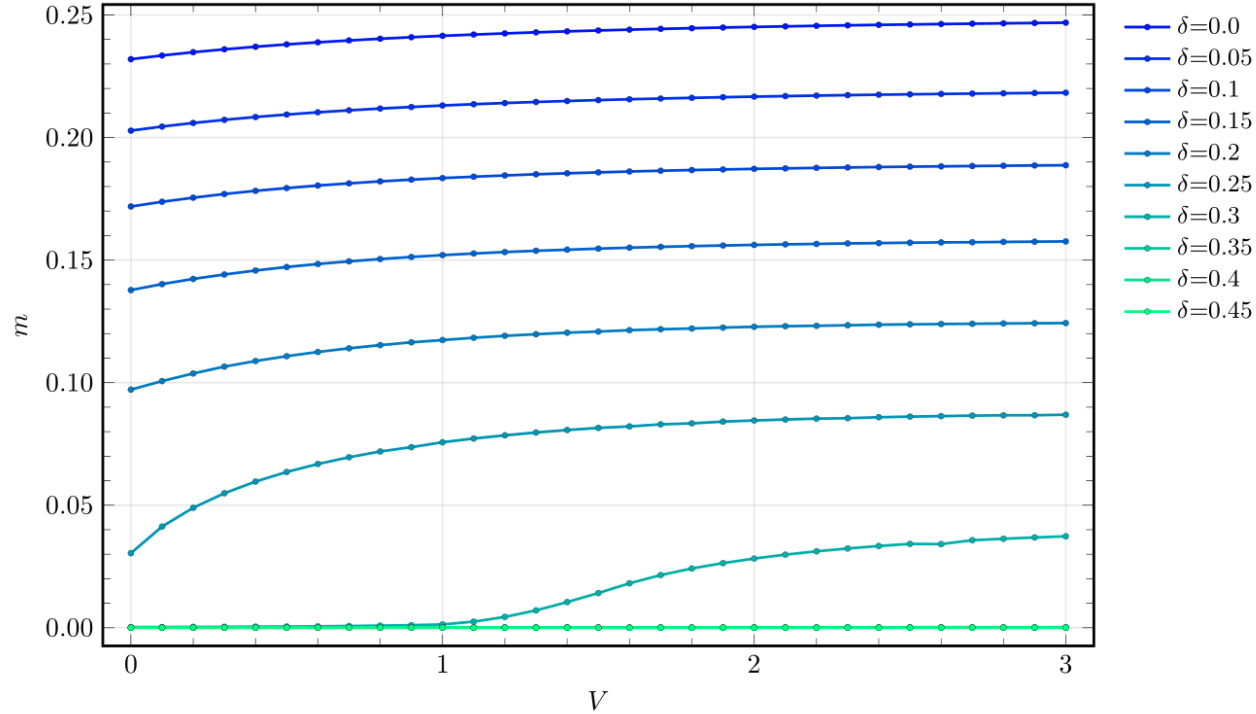
$$\Re \{ \Delta_k \} = m (U + 2zV)$$

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



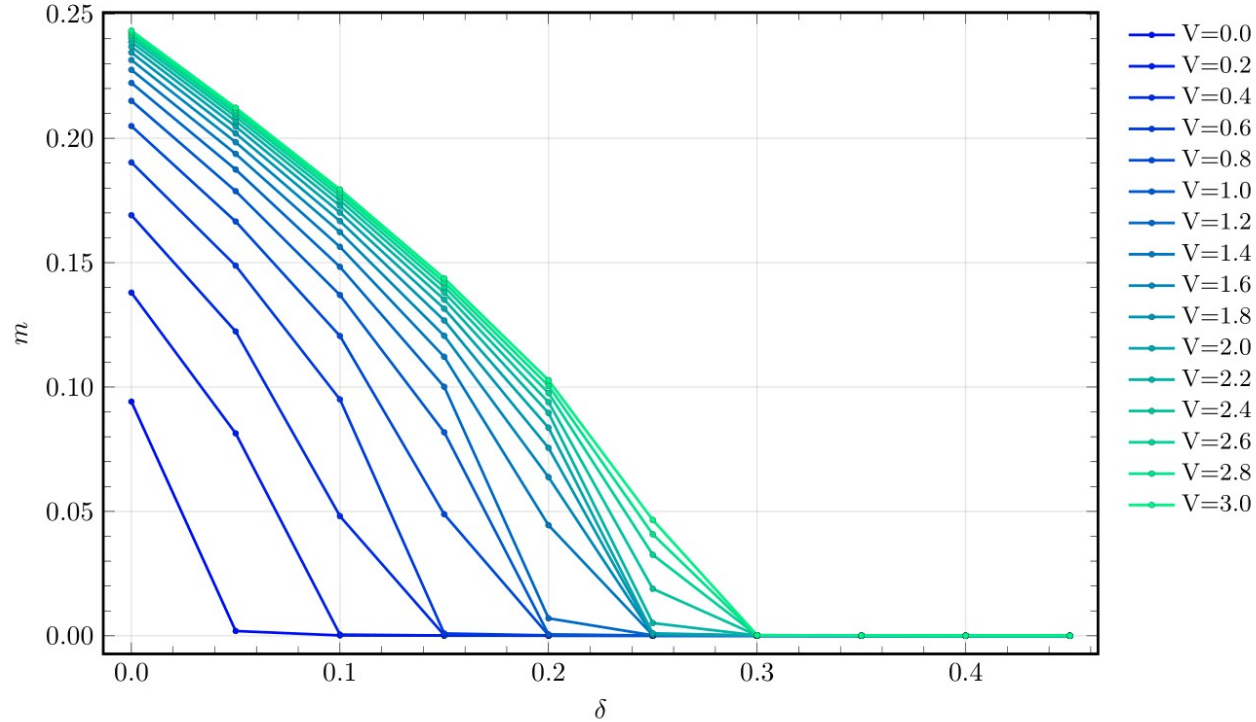
Aumentando il valore della repulsione locale si raggiunge rapidamente la saturazione. L'interazione non-locale agisce da “amplificatore” della magnetizzazione.

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



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

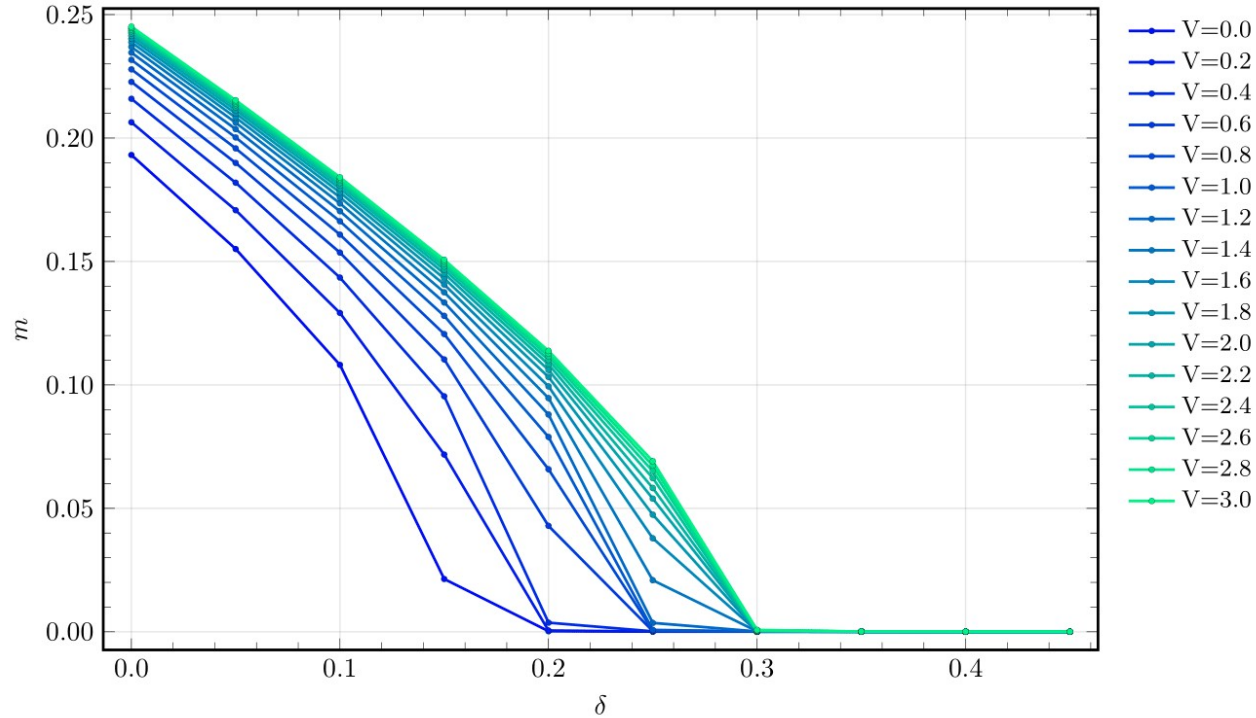
Magnetization ( $t = 1.0$ ,  $U = 4.0$ ,  $L_x = 256$ ,  $\beta = 100.0$ , varying  $V$ )



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  $V$ )

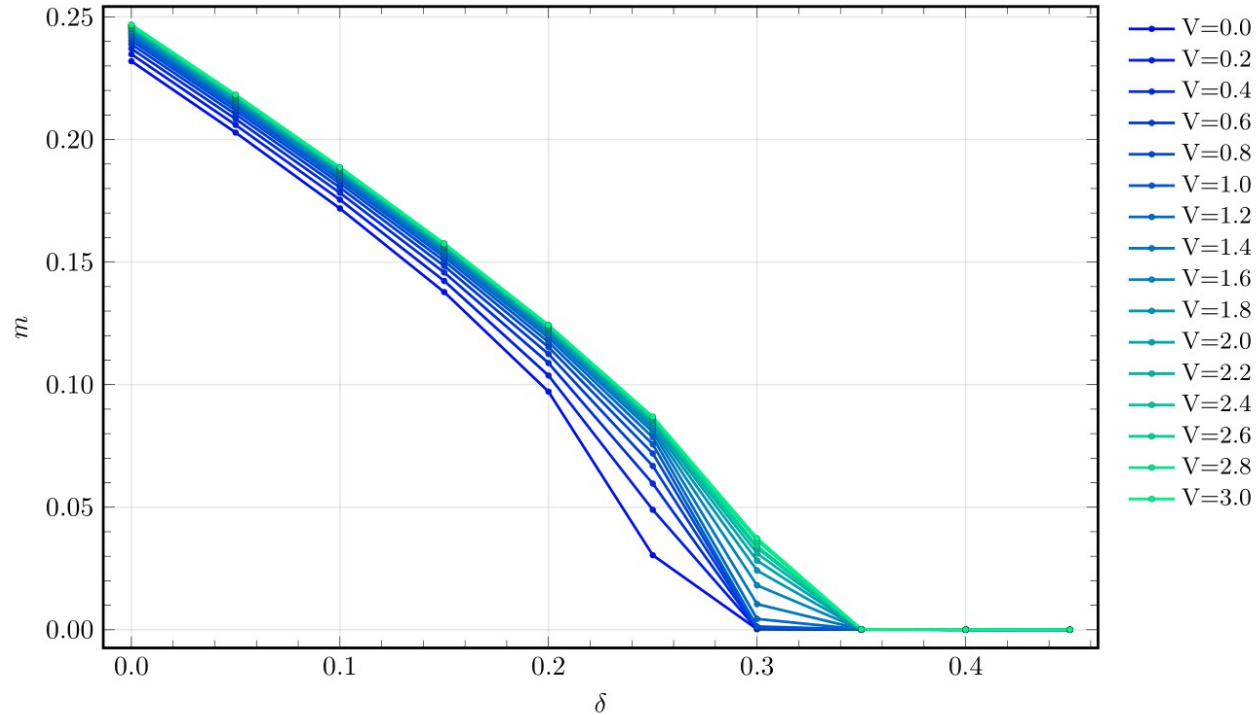


Guardando in funzione del doping, al crescere di  $V$  la magnetizzazione cresce per ogni doping “asintotizzando” alla curva più chiara.

(Non tutte le  $V$  sono plottate)



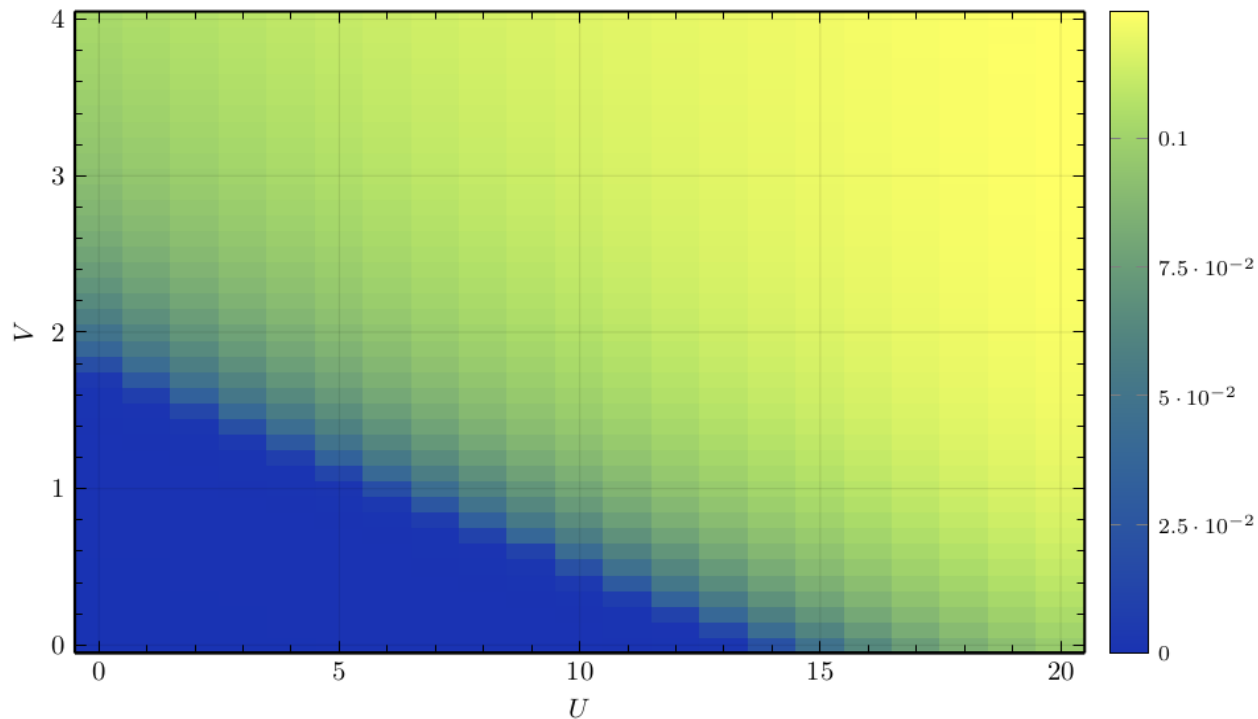
Magnetization ( $t = 1.0$ ,  $U = 20.0$ ,  $L_x = 256$ ,  $\beta = 100.0$ , varying  $V$ )



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.

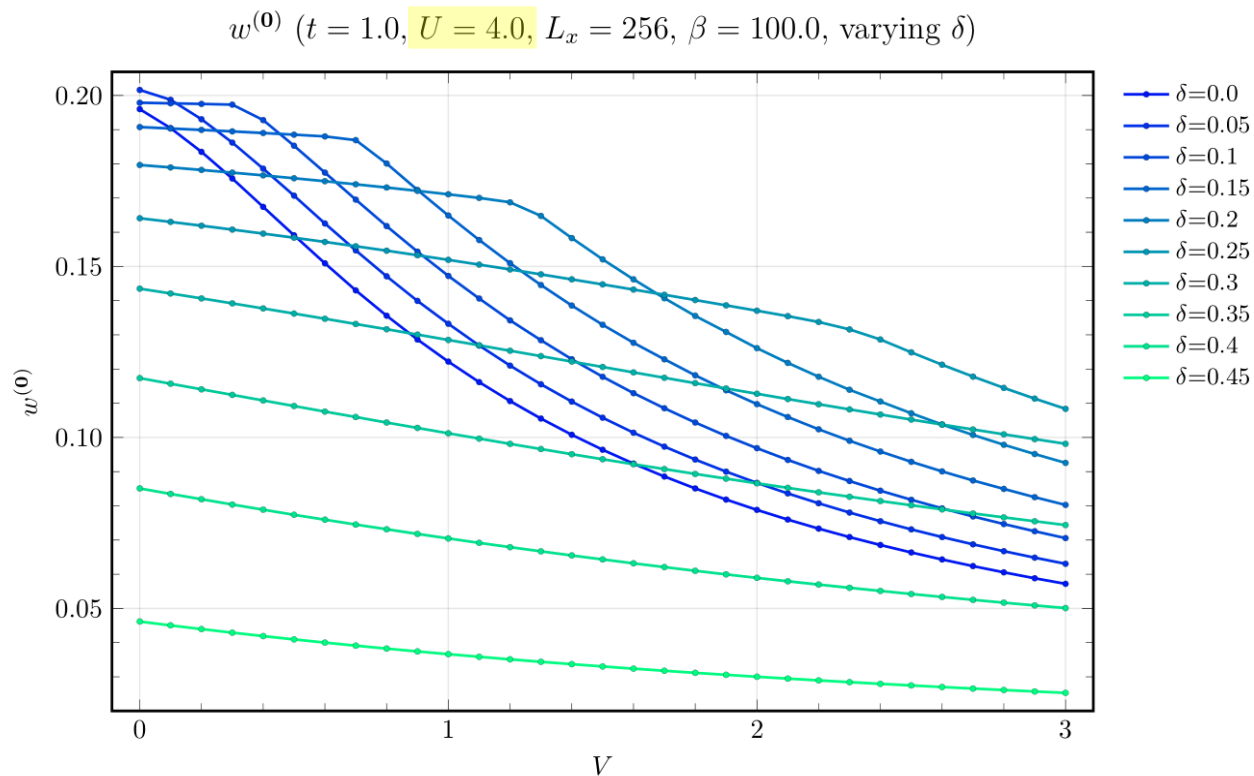
(Non tutte le  $V$  sono plottate)

Magnetization ( $t = 1.0$ ,  $L_x = 128$ ,  $\delta = 0.2$ ,  $\beta = 100.0$ )



Plottando la magnetizzazione come heatmap sul piano  $UV$  per un doping arbitrario (qui scelto 0.2) si vede in basso a sinistra la zona sub-critica dove non si ha magnetizzazione. Correttamente la pendenza della zona di separazione è  $-1/8$ .

**Parametro:**  $w^0$



Il parametro controlla la rinormalizzazione dell'hopping,

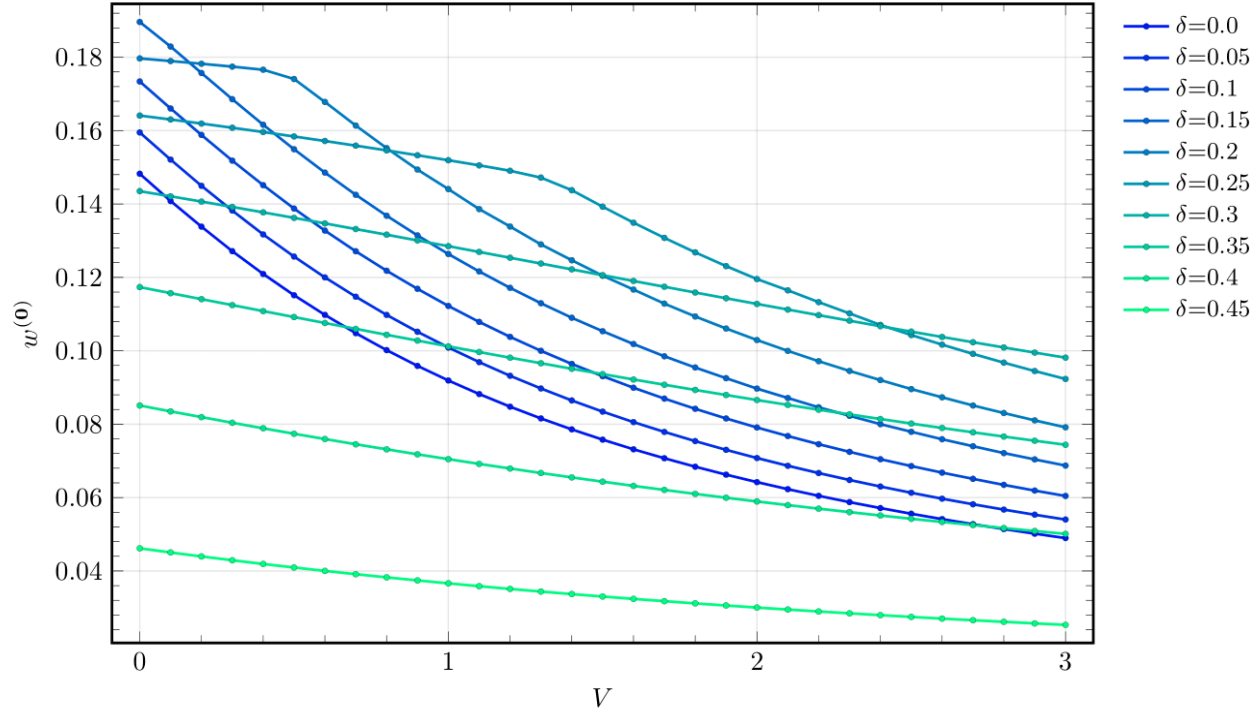
$$t - w^0 V$$

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

$$w^0 < t/V$$

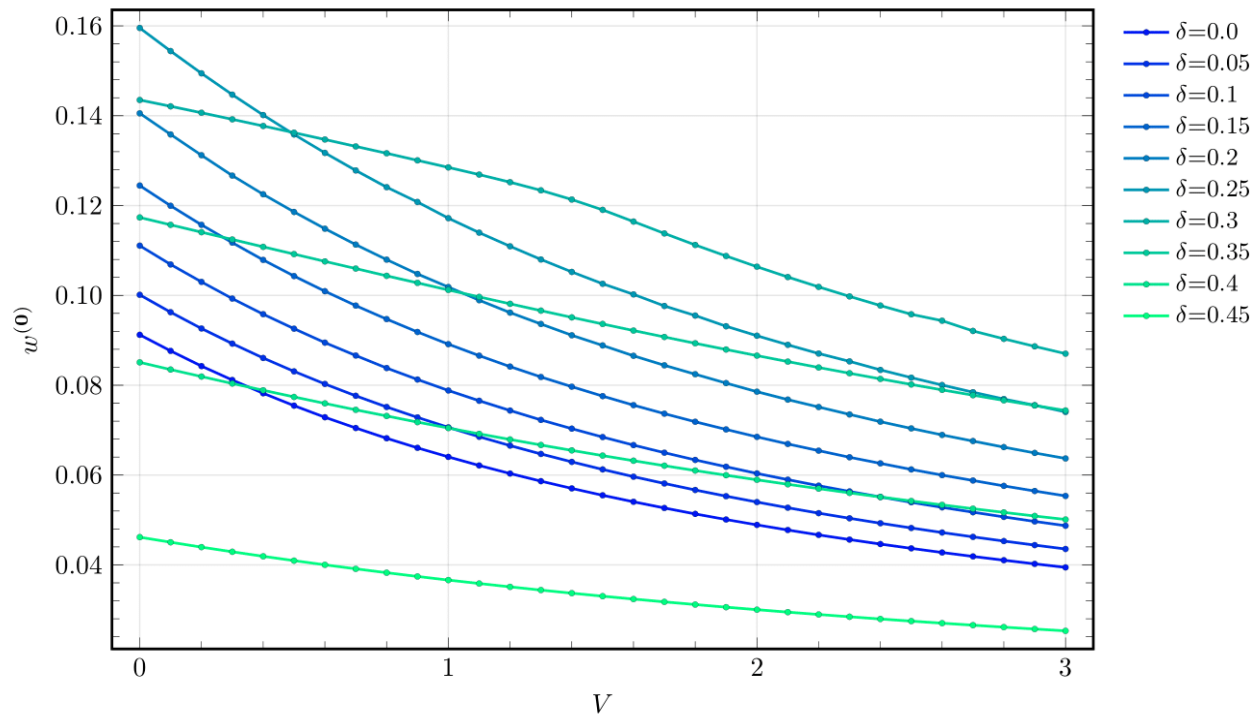
per cui non si ha annullamento dell'hopping. Intorno al doping 0.2 si ha un cambio di dipendenza funzionale da  $V$  importante.

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

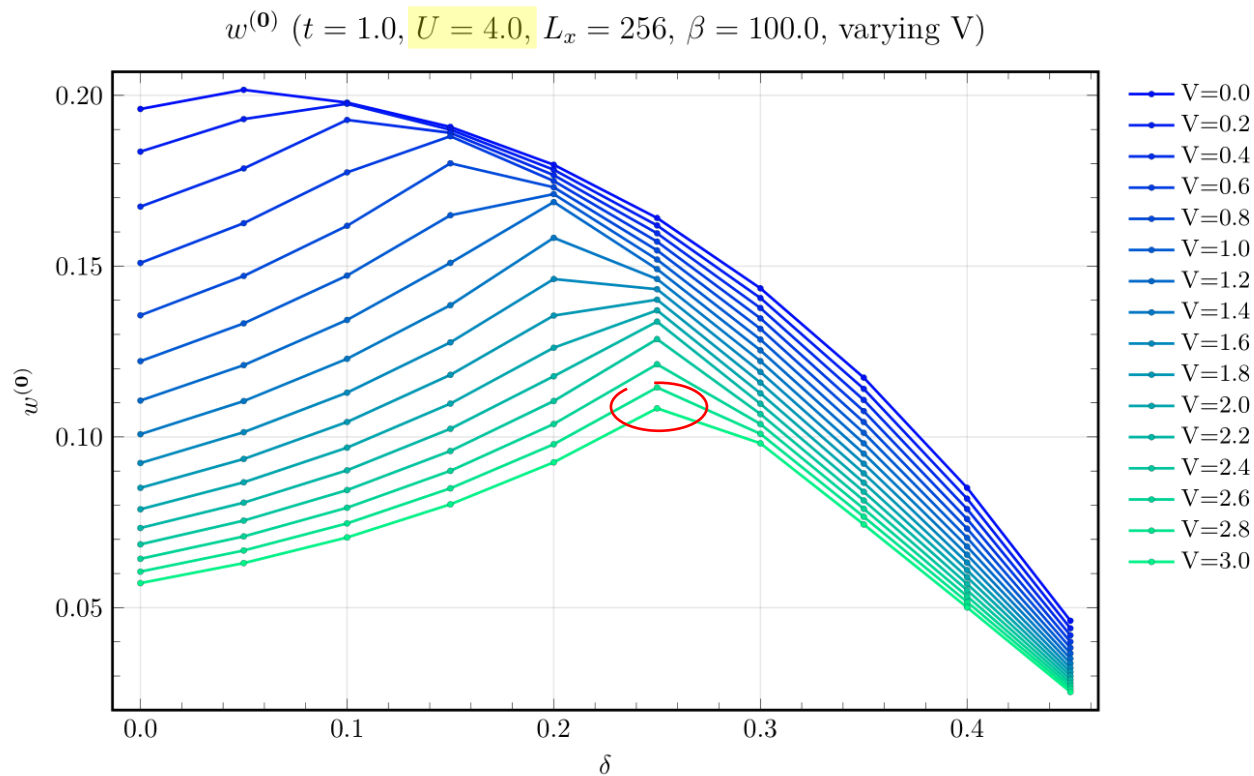


Aumentando il valore della repulsione locale si vedono ancora più chiaramente le due dipendenze funzionali in base al doping, e le gobbe iniziano a sparire.

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



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.

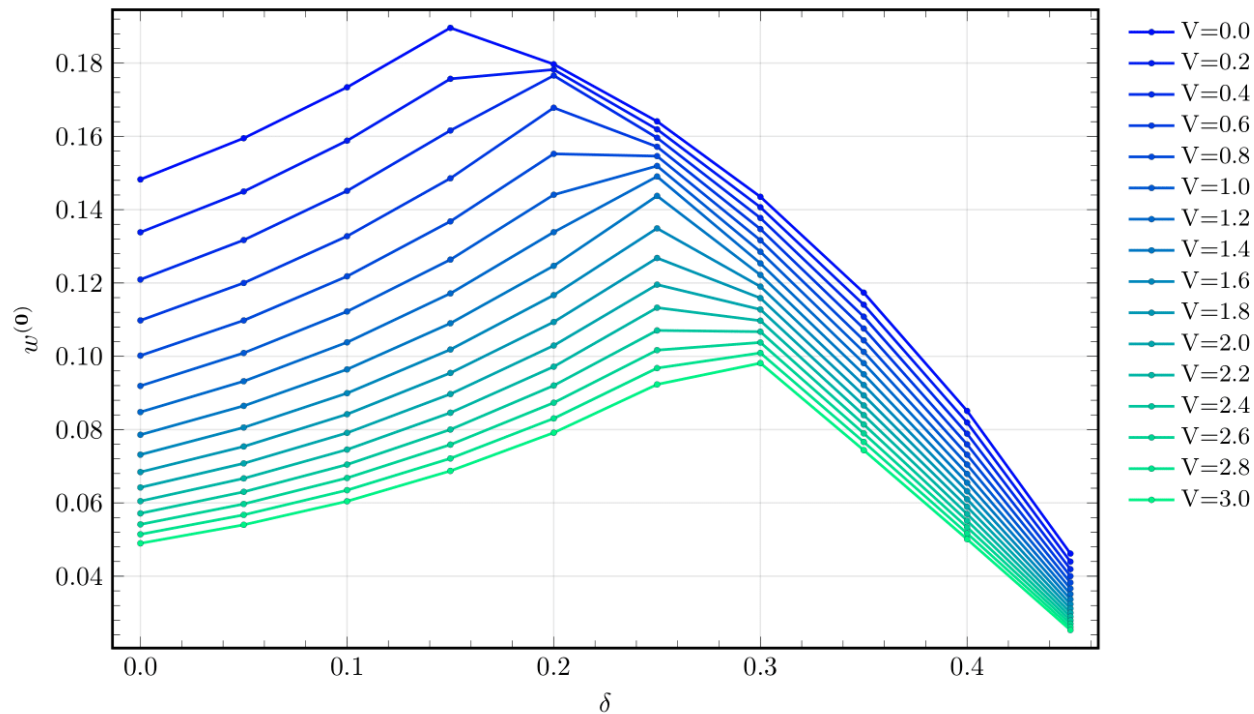


Guardando in funzione del doping, al crescere di  $V$  si vede chiaramente che si forma un massimo la cui posizione si sposta in funzione di  $V$ . Per  $V=3.0$ , a doping circa 0.25 si ha una soppressione dell'hopping del 30%.

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  $V$ )

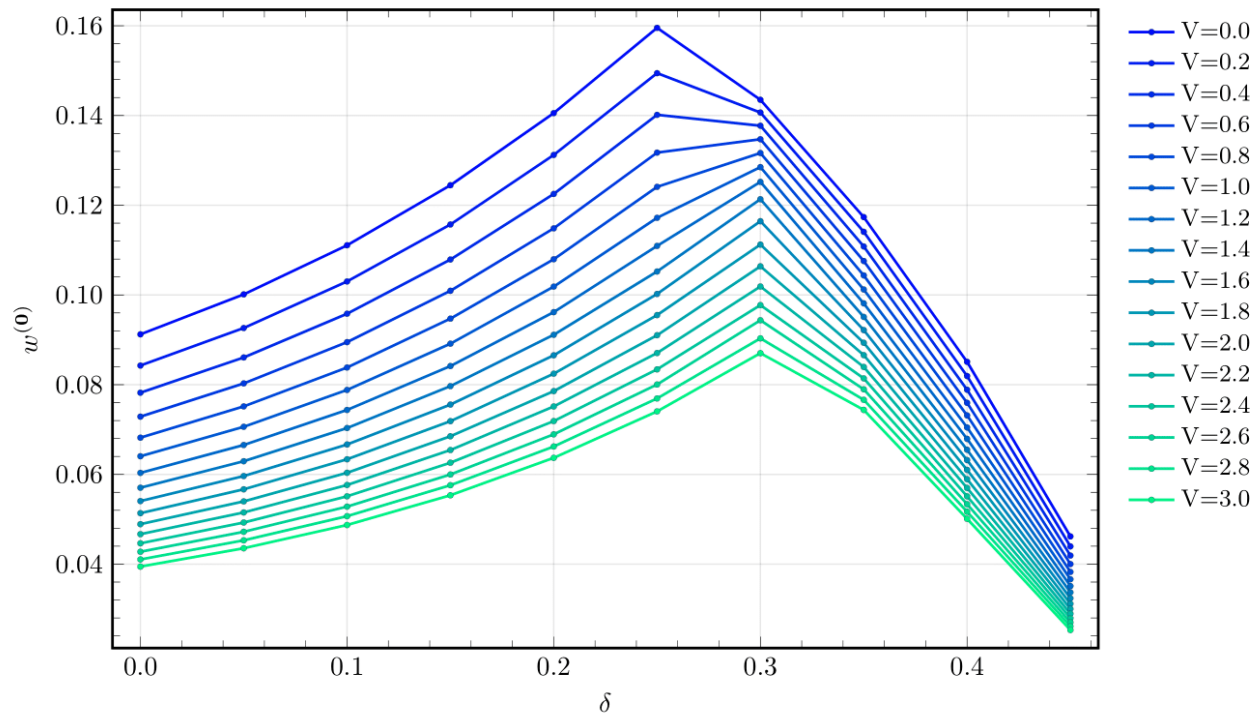


Al crescere della repulsione locale  $U$  la posizione del massimo si sposta.

(Non tutte le  $V$  sono plottate)



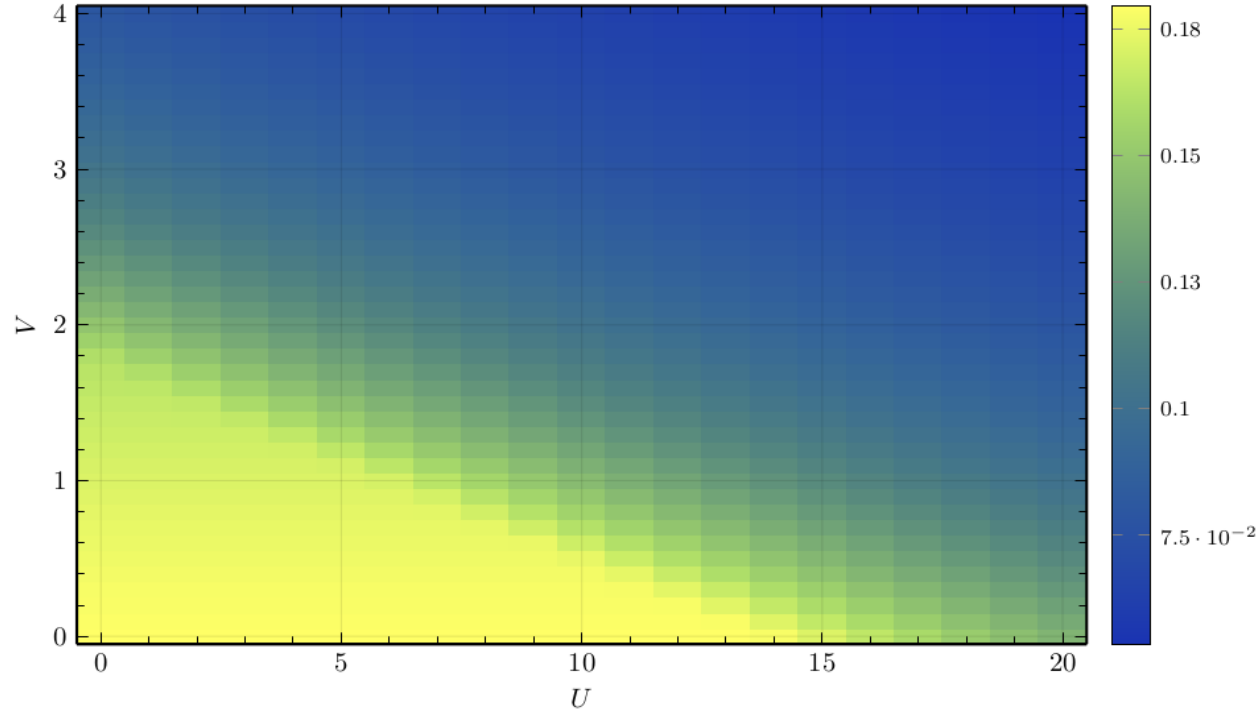
$w^{(0)}$  ( $t = 1.0$ ,  $U = 20.0$ ,  $L_x = 256$ ,  $\beta = 100.0$ , varying  $V$ )



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

(Non tutte le  $V$  sono plottate)

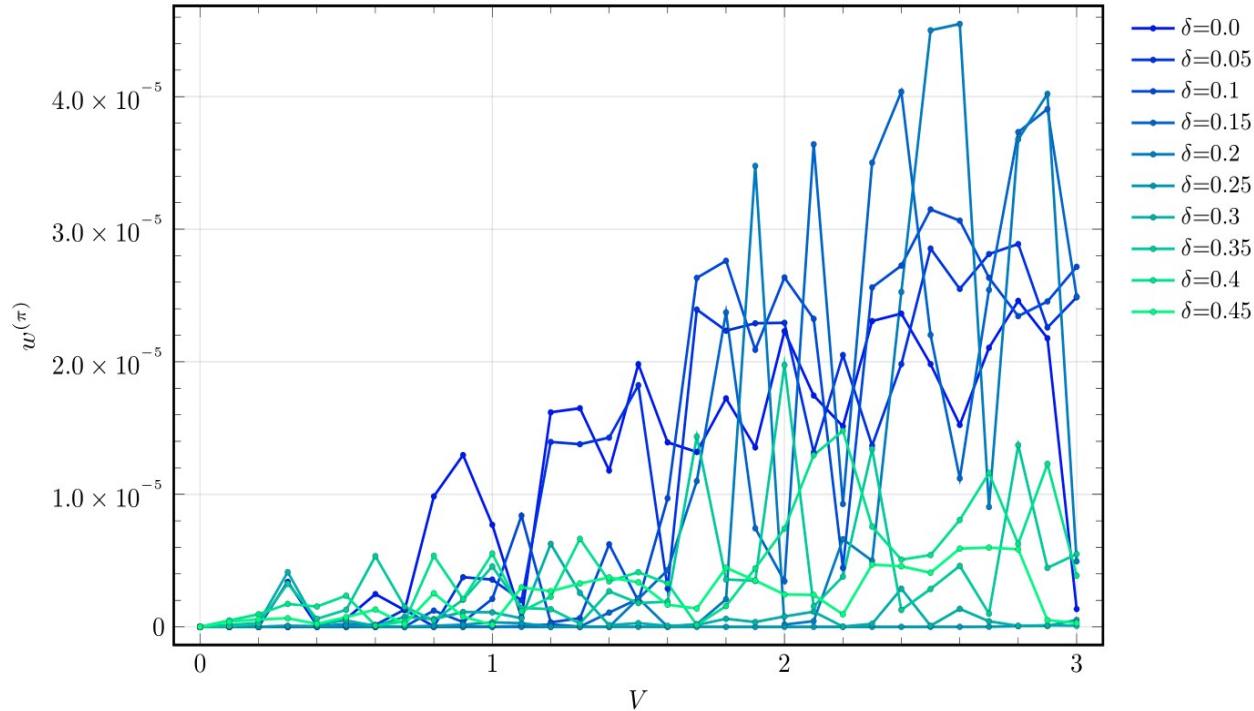
$$w^{(0)} (t = 1.0, L_x = 128, \delta = 0.2, \beta = 100.0)$$



Confrontando la heatmap di questo parametro con quella per  $m$  (vedi slide 18) si vede il cambio di pendenza che si osserva nelle slides 20-22 coincide con la zona critica in cui il sistema transisce ad antiferromagnete.

**Parametro:**  $W^{\pi}$

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

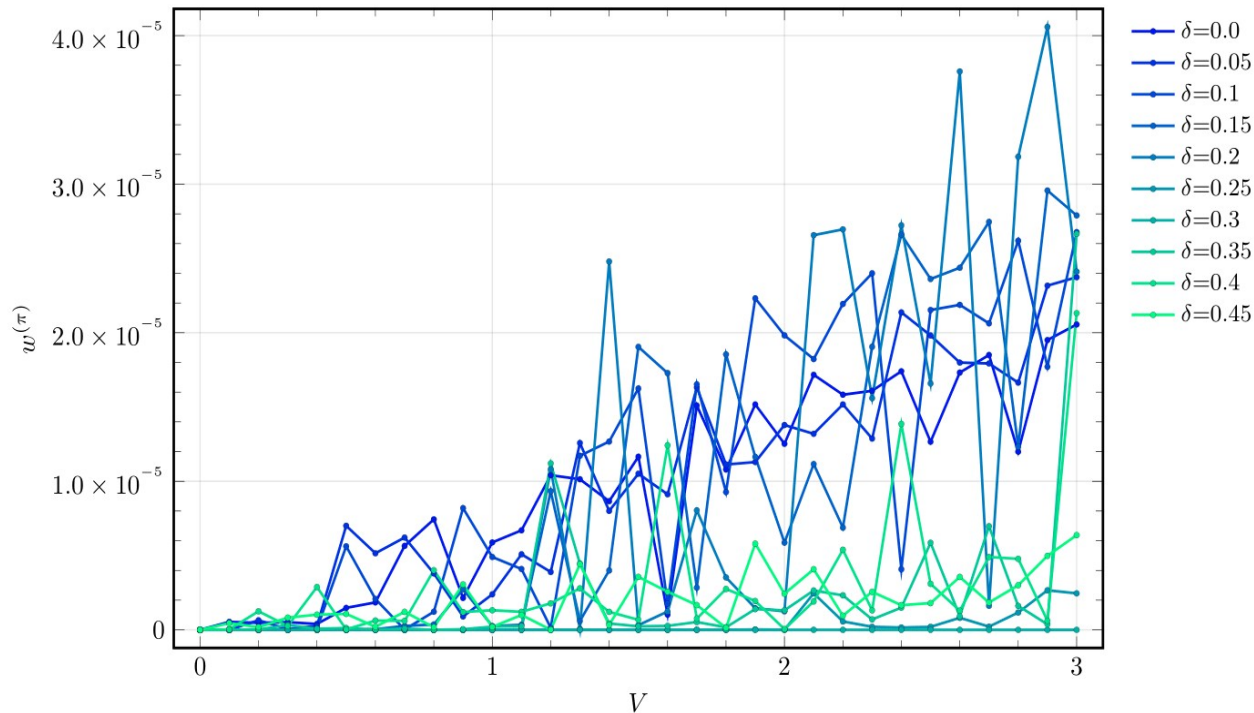


Il parametro controlla la rinormalizzazione della parte immaginaria del gap

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

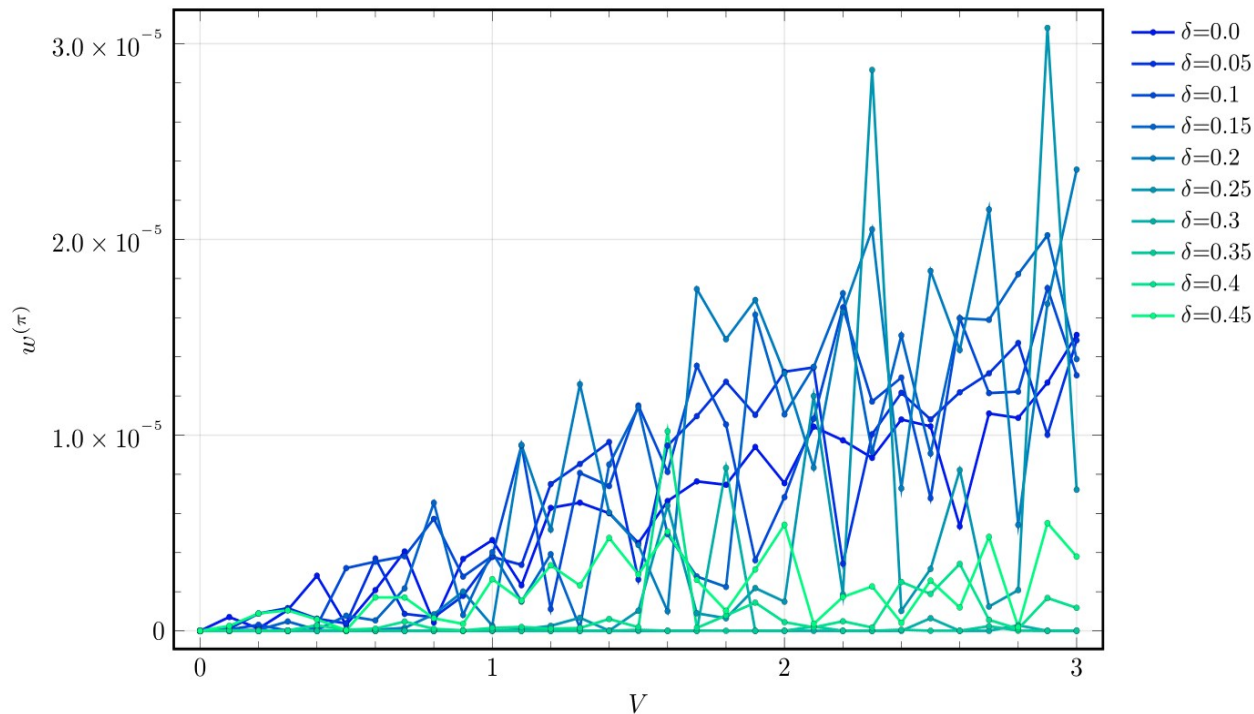
Dalle simulazioni si vede che il parametro fluttua su scale molto piccole, quindi probabilmente questi grafici non sono molto affidabili. Si vede comunque che l'ampiezza delle oscillazioni cresce con  $V$  e decresce con il doping, ma comunque quasi non influisce sul gap che è  $O(1)$ .

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



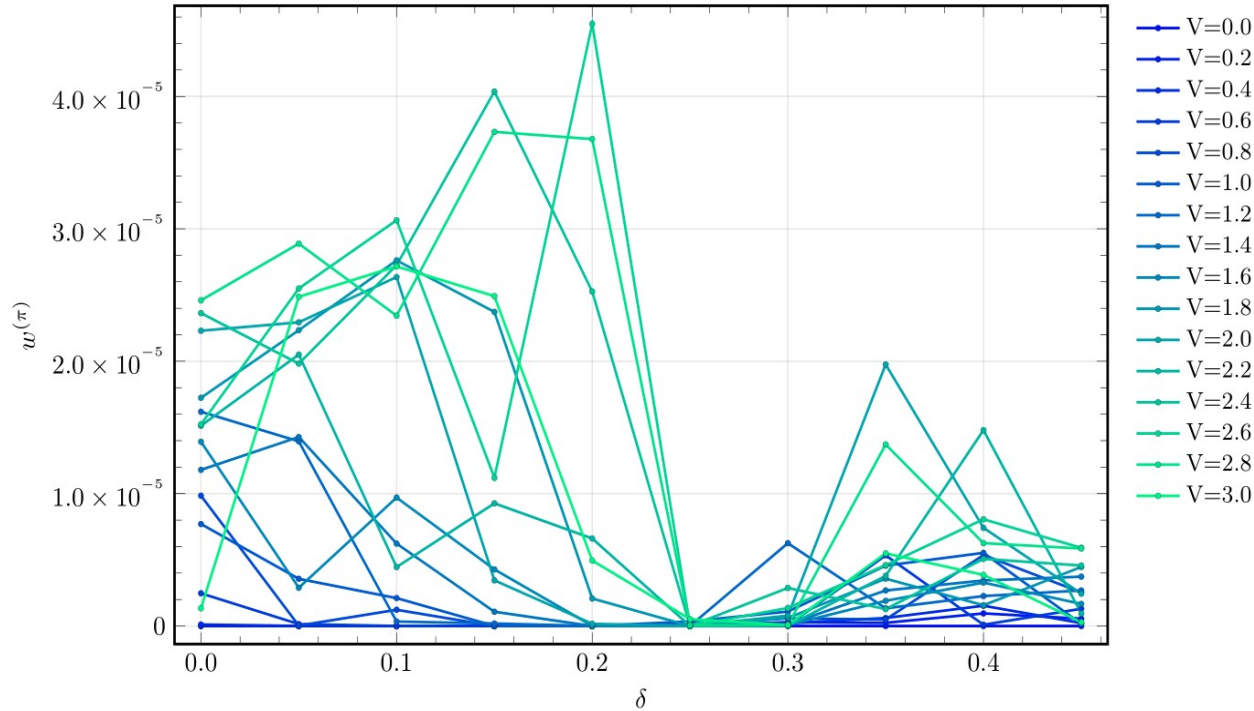
Aumentando il valore della repulsione locale l'ampiezza delle oscillazioni sembra diminuire. Inoltre sembra che per doping inferiore a 0.2-0.25 il parametro cresce linearmente con  $V$ , mentre per doping superiori sia soppresso.

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



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.

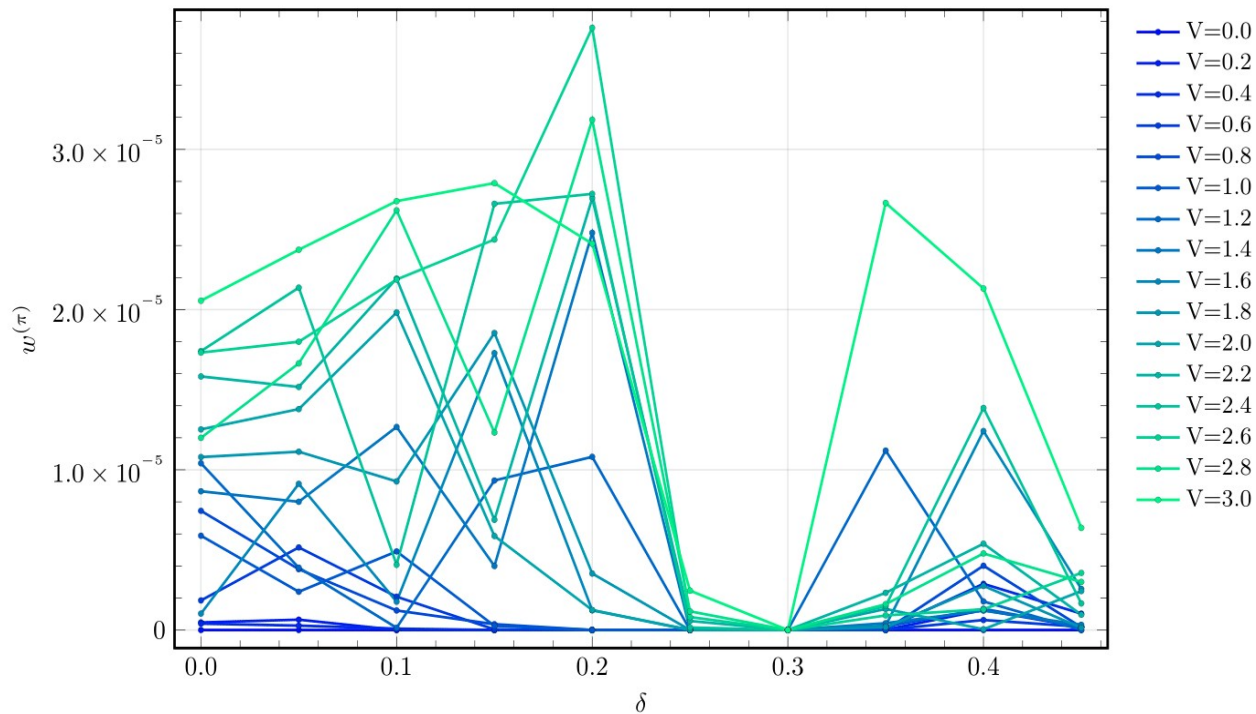
$w^{(\pi)}$  ( $t = 1.0$ ,  $U = 4.0$ ,  $L_x = 256$ ,  $\beta = 100.0$ , varying  $V$ )



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  $V$ )

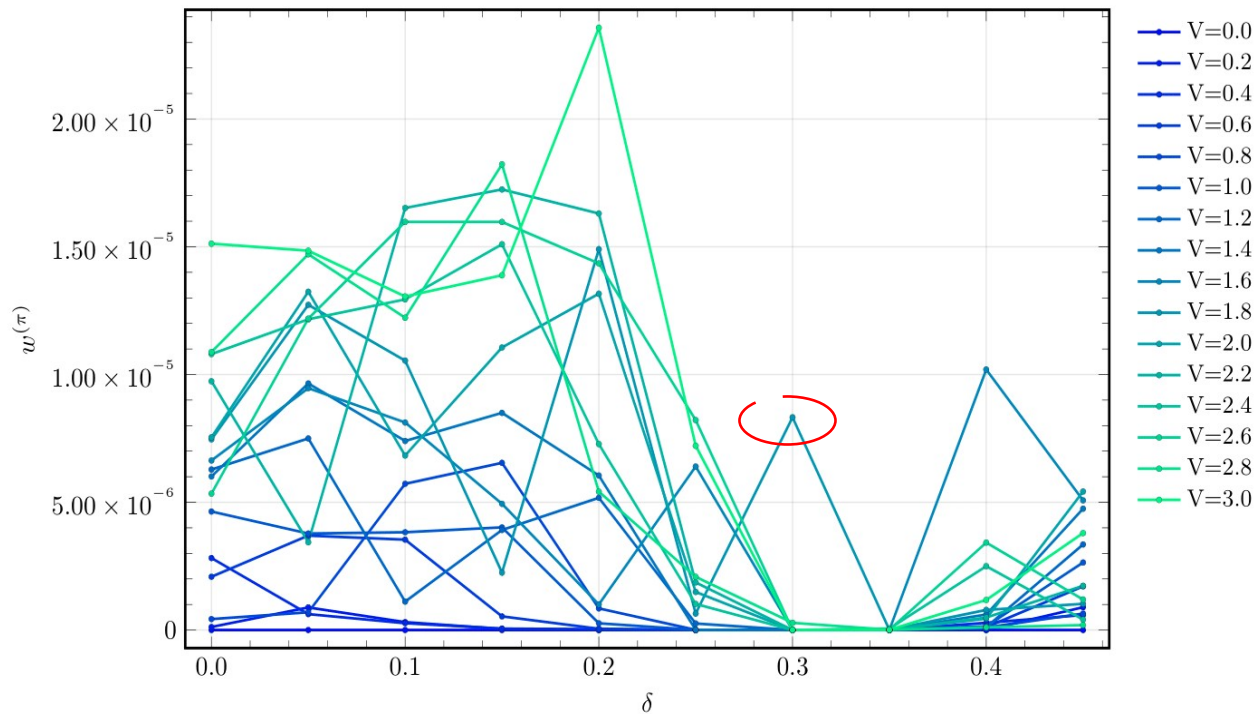


Al crescere della repulsione locale  $U$  il “buco” si vede più chiaramente...

(Non tutte le  $V$  sono plottate)

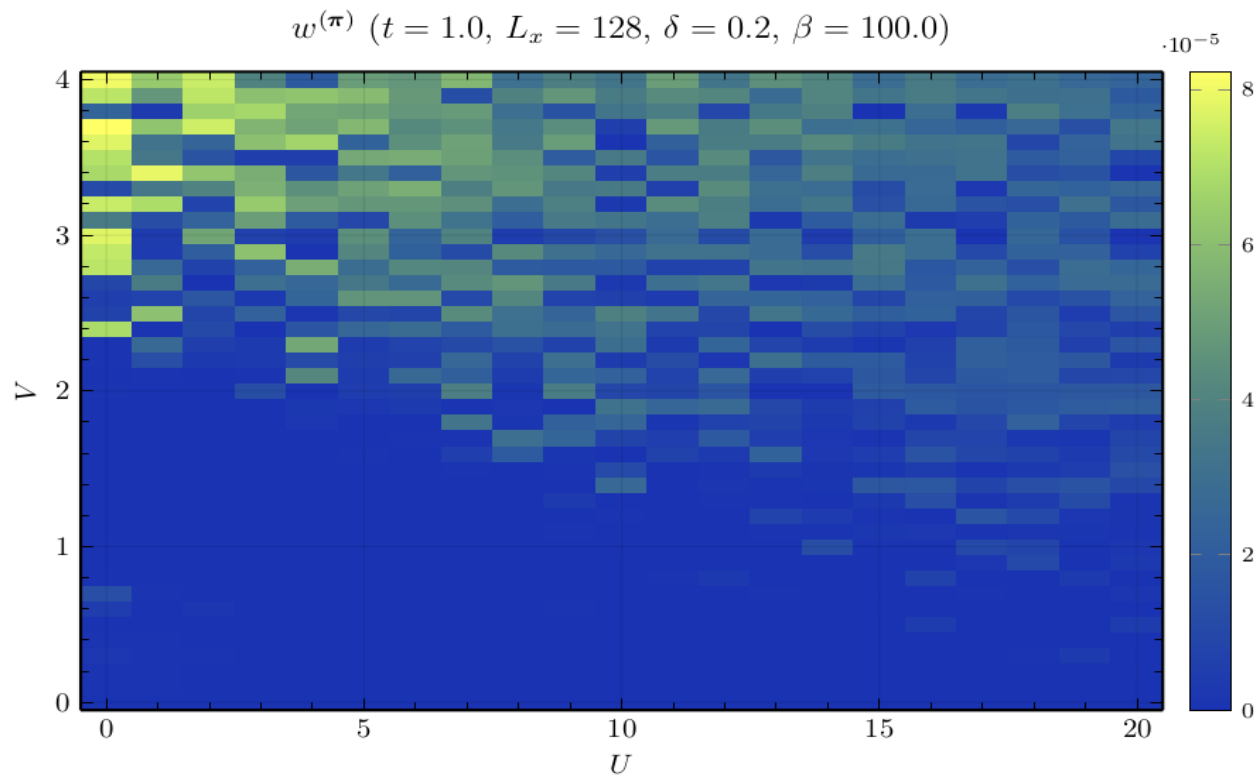


$w^{(\pi)} (t = 1.0, U = 20.0, L_x = 256, \beta = 100.0, \text{varying } V)$



... 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)



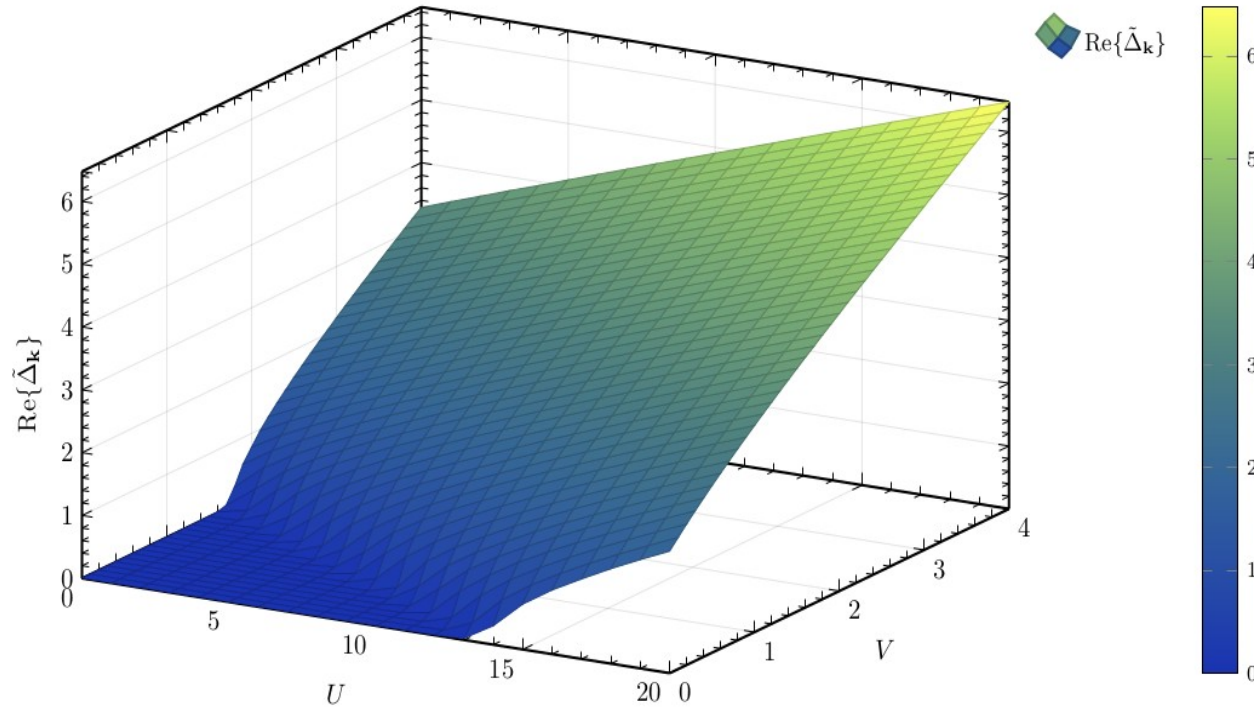
La heatmap di questo parametro è meno facilmente interpretabile delle precedenti. È interessante però che la zona in cui si annulla è più larga di quella in cui non si è ancora stabilita la fase antiferromagnetica.

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 23 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  $w^\pi$  è strano, sia in termini di ordini di grandezza che di andamento in funzione di  $V$  (vedi slide 28 e seguenti)

**Addendum: plot dei parametri rinormalizzati**

$$\text{Re}\{\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}\} \quad (t = 1.0, L_x = 128, \delta = 0.2, \beta = 100.0, k_\ell = \pi/3)$$



La parte reale del gap è dominante, e giustamente il sistema è gapped quando viene stabilita la fase antiferromagnetica.

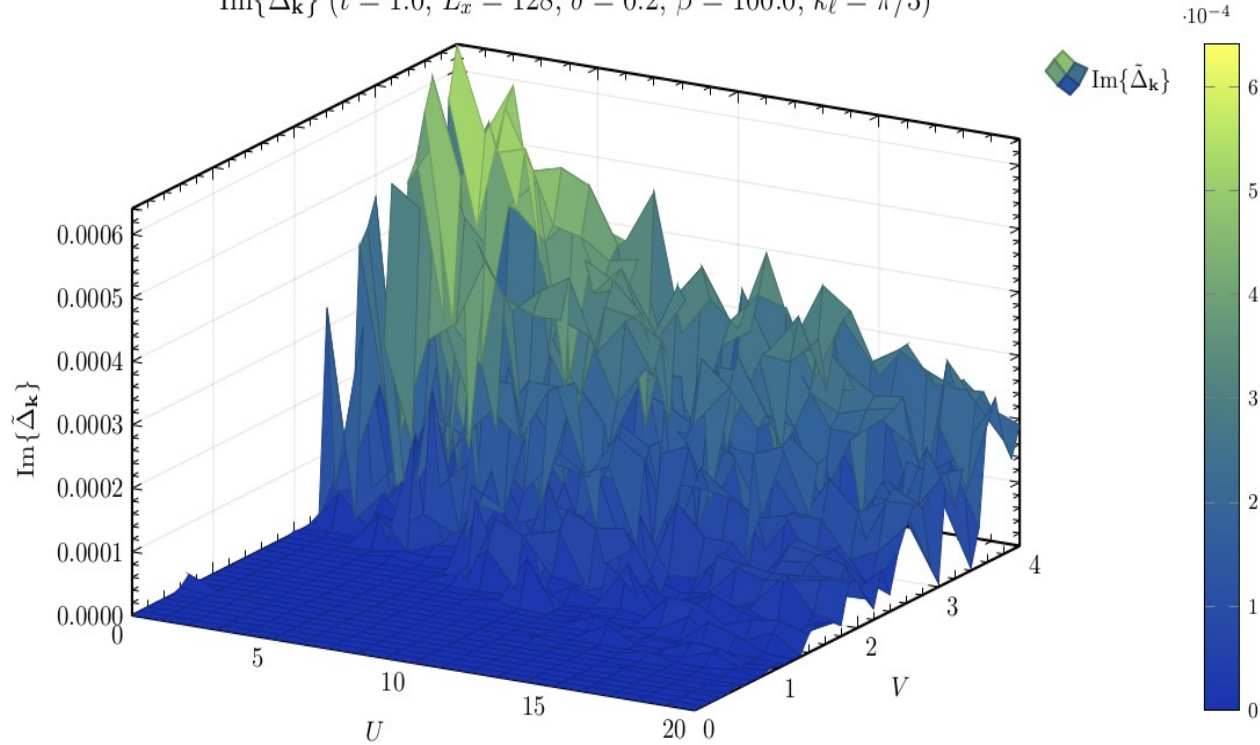
La specifica

$$k_x = k_y = \frac{\pi}{3}$$

Indica il punto in cui

$$\cos k_x + \cos k_y = 1$$

$$\text{Im}\{\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}\} (t = 1.0, L_x = 128, \delta = 0.2, \beta = 100.0, k_\ell = \pi/3)$$



La parte immaginaria del gap è sub-dominante, e oscilla nella fase antiferromagnetica con piccola ampiezza.

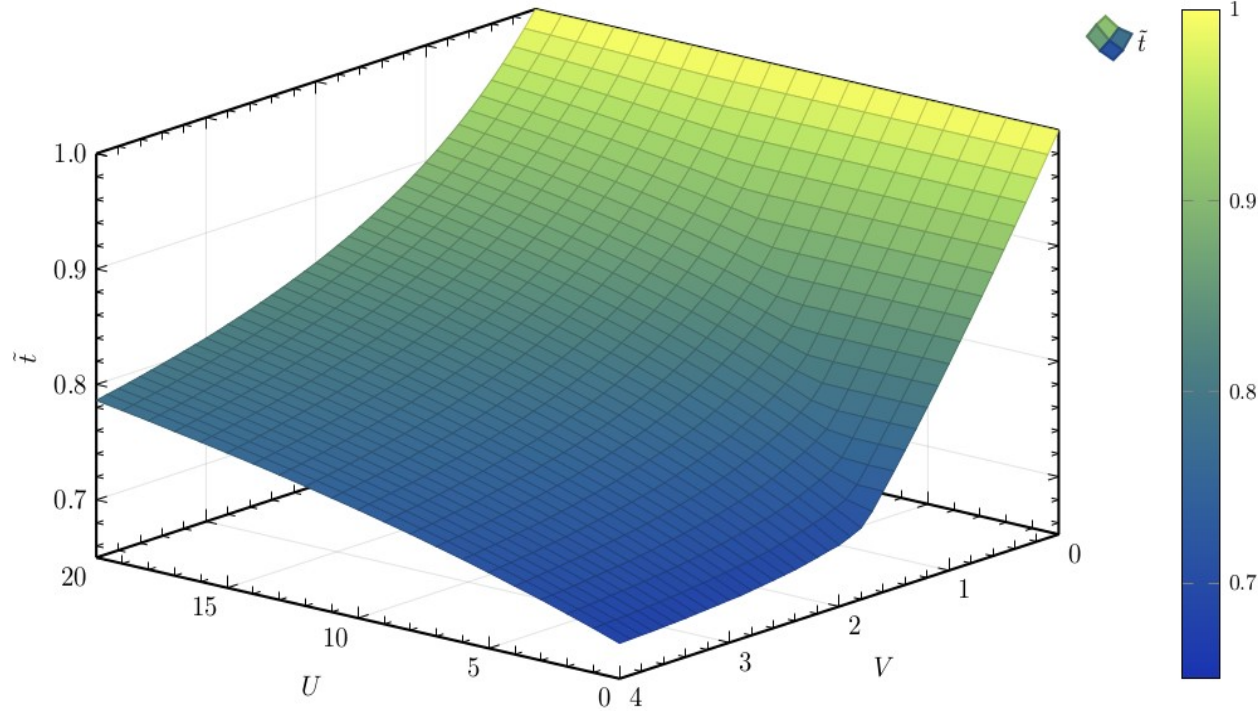
La specifica

$$k_x = k_y = \frac{\pi}{3}$$

Indica il punto in cui

$$\cos k_x + \cos k_y = 1$$

$\tilde{t} (t = 1.0, L_x = 128, \delta = 0.2, \beta = 100.0, k_\ell = \pi/3)$



L'hopping effettivo in questa simulazione si riduce fino al 70% del suo valore non rinormalizzato. Forse per piccole U e grandi V si può annullare.

La specifica

$$k_x = k_y = \frac{\pi}{3}$$

Indica il punto in cui

$$\cos k_x + \cos k_y = 1$$