



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
Εθνικόν και Καποδιστριακόν
Πανεπιστήμιον Αθηνών

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ
του
Νικολάου Γ. Διαμαντή

Μελέτη διάδοσης οπής σε κβαντικά συστήματα spin με την
μέθοδο της διαγραμματικής Monte Carlo

Επιβλέπων Καθηγητής

Ευστράτιος Μανουσάκης

Αθήνα, Ιούνιος 2015

Ευχαριστίες

Μέσω αυτών των λίγων γραμμών θα ήθελα να εκφράσω τις βαθιές μου ευχαριστίες για τον καθηγητή Στράτο Μανουσάκη ο οποίος μου πρόσφερε αμέριστη βοήθεια διαθέτοντας πολύ από τον πολύτιμο χρόνο του στην κατανόηση των διαφόρων επιστημονικών θεμάτων. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον συμμαθητή μου Δρ. Στράτο Πάσχο του οποίου η βοήθεια σε θέματα πληροφορικής και \LaTeX υπήρξε καταλυτική για την διεκπεραίωση της διατριβής. Ακόμη θα ήθελα να ευχαριστήσω τον πρώτο μου δάσκαλο από το Γυμνάσιο που με ενέπνευσε και οδήγηθηκα να ασχοληθώ με τη Φυσική, τον Ηρακλή Τέλιο.

Αφιερώνω αυτή την εργασία στον γιο μου

Γιώργο.



Περιεχόμενα

Summary	1
Σύνοψη	3
1 Εισαγωγή	5
2 Συναρτήσεις Green	11
2.1 Η retarded συνάρτηση Green	11
2.1.1 Ορισμός Green συναρτήσεων στο χωρόχρονο	11
2.1.2 Η έννοια της μέσης τιμής	12
2.1.3 Αλλαγή βάσης – Άλλες μορφές των συναρτήσεων Green	12
2.1.4 Μετασχηματισμός Fourier των συναρτήσεων Green	13
2.1.5 Σύστημα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων	14
2.1.6 Αναπαράσταση Lehmann	14
2.2 Η φασματική συνάρτηση $A(\omega)$	15
2.3 Συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου (Matsubara)	17
2.3.1 Ορισμός Matsubara συνάρτηση Green	17
2.3.2 Σχέση Matsubara συνάρτησης Green και φασματικής συνάρτησης	18
2.3.3 Υπολογισμός της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου - Διαγράμματα Feynman	19
3 Διαγραμματική Μέθοδος Monte Carlo	21
3.1 Περιγραφή της Διαγραμματικής μεθόδου Monte Carlo	21
3.1.1 Υπολογισμός της $G(\tau)$ με σταθερό χρόνο τ	22

3.1.2	Υπολογισμός του Ιστογράμματος της $G(\tau)$	23
3.1.3	Η Standard-diag-MC μέθοδος	24
3.2	Τεχνικές Flat Histogram	25
3.2.1	Αναδρομική Πολλαπλή Κανονικοποίηση (Multicanonical Recursion)	25
3.2.2	Μέθοδος των Wang και Landau (W-L)	26
4	Μέθοδοι Αντιστροφής, Αναλυτική Συνέχιση	29
4.1	Αναλυτική Συνέχιση - Αρχή Ελαχίστων Τετραγώνων	30
4.2	Μέθοδος Μέγιστης Εντροπίας	32
4.3	Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία	34
4.3.1	Περιγραφή της Μεθόδου	34
4.3.2	Πρακτική Εφαρμογή της Μεθόδου	37
5	t-J Μοντέλο και Παραλλαγές του	39
5.1	Εισαγωγή	39
5.2	Φορμαλισμός	41
5.2.1	Περιορισμός του Χώρου Hilbert - Ορισμός Τελεστών	41
5.3	Εφαρμογές	43
5.3.1	Τετραγωνικό δισδιάστατο Αντισιδηρομαγνητικό Πλέγμα. Αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων, Μετάβαση πρώτων γειτόνων	43
5.3.2	Αλληλεπίδραση Πρώτων και Δεύτερων Γειτόνων-Διάνυσμα Τάξης	47
5.3.3	Τετραγωνικό Αντισιδηρομαγνητικό Πλέγμα	48
5.3.4	Columnar	50
6	Η Μέθοδος Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo (FHDMC)	57
6.1	Η Μέθοδος	59
6.2	Εφαρμογή στο Πρόβλημα του Πολαρονίου	61
6.3	Ο Αλγόριθμος της Μεθόδου Διαγραμματική Monte Carlo	63
6.3.1	DMC με σταθερό χρόνο τ .	63
6.3.2	Δειγματοληψία του ιστογράμματος του $G(\tau)$.	64
6.4	Αποτελέσματα και Συγκρίσεις	64
6.5	Αποτελέσματα και Συγκρίσεις	65
6.6	Συμπεράσματα	68
7	Αναλυτική Συνέχιση και Μέθοδος Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo	69
7.1	Μέθοδος	71
7.2	Υπολογιστικές λεπτομέρειες	74

7.2.1	Εφαρμογή της μεθόδου SAI	74
7.2.2	Επιλογή του default μοντέλου	77
7.3	Αποτελέσματα	78
7.3.1	Το default μοντέλο είναι η «ακριβής» λύση.	78
7.3.2	Default μοντέλο η επίπεδη κατανομή.	78
7.3.3	Default μοντέλο η $A_{(0,0)}(\omega)$	82
7.4	Συμπεράσματα	83
8	Μελέτη της φασματικής συνάρτησης μιας οπής στο μοντέλο t-J με την Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo	87
8.1	Το πρόβλημα. Μέθοδοι	89
8.1.1	Υπολογιστικά στοιχεία	91
8.2	Αποτελέσματα-Συμπεράσματα	92
8.2.1	Οι συναρτήσεις $G(\tau)$, $G_p(\tau)$, $G_n(\tau)$ -Σχετικά Σφάλματα	92
8.2.2	Η Φασματική Συνάρτηση $A(\omega)$	93
8.3	Συμπέρασμα	100
9	Μελέτη της φασματικής συνάρτησης μιας οπής στο μοντέλο $t - J_1 - J_2$ με την Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo	103
9.1	Το Πρόβλημα και οι Μέθοδοι	105
9.2	Αποτελέσματα-Παρατηρήσεις	107
9.2.1	Néel Τάξη.	107
9.2.2	Columnar Τάξη	111
9.3	Συμπεράσματα	113
9.3.1	Néel Τάξη.	113
9.3.2	Columnar Τάξη	113
10	Συμπεράσματα-Προοπτικές	115
	Βιβλιογραφία	117



Summary

In this thesis we introduce a new method, the “Flat Histogram Diagrammatic Monte Carlo” (FDHMC), which is the combination of the “Diagrammatic Monte Carlo” (DMC) with Flat Histogram methods. By applying the FDHMC and other versions of the DMC to a specific solvable problem, namely, the Froehlich polaron problem for Feynman diagrams of specific form, we calculate the imaginary-time Green function. A comparison of the results make clear that, the FDHMC excels in terms of the quality of the results and the direct manner of its application. We apply the FDHMC and other versions of the DMC to calculate the imaginary-time Green function $G(\tau)$ in a solvable problem, which is the $t - J$ model in the spin wave linear approximation with a limitation of the calculations in the area of the Feynman diagrams that are determined by the non crossing approximation (NCA). We invert the results of $G(\tau)$ with the analytic continuation method “Stochastic Analytic Inference” (SAI) and we determine the spectral function $A(\omega)$ for each case. By comparing the results of this inversion with the exact solution for the spectral function, we conclude the clear superiority of the FDHMC compared to other methods.

Finally, we apply the FDHMC in order to calculate the spectral function $A(\omega)$, the dispersion relation and the spectral weight of the quasi particle, without approximation for the movement of a hole for the $t - J$ model and the variation of the $t - J_1 - J_2$ in the spin wave linear approximation, in which the problem of the fermion sign also appears. The superiority of the FDHMC in dealing with the problem of the fermion sign is ascertained, and the accuracy of the NCA approach is evaluated in any case.



Σύνοψη

Στην παρούσα εργασία εισάγουμε μια νέα μέθοδο, η οποία είναι ο συνδυασμός της μεθόδου “Διαγραμματική Monte Carlo” (DMC) με μεθόδους Επιπέδου Ιστογράμματος, τη μέθοδο “Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo” (FHDMC). Εφαρμόζοντας την FHDMC και άλλες εκδοχές της DMC σε συγκεκριμένο επιλύσιμο πρόβλημα, συγκεκριμένα το πρόβλημα του πολaronίου Froehlich και για συγκεκριμένης μορφής διαγραμμάτων Feynman, υπολογίζουμε τη συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου. Από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων προκύπτει η υπεροχή της FHDMC ως προς την ποιότητα των αποτελεσμάτων και τον ευθύ τρόπο εφαρμογής της. Εφαρμόζουμε την FHDMC και άλλες εκδοχές της DMC για τον υπολογισμό της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$ σε επιλύσιμο πρόβλημα, που είναι το μοντέλο $t - J$ στη γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin με περιορισμό των υπολογισμών στο χώρο των διαγραμμάτων Feynman που προσδιορίζονται με την μη τεμνόμενων διαγραμμάτων προσέγγιση (NCA, Non Crossing Approximation). Αντιστρέφουμε τα παραπάνω αποτελέσματα της $G(\tau)$ με την μέθοδο αναλυτικής συνέχισης “Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία” (SAI) και προσδιορίζουμε τη φασματική συνάρτηση $A(\omega)$ για κάθε περίπτωση. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα της αντιστροφής με την ακριβή λύση για τη φασματική συνάρτηση, προκύπτει η σαφής υπεροχή της FHDMC έναντι των άλλων μεθόδων.

Τέλος εφαρμόζουμε την FHDMC για υπολογισμούς της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$, της σχέσης διασποράς και του φασματικού βάρους του οιονεί σωματιδίου, χωρίς προσέγγιση για την κίνηση μιας οπής για το μοντέλο $t - J$ και της παραλλαγής του $t - J_1 - J_2$ στη γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin, όπου εμφανίζεται και το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου. Διαπιστώνεται η υπεροχή της FHDMC για την αντιμετώπιση του προβλήματος του φερμιονικού πρόσημου, και αξιολογείται σε κάθε περίπτωση η ακρίβεια της προσέγγισης NCA.



1 Εισαγωγή

Στα κρυσταλλικά πλέγματα ορισμένων υλικών υπάρχουν εντοπισμένα μονήρη ηλεκτρόνια (εντοπισμένα spins, εντοπισμένες μαγνητικές ροπές) σε κάθε πλεγματική κυψελίδα. Ο εντοπισμός αυτός συνδέεται με την ύπαρξη μερικώς συμπληρωμένων εσωτερικών φλοιών και με την ισχυρή αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου όταν δύο ηλεκτρόνια βρεθούν στην ίδια κυψελίδα του κρυσταλλικού πλέγματος. Πιο συγκεκριμένα, ο εντοπισμός αυτός παρουσιάζεται στα στοιχεία μεταπτώσεως της σειράς $3d$ και ιδιαίτερα στα οξείδια αυτών π.χ. NiO, MnO, Fe₂O₃ κ.λ.π. Το φαινόμενο του εντοπισμού εμφανίζεται επίσης με λιγότερη ένταση στα στοιχεία μεταπτώσεως της σειράς $4d$ και $5d$. Με μεγάλη ένταση εμφανίζεται σε σπάνιες γαίες (Gd, Eu, Dy,...) και με την ίδια με τα στοιχεία μεταπτώσεως της σειράς $3d$ σε ακτινίδες (U, Np, Am) κ.λ.π.

Η κύρια αλληλεπίδραση μεταξύ αυτών των τοπικών spins είναι η αλληλεπίδραση ανταλλαγής Heisenberg που προκύπτει από το συνδυασμό της αλληλεπίδρασης Coulomb και την απαγορευτική αρχή του Pauli. Ανάλογα με την τιμή της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής προκύπτουν διάφοροι τύποι μαγνητικής τάξης, σιδηρομαγνητική τάξη και αντισιδηρομαγνητική τάξη. Στην Heisenberg Hamiltonian με εφαρμογή των μετασχηματισμών Holstein - Primakoff των τελεστών spin και του μετασχηματισμού Bogoliubov στην γραμμική προσέγγιση, προκύπτουν διεγέρσεις που είναι τα κύματα spin ή μαγνόνια.

Όπως προαναφέραμε ο εντοπισμός των ηλεκτρονίων οφείλεται στην ισχυρή άπωση των ηλεκτρονίων όταν αυτά βρίσκονται στην ίδια πλεγματική κυψελίδα. Για το λόγο αυτό τα συστήματα αυτά λέγονται ισχυρής συσχέτισης. Περιγράφονται κυρίως με δύο μοντέλα, το μοντέλο Hubbard [1] και το $t - J$ μοντέλο [2–4]. Στο μοντέλο Hubbard, το οποίο έχει χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει ποιοτικά αυτά τα φαινόμενα, η Hamiltonian περιέχει δύο

όρους, έναν που περιγράφει την μετάβαση ενός εντοπισμένου ηλεκτρονίου σε άλλη πλεγματική κυψελίδα και έναν δεύτερο που περιγράφει την ενέργεια αλληλεπίδρασης όταν δύο ηλεκτρόνια βρίσκονται στην ίδια πλεγματική κυψελίδα. Το μοντέλο $t - J$ αποτελείται από μια Hamiltonian η οποία επίσης περιέχει δύο όρους. Ο πρώτος όρος, ο κινητικός όρος, περιγράφει την μετάβαση ενός ηλεκτρονίου από μία πλεγματική κυψελίδα σε άλλη υπό την προϋπόθεση ότι στην άλλη πλεγματική κυψελίδα δεν περιέχεται ήδη άλλο ηλεκτρόνιο, δηλ. αποκλείει την διπλή κατάληψη. Οι τελεστές που περιέχονται στον κινητικό όρο του μοντέλου $t - J$ υπακούουν σε μια σύνθετη σχέση μετάθεσης και για το λόγο αυτό έγιναν πολλές προσπάθειες στην αναπαράσταση αυτών με το γινόμενο ενός φερμιονικού και ενός μποζωνικού τελεστή. Ο δεύτερος όρος είναι η Hamiltonian αλληλεπίδρασης ανταλλαγής Heisenberg.

Το μοντέλο $t - J$ έχει ευρύτατες εφαρμογές και περιγράφει ποιοτικά πολλές από τις ιδιότητες των υλικών που περιγράψαμε παραπάνω. Η μεγαλύτερη πρόκληση είναι η εξήγηση με την βοήθεια του $t - J$ μοντέλου της υψηλής θερμοκρασίας T_c υπεραγωγιμότητα που παρουσιάζουν ορισμένα υλικά. όπως π.χ. $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-y}$ και $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ καθώς και υλικά με βάση τον Fe όπως π.χ. $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, $\text{Ba}_2\text{Ti}_2\text{Fe}_2\text{As}_4\text{O}$, κ.α.

Το κεντρικό πρόβλημα στα πλαίσια του μοντέλου $t - J$ είναι ο προσδιορισμός του φάσματος του οιονεί σωματιδίου. Πιο συγκεκριμένα εξετάζουμε την περίπτωση όπου ο βαθμός κάλυψης του πλέγματος με ηλεκτρόνια είναι ελαφρώς μικρότερη από ένα ηλεκτρόνιο ανά πλεγματική κυψελίδα, οπότε έχουμε πολύ μικρή συγκέντρωση οπών και το πλέγμα παρουσιάζει μικρή αγωγιμότητα λόγω του κινητικού όρου της Hamiltonian. Το πρόβλημα τότε ανάγεται στην **κίνηση μιας οπής**, η οποία αλληλεπιδρώντας με τα μαγνόνια δημιουργείται ένα οιονεί σωματίδιο αντίστοιχο με το πολάρνιο [5].

Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του φάσματος του οιονεί σωματιδίου σε γενικές γραμμές συνοψίζονται στις ακόλουθες:

- **Ακριβής διαγωνιοποίηση:** Χρησιμοποιώντας αριθμητικές μεθόδους διαγωνιοποιούμε ένα πλέγμα μικρού μεγέθους. Το μειονέκτημα είναι ότι η ακριβής λύση είναι για αυτό το μικρό πεπερασμένο πλέγμα χωρίς να μπορούμε να δώσουμε ασυμπτωτική λύση για το άπειρο ρεαλιστικό πλέγμα.
- **Κβαντικό Monte Carlo:** Χρησιμοποιούνται διάφοροι αλγόριθμοι κβαντικού Monte Carlo [6–11]. Αν και δεν υπάρχει περιορισμός στο μέγεθος του συστήματος, έχουμε όμως το πρόβλημα του αρνητικού πρόσημου και επίσης με την αύξηση του μεγέθους του συστήματος αυξάνεται εκθετικά το στατιστικό σφάλμα των αποτελεσμάτων.
- **Non Crossing Approximation (NCA):** Είναι μια προσεγγιστική μέθοδος [12], εφαρμόζεται και αυτή σε σύστημα περιορισμένου μεγέθους, με την δυνατότητα όμως να δίνει την ασυμπτωτική λύση για το άπειρο σύστημα, στα πλαίσια όμως της προσέγγισης.

- **Μέθοδος Διαγραμματική Monte Carlo:** Η μέθοδος διαγραμματική Monte Carlo [13, 14] είναι μια μέθοδος κβαντικού Monte Carlo, όπου ο δειγματικός χώρος είναι τα διάφορα διαγράμματα Feynman, με την οποία μπορούμε να υπολογίσουμε τη συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου. Η μέθοδος είναι απαλλαγμένη συστηματικών λαθών.

Στη παρούσα διατριβή βελτιώνουμε την μέθοδο Διαγραμματική Monte Carlo εμπλουτίζοντας την με μεθόδους Επιπέδου Ιστογράμματος [15–17] δημιουργώντας τη μέθοδο “**Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo**”. Όπως θα δούμε η νέα μέθοδος βελτιώνει κατά πολύ την Διαγραμματική Monte Carlo, βελτιώνοντας σημαντικά το στατιστικό λάθος των μετρήσεων και απλοποιώντας τον τρόπο εφαρμογής της μεθόδου.

Η φασματική συνάρτηση του οιονεί σωματιδίου του συστήματος υπολογίζεται με την αναλυτική συνέχιση της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου, η οποία έχει υπολογισθεί με την εφαρμογή του κβαντικού Monte Carlo. Η αναλυτική συνέχιση, που είναι ο μετασχηματισμός Laplace της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου, με δεδομένα ένα πλήθος σημείων της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου, είναι ένα ασθενές (ill posed), από μαθηματικής σκοπιάς, πρόβλημα. Είναι ασθενές με την έννοια ότι έχει άπειρες λύσεις. Το πρόβλημα αυτό αντιμετωπίζεται με την εφαρμογή ορισμένων μεθόδων [18–20] με τις οποίες μεταξύ αυτών των απείρων λύσεων, με κάποιους κανόνες, επιλέγεται η πιθανότερη “σωστή”.

Στην παρούσα εργασία για την αναλυτική συνέχιση των αποτελεσμάτων μας, όπου χρειάζεται, χρησιμοποιούμε την μέθοδο “Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία” [18, 19]. Με αυτή την εργασία καταδεικνύεται ότι η μέθοδος Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo με την μέθοδο Στοχαστική Αναλυτική Συνέχιση αποτελούν ένα ισχυρό και πλήρες εργαλείο για την αντιμετώπιση του προβλήματος της κίνησης μιας σπής για τις διάφορες παραλλαγές του μοντέλου $t - J$.

Στο δεύτερο κεφάλαιο ορίζονται οι συναρτήσεις Green και περιγράφεται η χρησιμότητά τους. Οι συναρτήσεις Green στο πρόβλημα των πολλών σωματιδίων περιέχουν όλες τις πληροφορίες του συστήματος. Ειδικά η συνάρτηση που είναι ο μετασχηματισμός Fourier της retarded συνάρτησης Green μας δίνει πληροφορίες για τις ενέργειες των διεγερμένων καταστάσεων του συστήματος και για τη φασματική συνάρτηση των οιονεί σωματιδίων. Επίσης από την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου με αντιστροφή μπορούμε να υπολογίσουμε τη φασματική συνάρτηση.

Στο τρίτο κεφάλαιο περιγράφεται η μέθοδος Διαγραμματική Monte Carlo. Είναι μια μέθοδος με την οποία με στοχαστική διαδικασία στο χώρο των διαγραμμάτων Feynman μπορούμε χωρίς λάθος να υπολογίσουμε την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου. Επίσης περιγράφονται δύο μέθοδοι επιπέδου διαγράμματος, η Multicanonical και η μέθοδος Wang-Landau. Αυτές οι μέθοδοι είναι τεχνικές κλασικού Monte Carlo με τις οποίες θεραπεύεται το πρόβλημα του

μεγάλου στατιστικού λάθους των μικρών τιμών μιας παραγόμενης κατανομής με πολύ μεγάλες διακυμάνσεις. Με κατάλληλη διαδικασία τροποποιούν την κατανομή κάνοντας την επίπεδη περιορίζοντας έτσι σημαντικά το στατιστικό λάθος στις μικρές τιμές της.

Στο τέταρτο κεφάλαιο περιγράφονται οι μέθοδοι αναλυτικής συνέχισης. Για ένα πλήθος σημείων της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου οι αντίστοιχες λύσεις της φασματικής συνάρτησης είναι άπειρες. Η αναλυτική γνώση της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου τελικά οδηγεί στον υπολογισμό της φασματικής συνάρτησης. Για ένα πλήθος σημείων της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου οι αντίστοιχες λύσεις της φασματικής συνάρτησης είναι άπειρες. Το πρόβλημα που προκύπτει είναι αν με γνώση ενός πλήθους σημείων της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου, μπορούμε να προσδιορίσουμε εκείνη από τις άπειρες λύσεις της φασματικής συνάρτησης που είναι πιο κοντά στην πραγματική μορφή. Στο πρόβλημα αυτό με χρήση Bayesian λογικής δίνουν λύση οι μέθοδοι Maximum Entropy Method και Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία. Σύμφωνα με την δεύτερη μέθοδο, πιο πιθανή λύση είναι η μέση τιμή όλων των μορφών γύρω από ένα default μοντέλο με πιθανότητα η οποία σχετίζεται με το πλήθος των σημείων της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου και τις προτεινόμενες μορφές.

Τέλος στο πέμπτο κεφάλαιο περιγράφεται το μοντέλο $t - J$ και παραλλαγές του. Το μοντέλο $t - J$ είναι ένα από τα μοντέλα που περιγράφουν τα συστήματα με ισχυρή συσχέτιση. Με την στάνταρντ διαδικασία σε κάθε περίπτωση που είναι η χρήση του μετασχηματισμού Holstein-Primakof και του μετασχηματισμού Bogoliubov, και σε γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin, παράγουμε την διαγωνισμένη μορφή του τμήματος της Heisenberg Hamiltonian από όπου προκύπτουν η σχέση διασποράς των μαγνονίων και οι κορυφές αλληλεπίδρασης οπής-μαγνονίου.

Τα υπόλοιπα τέσσερα κεφάλαια περιέχουν τους διάφορους υπολογισμούς που έγιναν και τα αντίστοιχα συμπεράσματα που προέκυψαν. Συγκεκριμένα:

Στο έκτο κεφάλαιο περιγράφεται η μέθοδος Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo. Είναι ο συνδυασμός των μεθόδων Επιπέδου Ιστογράμματος και Διαγραμματικής Monte Carlo. Εφαρμόζεται αυτή και η Διαγραμματική Monte Carlo σε ένα επιλύσιμο αναγώγιμο πρόβλημα της Hamiltonian του πολαρόνιου Froehlich και συγκρίνουμε τα αποτελέσματα με την ακριβή λύση. Από την σύγκριση καταδεικνύεται η υπεροχή της Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo.

Στο έβδομο κεφάλαιο αποδεικνύουμε την υπεροχή μιας μεθόδου κβαντικού Monte Carlo εφοδιασμένη με Επιπέδου Ιστογράμματος τεχνικές σε σχέση με αυτή χωρίς την ενσωμάτωση της δεύτερης ως προς το αποτέλεσμα της αντιστροφής. Εφαρμόζουμε την απλή Διαγραμματική Monte Carlo και την Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo στην Hamiltonian του μοντέλου $t - J$ υπολογίζοντας τη συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου στον περιορισμένο χώρο των διαγραμμάτων Feynman, όπως αυτός περιορίζεται με την προσέγγιση NCA. Αντιστρέφοντας με την χρήση της Στοχαστικής Αναλυτικής Συνέχισης των δεδομένων της

φανταστικής συνάρτησης Green που υπολογίστηκε προκύπτει σε κάθε περίπτωση η αντίστοιχη φασματική συνάρτηση με την ακριβή, η οποία προκύπτει με άλλη διαδικασία. Καταγράφονται τα αντίστοιχα συμπεράσματα.

Στο όγδοο κεφάλαιο γίνονται υπολογισμοί της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου, και κατ' επέκταση της φασματικής συνάρτησης, με την χρήση της Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo, για το σύνολο των διαγραμμάτων Feynman. Η αντιστροφή γίνεται με την Στοχαστική Αναλυτική Συνέχιση και ως default μοντέλο χρησιμοποιείται η αντίστοιχη λύση της NCA. Προσδιορίζονται ακόμη το φάσμα του οιονεί σωματιδίου και το φασματικό βάρος για διάφορες τιμές της ορμής και της σταθεράς ανταλλαγής.

Στο ένατο κεφάλαιο γίνονται αντίστοιχοι υπολογισμοί με αυτούς του εβδόμου κεφαλαίου για το μοντέλο $t - J_1 - J_2$ στην περιοχή της κατάστασης Néel και της Columnar. Καταγράφονται τα αντίστοιχα συμπεράσματα που προκύπτουν και σχολιάζονται.

Τέλος το δέκατο κεφάλαιο είναι μια ανακεφαλαίωση της εργασίας όπου αναγράφονται τα συμπεράσματα που προκύπτουν και οι προοπτικές.

2 Συναρτήσεις Green

Στο κεφάλαιο αυτό θα ορίσουμε ορισμένες συναρτήσεις Green ενός σωματιδίου για το πρόβλημα των πολλών σωματιδίων με στόχο την τελική σχέση που συνδέει τη συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου, ποσότητα η οποία υπολογίζεται στις εφαρμογές μας και την φασματική συνάρτηση, ή αλλιώς συνάρτηση φασματικού βάρους (spectral weight function). Ορίζουμε συναρτήσεις Green ενός σωματιδίου που συνδέονται με τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής ενός σωματιδίου [21–27].

2.1 Η retarded συνάρτηση Green

2.1.1 Ορισμός Green συναρτήσεων στο χωρόχρονο

Η retarded συνάρτηση Green ενός σωματιδίου στο χωρόχρονο ορίζεται ως:

$$G^R(x, t; x', t') = -i\theta(t - t')\langle[\psi(x, t), \psi^\dagger(x', t')]_{\pm}\rangle \quad (2.1)$$

Το πάνω πρόσημο αναφέρεται σε φερμιόνια και είναι $[A, B]_+ \equiv \{A, B\} = AB + BA$ αντιμετάθεση και το κάτω σε μποζόνια και είναι $[A, B]_- \equiv [A, B] = AB - BA$ η κανονική μετάθεση. Οι τελεστές είναι σε αναπαράσταση Heisenberg $A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$ και επίσης με x εννοούμε την θέση \vec{r} και το spin σ του σωματιδίου, δηλ. $x \equiv (\vec{r}, \sigma)$. Ο τελεστής $\psi^\dagger(x, t)$ είναι τελεστής δημιουργίας ενός σωματιδίου στη θέση \vec{r} με spin σ και ο $\psi(x, t)$ είναι αντίστοιχα ο τελεστής καταστροφής. Επίσης ορίζουμε τις παρακάτω συναρτήσεις Green:

G-greater:

$$G^>(x, t; x', t') = -i\langle(\psi(x, t) \psi^\dagger(x', t'))\rangle \quad (2.2)$$

και G-lesser:

$$G^<(x, t; x', t') = -i(\mp)(\psi(x, t) \psi^\dagger(x', t')) \quad (2.3)$$

Πάλι το πάνω πρόσημο αναφέρεται στα φερμιόνια και το κάτω στα μποζόνια. Η retarded με τους G-greater και G- lesser γράφεται:

$$G^R(x, t; x', t') = \theta(t - t')[G^>(x, t; x', t') - G^<(x, t; x', t')] \quad (2.4)$$

2.1.2 Η έννοια της μέσης τιμής

Θεωρούμε ένα μακροσκοπικό σύστημα σωματιδίων σε θερμοκρασία T , ($T = 0$ ή > 0). Η μέση τιμή $\langle \dots \rangle$ παριστάνει την θερμοδυναμική + κβαντική μέση τιμή των διαφόρων τελεστών. Έχουμε δύο περιπτώσεις: την κανονική συλλογή και την μεγαλοκανονική. Πιο συγκεκριμένα για ένα τελεστή A η στατιστικομηχανική κβαντική μέση τιμή του τελεστή είναι $\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n|A|n \rangle e^{-\beta E_n}$. Όπου το σύνολο των $|n\rangle$ διανυσμάτων είναι πλήρης βάση της Hamiltonian H με ιδιοτιμές E_n , δηλ. $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ και $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ η συνάρτηση επιμερισμού. Θέτοντας τη σταθερά του Boltzmann $k_B = 1$ είναι $\beta = \frac{1}{T}$. Με πιο κομψό τρόπο μπορούμε να περιγράψουμε τα παραπάνω ορίζοντας τον πίνακα πυκνότητας (density matrix) $\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$ οπότε είναι $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ και $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$. Η περίπτωση της μεγαλοκανονικής συλλογής προκύπτει με την αντικατάσταση της H με την $H - \mu N$, όπου μ είναι το χημικό δυναμικό και N ο τελεστής που μετρά το πλήθος των σωματιδίων του συστήματος. Τότε είναι $\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H - \mu N)}$, $Z = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N)}$ και η μέση τιμή ενός τελεστή A δίνεται πάλι από τη σχέση $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$.

Στα παρακάτω θα αναφερόμαστε πάντα σε μεγαλοκανονική συλλογή και ως H θα εννοούμε την ποσότητα $H - \mu N$.

2.1.3 Αλλαγή βάσης – Άλλες μορφές των συναρτήσεων Green

Αν $|v\rangle$ είναι μια πλήρης βάση του συστήματος, τότε είναι:

$$|x\rangle = \sum_v |v\rangle \langle v|x\rangle = \sum_v \langle x|v\rangle^* |v\rangle = \sum_v \phi(x)^* |v\rangle$$

Όπου $\phi_v(x) = \langle x|v\rangle$ είναι η κυματοσυνάρτηση της κατάστασης $|v\rangle$. Επίσης οι καταστάσεις $|x\rangle$ και $|v\rangle$ δίνονται ως $|x\rangle = \psi^\dagger(x) |vac\rangle$, $|v\rangle = c_v^\dagger |vac\rangle$ όπου $|vac\rangle$ η κατάσταση του κενού. Από τα παραπάνω προκύπτει $\psi^\dagger(x) = \sum_v \phi_v^*(x) c_v^\dagger$ και $\psi(x) = \sum_v \phi_v(x) c_v$ αντίστοιχα. Αντικαθιστώντας στη σχέση 2.1 έχουμε:

$$G^R(x, t; x', t') = \sum_{v, v'} \phi_v(x) \phi_{v'}^*(x') G^R(v, t; v', t')$$

άρα

$$G^R(\nu, t; \nu', t') = -i\theta(t - t')\langle [c_\nu(t), c_\nu^\dagger(t')]_{\pm} \rangle \quad (2.5)$$

Στην περίπτωση που είναι $|\nu\rangle = |\vec{k}, \sigma\rangle$ δηλ. ο χώρος των ορμών, τότε είναι

$$\psi^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger$$

και

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} c_{\vec{k},\sigma}$$

όπου Ω ο όγκος του συστήματος. Για σύστημα αναλλοίωτο στην μετατόπιση αντικαθιστώντας στη σχέση 2.1 προκύπτει η συνάρτηση Green του \vec{k} -χώρου η οποία είναι διαγώνια ως προς το \vec{k} και συνδέεται με την χωροχρονική η οποία εξαρτάται από την ποσότητα $\vec{r} - \vec{r}'$ με την σχέση:

$$G^R(\vec{r} - \vec{r}', \sigma, t, \sigma', t') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} e^{-i(\vec{r}-\vec{r}')} G^R(\vec{k}, \sigma, t; \sigma', t'),$$

όπου

$$G^R(\vec{k}, \sigma, t; \sigma', t') = -i\theta(t - t')\langle [c_{\vec{k},\sigma}(t), c_{\vec{k},\sigma'}^\dagger(t')]_{\pm} \rangle \quad (2.6)$$

2.1.4 Μετασχηματισμός Fourier των συναρτήσεων Green

Στην περίπτωση που η Hamiltonian δεν εξαρτάται ρητά από το χρόνο, τότε η συνάρτηση Green εξαρτάται από την ποσότητα $t - t'$ και όχι ξεχωριστά από τα t και t' και ο μετασχηματισμός Fourier ορίζεται ως:

$$G(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} G(\omega) \quad (2.7)$$

Με τον αντίστροφο:

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G(t) \quad (2.8)$$

Στις παραπάνω εκφράσεις αφέθηκαν εκτός οι άλλοι δείκτες πλην του χρόνου.

2.1.5 Σύστημα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων

Εξετάζουμε την περίπτωση μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων. Η Hamiltonian στη βάση του χώρου των ορμών δίνεται από τη σχέση:

$$H_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma}$$

όπου \vec{k} η ορμή και σ το spin. Τότε η retarded συνάρτηση Green και η μετασχηματισμένη κατά Fourier αυτής δίνονται από τις εκφράσεις:

$$G_0^R(\vec{k}, \sigma, t - t') = -i\theta(t - t')e^{-i\xi_{\vec{k}}(t-t')} \quad (2.9)$$

και

$$G_0^R(\vec{k}, \sigma, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\vec{k}} + in} \quad (2.10)$$

όπου για τον υπολογισμό της $G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G(t)$ έγινε αναλυτική επέκταση της $\omega \rightarrow \omega + in$ με $n = 0^+$. Σημειώνουμε ότι, για σταθερό \vec{k} η retarded συνάρτηση Green έχει πόλο στο $\omega = \xi_{\vec{k}} - in$ δηλ στην διεγερμένη ενέργεια του συστήματος μετατοπισμένα απειροστά προς τα κάτω του πραγματικού άξονα στο μιγαδικό επίπεδο του ω . Αυτή είναι μια ιδιότητα της $G^R(\omega)$ που συμπυκνώνεται στα ακόλουθα: Είναι αναλυτική στο πάνω μισό μιγαδικό επίπεδο και οι πόλοι της βρίσκονται στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο προσφέροντας πληροφορίες για διεγερμένες ενεργειακές καταστάσεις του συστήματος.

2.1.6 Αναπαράσταση Lehmann

Θεωρούμε διαγώνια συνάρτηση Green δηλ.

$$G^R(v; t; v', t') \equiv G^R(v; t, t') = G^R(v; t - t')$$

και περιοριζόμαστε στην περίπτωση των φερμιονίων.

Αντικαθιστούμε στις εκφράσεις των G-greater και G-lesser τους τελεστές από την σχέση $A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$. Επίσης εισάγοντας κατάλληλα την μονάδα $I = \sum_m |m\rangle\langle m|$ όπου το πλήθος των $|m\rangle$ είναι το πλήθος των ιδιοκαταστάσεων της Hamiltonian του συστήματος με ιδιοτιμές E_m , δηλ. $H|m\rangle = E_m|m\rangle$, έχουμε:

$$G^>(v; t, t') = \frac{-i}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_m)(t-t')} |\langle m|c_v^\dagger|n\rangle|^2$$

$$G^<(v; t, t') = \frac{i}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} e^{i(E_n - E_m)(t-t')} |\langle m|c_v^\dagger|n\rangle|^2$$

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω εξισώσεις στην 2.4 παίρνουμε:

$$G^R(\nu; t, t') = -i\theta(t - t') \frac{1}{Z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) e^{i(E_n - E_m)(t - t')} |\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2 \quad (2.11)$$

Ο μετασχηματισμός Fourier της παραπάνω, με επέκταση της συχνότητας ω στο μιγαδικό επίπεδο δίνει:

$$G^R(\nu, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{|\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2}{\omega + E_n - E_m + i\eta} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \quad (2.12)$$

Η τελευταία εξίσωση είναι η αναπαράσταση Lehmann της $G^R(\nu, \omega)$ από την οποία εξάγουμε το παρακάτω συμπέρασμα: Οι πόλοι της $G^R(\nu, \omega)$ είναι απειροστά κάτω από τον πραγματικό άξονα στα $\omega = E_m - E_n + i\eta$ με την προϋπόθεση ότι $\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle \neq 0$. Επομένως από τους πόλους της $G^R(\nu, \omega)$ λαμβάνουμε πληροφορίες για τις διεγερμένες ενέργειες $E_m - E_n$ των ιδιοκαταστάσεων $|m\rangle$ και $|n\rangle$ οι οποίες συνδέονται μέσω του τελεστή c_ν^\dagger δηλ. ιδιοκαταστάσεις για τις οποίες η $|m\rangle$ έχει μία πεπερασμένη επικάλυψη με την κατάσταση $c_\nu^\dagger |n\rangle$. Επίσης η κατάσταση $|m\rangle$ έχει ένα επιπλέον σωματίδιο από την $|n\rangle$ και επομένως η $G^R(\nu, \omega)$ δίνει πληροφορίες για το φάσμα των διεγερμένων καταστάσεων ενός σωματιδίου.

2.2 Η φασματική συνάρτηση $A(\omega)$

Η φασματική συνάρτηση $A(\omega)$ ορίζεται από την παρακάτω σχέση:

$$A(\nu, \omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^R(\nu, \omega)\} \quad (2.13)$$

Με την βοήθεια της σχέσης $\text{Im}\left\{\frac{1}{x \pm i\eta}\right\} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x)$ προκύπτει ότι:

$$A(\nu, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} |\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \delta(\omega + E_n - E_m) \quad (2.14)$$

Συνεπώς μπορούμε να γράψουμε την $G^R(\nu, \omega)$ ως:

$$G^R(\nu, \omega) = \int d\omega' \frac{A(\nu, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \quad (2.15)$$

Εύκολα αποδεικνύονται οι παρακάτω σχέσεις:

$$iG^>(\nu, \omega) = 2\pi A(\nu, \omega)[1 - n_F(\omega)]$$

$$-iG^<(\nu, \omega) = 2\pi A(\nu, \omega)n_F(\omega)$$

όπου είναι $n_F(\omega) \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1}$

Αθροιστικοί κανόνες:

Οι *αθροιστικοί κανόνες* είναι ακριβή αποτελέσματα που προκύπτουν από την ολοκλήρωση μιας ποσότητας που εξαρτάται από την συχνότητα ως προς τη συχνότητα.

Έστω $\nu = (\vec{k}, \sigma)$ τότε έχουμε:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\vec{k}\sigma, \omega) &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} |\langle m | c_{\nu}^{\dagger} | n \rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta(\omega + E_n - E_m) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \{c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}\} | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_n} = 1 \end{aligned} \quad (2.16)$$

Από τις σχέσεις 2.14 και 2.16 προκύπτει ο αθροιστικός νόμος για τη φασματική συνάρτηση

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\vec{k}\sigma, \omega) = 1 \quad (2.17)$$

$$A(\vec{k}\sigma, \omega) \geq 1 \quad (2.18)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις μπορούμε να πούμε ότι η ποσότητα $A(\vec{k}\sigma, \omega) d\omega$ είναι η πιθανότητα ένα φερμιόνιο με ορμή \vec{k} να έχει ενέργεια στο παράθυρο $d\omega$ γύρω από το ω .

Για την περίπτωση όπου έχουμε μη αλληλεπιδρώντα φερμιόνια όπου η Hamiltonian έχει την μορφή της σχέσης $H_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma}$ είναι $A(\vec{k}\sigma, \omega) = \delta(\omega - \xi_{\vec{k}})$. Την ίδια μορφή έχει σε κάθε περίπτωση που η μορφή της Hamiltonian είναι τετραγωνική.

Όταν όμως έχουμε σύστημα με αλληλεπιδρώντα φερμιόνια, (Fermi liquids) τότε η φασματική συνάρτηση έχει την μορφή

$$A(\vec{k}\sigma, \omega) \simeq \frac{Z_k}{\pi} \frac{(1/2\tau_k)}{(\omega - \xi_k^*) + (1/2\tau_k)^2} + A_{\text{incoheren}}(\vec{k}\sigma, \omega)$$

Η ποσότητα τ_k είναι ο χρόνος ζωής, ξ_k^* είναι η renormalized ενέργεια και η Z_k είναι μια σταθερά με τιμές μεταξύ 0 και 1.

Αντί της συνάρτησης δέλτα τώρα υπάρχει ένα Lorentzian μέγιστο. Ο όρος $A_{\text{incoheren}}(\vec{k}\sigma, \omega)$ παριστάνει ένα συνεχές χωρίς μέγιστο ο οποίος υπάρχει όταν είναι $Z_k \neq 1$ για να ικανοποιείται ο αθροιστικός κανόνας. Οι οντότητες με ενέργεια ξ_k και χρόνο ζωής τ_k καλούνται οιονεί σωματίδια (quasi-particles) (QP).

2.3 Συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου (Matsubara)

Σε αντίθεση με την retarded συνάρτηση Green η οποία υπολογίζεται δύσκολα και μόνο με θεωρία διαταραχών, η Matsubara υπολογίζεται πιο εύκολα και μέσω αυτής μπορούμε να υπολογίσουμε όπως θα δούμε την retarded και τη φασματική συνάρτηση $A(\omega)$.

2.3.1 Ορισμός Matsubara συνάρτηση Green

Η συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου ορίζεται ως εξής:

$$G(v, \tau; v', \tau') \equiv \left\langle T_\tau (c_v(\tau) c_{v'}^\dagger(\tau')) \right\rangle \quad (2.19)$$

Όπου είναι $0 < \tau, \tau' < \beta$ και οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής είναι σε αναπαράσταση Heisenberg $A(\tau) \equiv e^{H\tau} A e^{-H\tau}$ και $A^\dagger(\tau) \equiv e^{H\tau} A^\dagger e^{-H\tau}$. Είναι δηλ. $\tau = it$ με τ πραγματικός και t φανταστικός.

Ο τελεστής T_τ λέγεται τελεστής χρονολογικής διάταξης και ορίζεται ως εξής:

$$T_\tau \equiv \begin{cases} c_v(\tau) c_{v'}^\dagger(\tau') & \text{εάν } \tau > \tau', \\ \epsilon c_{v'}^\dagger(\tau') c_v(\tau) & \text{εάν } \tau < \tau' \end{cases}$$

Όπου είναι $\epsilon = -1$ για φερμιόνια και $\epsilon = 1$ μποζόνια αντίστοιχα.

Αποδεικνύεται ότι εξαρτάται μόνο από την διαφορά $\tau - \tau'$, δηλ.

$$G(v, \tau; v', \tau') = G(v, v'; \tau) = \left\langle T_\tau (c_v(\tau) c_{v'}^\dagger(0)) \right\rangle$$

Εύκολα αποδεικνύεται ότι είναι περιοδική με περίοδο 2β .

Ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier της $G(v, v'; \tau)$ είναι

$$G(v, v'; \tau) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(v, v'; i\omega_n) \quad (2.20)$$

Όπου είναι:

$$\mathcal{G}(v, v'; i\omega_n) = -\int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} G(v, v'; \tau) \quad (2.21)$$

Οι ω_n ονομάζονται συχνότητες Matsubara και δίνονται από τη σχέση:

$$\omega_n = \begin{cases} \frac{(2n+1)\pi}{\beta} & \text{για φερμιόνια,} \\ \frac{2n\pi}{\beta} & \text{για μποζόνια} \end{cases} \quad (2.22)$$

Όπου είναι $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Για τα διαγώνια στοιχεία της συνάρτησης φανταστικού χρόνου έχουμε:

$$G(v, \tau) = \left\langle c_v(\tau) c_v^\dagger(0) \right\rangle = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{\beta E_n} e^{(E_n - E_m)\tau} |\langle m | c_v^\dagger | n \rangle|^2$$

Ο δε μετασχηματισμός Fourier αυτής είναι:

$$\mathcal{G}(v, i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \frac{|\langle m|c_v^\dagger|n\rangle|^2}{i\omega_n + E_n + E_m} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m})$$

Συγκρίνοντας την παραπάνω σχέση με την 2.12 έχουμε ότι:

$$G^R(\omega) = \mathcal{G}(\omega + in) \quad (2.23)$$

Επομένως υπολογίζοντας την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου, βρίσκουμε το μετασχηματισμό Fourier αυτής και στην συνέχεια την retarded συνάρτηση Green.

Για σύστημα μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων όπου είναι $H_0 = \sum_v \xi_v c_v^\dagger c_v$ είναι:

$$G^0(v; \tau) = e^{-\xi_v \tau} \{ \theta(\tau)(1 - n_F(\xi_v)) - \theta(-\tau)n_F(\xi_v) \}$$

και αντίστοιχα

$$\mathcal{G}^0(v, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_v}$$

2.3.2 Σχέση Matsubara συνάρτησης Green και φασματικής συνάρτησης

Από τις σχέσεις 2.20 και 2.23, αφήνοντας εκτός τους δείκτες πλην του χρόνου τ , παίρνουμε:

$$G(\tau) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G^R(i\omega_n)$$

Με την βοήθεια της σχέσης 2.15 έχουμε:

$$G(\tau) = \int d\omega \left(-\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \omega} \right) A(\omega)$$

Όμως για την περίπτωση των φερμιονίων ισχύει:

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \omega} = \frac{e^{-\omega \tau}}{e^{-\beta \omega} + 1}$$

Συνεπώς προκύπτει η σχέση που συνδέει την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου με την φασματική συνάρτηση και είναι:

$$G(\tau) = \int d\omega \frac{e^{-\omega \tau}}{e^{-\beta \omega} + 1} A(\omega) \quad (2.24)$$

2.3.3 Υπολογισμός της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου - Διαγράμματα Feynman

Έστω ένα σύστημα πολλών σωματιδίων περιγράφεται από τη Hamiltonian $H = H_0 + H_1$, όπου η H_0 είναι επιλύσιμη, δηλ. μπορούμε να προσδιορίσουμε τις ιδιοκαταστάσεις και τις αντίστοιχες ιδιοτιμές του. Τότε αποδεικνύεται ότι η συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου ενός σωματιδίου δίνεται από την σχέση:

$$G(v, v'; \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n \quad (2.25)$$

$$\times \langle T_{\tau} \{ \bar{c}_v(\tau) \bar{c}_v^{\dagger}(0) H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n) \} \rangle_0^{\text{συνεκτικά}}$$

Όπου οι τελεστές $\bar{A}(\tau)$ είναι σε αναπαράσταση Heisenberg με Hamiltonian την H_0 και οι μέσες τιμές $\langle \dots \rangle_0$ είναι επίσης ως προς τις ιδιοτιμές της H_0 . Το άθροισμα περιλαμβάνει μόνο τα συνεκτικά διαγράμματα.

Ένα χρήσιμο εργαλείο για τον υπολογισμό του $G(\tau)$ είναι το θεώρημα του Wick.

Θεώρημα του Wick

Έστω οι τελεστές δημιουργίας $c_{v'_1}^{\dagger}, \dots, c_{v'_n}^{\dagger}$ και αντίστοιχα οι τελεστές καταστροφής c_{v_1}, \dots, c_{v_n} που υπακούν σχέσεις αντιμετάθεσης φερμιονικών τελεστών, τότε ισχύει:

$$\left\langle T_{\tau} \{ c_{v_1}(\tau_1) \dots c_{v_n}(\tau_n) c_{v'_n}^{\dagger}(\tau'_n) \dots c_{v'_1}^{\dagger}(\tau'_1) \} \right\rangle_0$$

$$= \sum_{k=1}^n (-1)^k \left\langle T_{\tau} (c_{v_1}(\tau_1) c_{v'_k}^{\dagger}(\tau'_k)) \right\rangle_0 \times$$

$$\left\langle T_{\tau} \{ c_{v_2}(\tau_2) \dots c_{v_n}(\tau_n) c_{v'_n}^{\dagger}(\tau'_n) \dots c_{v'_{(k+1)}}^{\dagger}(\tau'_{(k+1)}) c_{v'_{(k-1)}}^{\dagger}(\tau'_{(k-1)}) \dots c_{v'_1}^{\dagger}(\tau'_1) \} \right\rangle_0 \quad (2.26)$$

Δεδομένου ότι η H_1 εκφράζεται ως γινόμενο τελεστών δημιουργίας και καταστροφής εφαρμόζοντας διαδοχικά το θεώρημα του Wick στη σχέση 2.26 καταλήγουμε στο ότι η $G(\tau)$ είναι άθροισμα όρων που ο κάθε ένας είναι γινόμενο των $G_0(\tau)$ της συνάρτησης Matsubara ενός σωματιδίου που αναφέρεται στο σύστημα του οποίου η Hamiltonian είναι η H_0 . Κάθε όρος του αθροίσματος είναι ένα πλήθος διαγραμμάτων Feynman και υπολογίζονται με τους αντίστοιχους κανόνες Feynman του προβλήματος.

3

Διαγραμματική Μέθοδος Monte Carlo

Στο κεφάλαιο αυτό θα περιγράψουμε την μέθοδο διαγραμματική Monte Carlo (diag-MC). Θα αναφερθούμε στα προβλήματα που αναδύονται κατά την εφαρμογή της και τους τρόπους θεραπείας αυτών. Είναι μια μέθοδος με ευρύ πεδίο εφαρμογής της, όμως για λόγους κατανόησης θα περιοριστούμε στον τρόπο εφαρμογής της σε συγκεκριμένα παραδείγματα.

3.1 Περιγραφή της Διαγραμματικής μεθόδου Monte Carlo

Η diag-MC [13, 14] είναι μια μέθοδος όπου με υπολογιστικό τρόπο μπορούμε να υπολογίσουμε τη συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου, με τρόπο απαλλαγμένο από συστηματικά λάθη. Μια τυπική μορφή της Matsubara συνάρτησης Green με την εφαρμογή των κανόνων Feynman είναι η παρακάτω:

$$G(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{\xi_n\}} I_n^{(\xi_n)}(\tau) \quad (3.1)$$

όπου οι ποσότητες $I_n^{(\xi_n)}$ δίνονται από τη σχέση:

$$I_n^{(\xi_n)}(\tau) = \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau). \quad (3.2)$$

Είναι μια σειρά ολοκληρωμάτων όπου αυξάνεται το πλήθος των υπό ολοκλήρωση ποσοτήτων.

Ας θεωρήσουμε ότι αναφερόμαστε στην περίπτωση της Matsubara συνάρτησης Green ενός ηλεκτρονίου το οποίο αλληλεπιδρά με τα φωνόνια ενός κρυστάλλου δηλ, $G_{\vec{k}}(\tau) = \langle T_{\tau}(c_{\vec{k}}(\tau)c_{\vec{k}}^{\dagger}(0)) \rangle$. Τότε η ποσότητα $F_n^{\xi_n}$ είναι εν γένει γινόμενο από φερμιονικούς και μποζονικούς ελεύθερους διαδότες και κορυφών αλληλεπίδρασης. Το n αναφέρεται στο πλήθος

των μποζονικών διαδοτών δηλ. των φωνονίων που εκπέμπονται και απορροφούνται από το ηλεκτρόνιο, και ο δείκτης (ξ_n) αναφέρεται στα διάφορα διαγράμματα Feynman ίδιας τάξης. Οι δε μεταβλητές $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n\}$ είναι το πλήθος των εσωτερικών δεικτών των διαγραμμάτων Feynman. Η diag-MC στηρίζεται στην αρχή του αλγόριθμου Metropolis όπου η συνάρτηση βάρους είναι η ποσότητα

$$F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n$$

Πρέπει να επινοήσουμε μια διαδικασία η οποία να είναι εργοδική, δηλ. να μεταβαίνει από οποιαδήποτε μορφή $F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau)$ στη μορφή $F_{n'}^{(\xi_{n'})}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{n'}; \tau)$ με μη μηδενική πιθανότητα.

3.1.1 Υπολογισμός της $G(\tau)$ με σταθερό χρόνο τ

Τα τυπικά updates της μεθόδου είναι δύο.

A. Μετάβαση από διάγραμμα τάξης n σε διάγραμμα της τάξης $n + 1$.

$$F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau) \xrightarrow{A} F_{n+1}^{(\xi_{n+1})}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, \vec{x}_{n+1}; \tau)$$

Αυτή η διαδικασία συνοδεύεται και με την επιλογή των συντεταγμένων \vec{x}_{n+1} από τις επιτρεπόμενες τιμές τους.

Αν είναι $\vec{x}_{n+1} = (y_1, y_2, \dots, y_l)$ τότε για κάθε μεταβλητή y_i , με $i = 1, \dots, l$ ορίζουμε αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας $w_i(y_i)$ με $i = 1, \dots, l$ με τους περιορισμούς:

$$w_i(y_i) \geq 0$$

$$\int_{y_{i,\min}}^{y_{i,\max}} w_i(y_i) dy_i = 1$$

όπου η συνάρτηση

$$r_i = c_i(y_i) = \int_{y_{i,\min}}^{y_i} w_i(y'_i) dy'_i$$

αντιστρέφεται σχετικά εύκολα και δίνει $y_i = c_i^{-1}(r_i)$. Είναι $y_{i,\min}$ και $y_{i,\max}$ η ανώτερη και η κατώτερη επιτρεπόμενη τιμή της y_i . Για τον προσδιορισμό του \vec{x}_{n+1} , ο γεννήτορας τυχαίων αριθμών παράγει τα r_i , με $(0 < r_i < 1)$ δηλ. το \vec{r}_{n+1} και από τις αντίστοιχες αντίστροφες συναρτήσεις c_i^{-1} υπολογίζονται οι συνιστώσες y_i .

B. Μετάβαση από διάγραμμα n τάξης, σε διάγραμμα $n - 1$ τάξης

$$F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau) \xrightarrow{B} F_{n-1}^{(\xi_{n-1})}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{n-1}; \tau)$$

Αυτή η διαδικασία δεν συνοδεύεται από αλλαγή μεταβλητών.

Η αποδοχή ή όχι για την διαδικασία (A) γίνεται με πιθανότητα $p = \max(x, 1)$ όπου είναι

$$x = \frac{p_{\text{acc}}(n \rightarrow n+1)}{p_{\text{acc}}(n+1 \rightarrow n)} = \frac{p_B^{\text{prob}}}{p_A^{\text{prob, tot}}} \times \frac{F_{n+1}^{(\xi_{n+1})}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, \vec{x}_{n+1}; \tau) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n d\vec{x}_{n+1}}{F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n}$$

Για κάθε n ορίζουμε μια πιθανότητα, έστω q , αν θα δοκιμάσουμε A διαδικασία και $1 - q$ αν θα δοκιμάσουμε B διαδικασία. Τότε είναι $p_A^{\text{prob, tot}}$ είναι το γινόμενο q επί την πιθανότητα δοκιμής της μορφής του διαγράμματος ξ_{n+1} , το οποίο καλούμε p_A^{prob} , επί την πιθανότητα δοκιμής της μεταβλητής \vec{x}_{n+1} , η οποία είναι $\frac{d\vec{x}_{n+1}}{1}$. Η p_B^{prob} είναι το γινόμενο $1 - q$ επί την πιθανότητα δοκιμής του διαγράμματος ξ_n αν ήμασταν στην $n + 1$ και μεταβαίναμε στην n . Η δε p_{acc} η πιθανότητα αποδοχής της προτεινόμενης μετάβασης κάθε φορά. Τελικά προκύπτει:

$$x = \frac{p_{\text{acc}}(n \rightarrow n+1)}{p_{\text{acc}}(n+1 \rightarrow n)} = \frac{p_B^{\text{prob}}}{p_A^{\text{prob}}} \times \frac{F_{n+1}^{(\xi_{n+1})}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, \vec{x}_{n+1}; \tau)}{w(\vec{x}_{n+1}) F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau)} \quad (3.3)$$

Όπου είναι $w(\vec{x}_{n+1}) = w_1(y_1) \dots w_l(y_l)$.

Αντίστροφα ορίζεται το x όταν εξετάζεται η περίπτωση αποδοχής της μετάβασης από τάξη n σε τάξη $n - 1$.

Κατά τη διαδικασία εφαρμογής του αλγόριθμου Metropolis καταγράφουμε τα πλήθη N_i με $i = 0, 1, \dots$. Η τιμή κάθε όρου της σειράς 3.1 δίνεται από την σχέση:

$$I_n(\tau) = \frac{N_n}{N_0} I_0(\tau)$$

Όπου είναι $I_0(\tau) = G^0(\tau)$ ο ελεύθερος διαδότης και είναι γνωστή ποσότητα. Συνεπώς είναι:

$$G(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N_n}{N_0} G^0(\tau) \quad (3.4)$$

Συνήθως η ποσότητα I_0 είναι πολύ μικρή σε σχέση με τις υπόλοιπες με συνέπεια το στατιστικό λάθος για το πλήθος N_0 να είναι πολύ μεγάλο και επομένως και της μέτρηση του $G(\tau)$. Αυτό είναι ένα πρόβλημα της μεθόδου και παρακάτω θα δούμε πώς θεραπεύεται.

3.1.2 Υπολογισμός του Ιστογράμματος της $G(\tau)$

Όταν θέλουμε να υπολογίσουμε το ιστόγραμμα της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου, τότε επιπλέον των αναφερόμενων στην περίπτωση υπολογισμού με σταθερό χρόνο, κάνουμε δειγματοληψία και στο χρόνο τ . Οι προηγούμενες δύο διαδικασίες που περιγράψαμε, συνοδεύονται και απο επιλογή χρόνου με κατανομή $w_0(\tau)$ στα επιτρεπόμενα όρια επιλογής κάθε φορά

του χρόνου τ . Τα όρια είναι συνήθως από το μέγιστο χρονικό άκρο των φωνονικών διαδοτών μέχρι μια μέγιστη τιμή τ_{\max} ή μέχρι το ∞ . Τότε κατά την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis είναι:

$$x = \frac{p_{\text{acc}}(n \rightarrow n+1)}{p_{\text{acc}}(n+1 \rightarrow n)} = \frac{p_B^{\text{prob}}}{p_A^{\text{prob}}} \times \frac{F_{n+1}^{(\xi_{n+1})}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n, \vec{x}_{n+1}; \tau')}{F_n^{(\xi_n)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; \tau)} \times \frac{w_0(\tau)}{w_0(\tau')w(\vec{x}_{n+1})}$$

Χωρίζουμε το διάστημα $[0, \tau_{\max}]$ σε L ίσα διαστήματα μήκους $\Delta\tau_i = \tau_i - \tau_{i-1}$. Κατά την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis καταγράφουμε το πλήθος N_i των στοιχείων της ακολουθίας Markov που ανήκουν στο αντίστοιχο διάστημα $[\tau_{i-1}, \tau_i]$

Η μέση τιμή της $G(\tau)$ σε κάθε χρονικό διάστημα δίνεται από τη σχέση:

$$\mathcal{G}(i) = \frac{1}{\Delta\tau_i} \int_{(i-1)\Delta\tau_i}^{i\Delta\tau_i} G(\tau) d\tau \quad \mu\epsilon \quad i = 1, \dots, L$$

Είναι $\mathcal{G}(1) \simeq G^0(0)$ και συνεπώς

$$\mathcal{G}(i) = \frac{N_i}{N_1} G^0(0)$$

Και εδώ παρουσιάζεται το ίδιο πρόβλημα με αυτό της μέτρηση της $G(\tau)$ με σταθερό χρόνο. Το πλήθος N_1 είναι πολύ μικρό με συνέπεια να έχουμε μεγάλο στατιστικό λάθος για αυτό, το οποίο διαδίδεται σε όλο το ιστόγραμμα. Μάλιστα όσο προσπαθούμε να κάνουμε το ιστόγραμμα για μεγαλύτερες τιμές του τ_{\max} τόσο το πρόβλημα για ευνόητους λόγους είναι εντονότερο, με συνέπεια να μην μπορούμε να πάμε σε μεγάλους χρόνους.

Επισημαίνεται επίσης ότι η επιλογή των διάφορων κατανομών γίνεται, όσο αυτό είναι εφικτό, ώστε να μοιάζουν στην μορφή με τις ποσότητες $F_n^{\xi_n}$ (reweighting) ώστε να αυξάνεται ο ρυθμός αποδοχής κατά την διαδικασία Monte Carlo.

3.1.3 Η Standard-diag-MC μέθοδος

Όπως έχουμε προαναφέρει ουσιαστικό πρόβλημα της diag-MC μεθόδου είναι η πολύ μικρή τιμή του πλήθους N_1 , με συνέπεια να έχει η μέτρηση αυτού μεγάλο στατιστικό σφάλμα το οποίο διαδίδεται σε όλες τις μετρούμενες ποσότητες.

Για την περίπτωση υπολογισμού του ιστογράμματος της $G(\tau)$, επειδή συνήθως η τιμή της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου αυξάνει εκθετικά με το χρόνο τ , για την διόρθωση του προβλήματος γίνεται χρήση ενός τεχνητού χημικού δυναμικού μ με τιμή λίγο μικρότερη από την ελάχιστη τιμή του ενεργειακού φάσματος του συστήματος (ενέργεια της βασικής κατάστασης). Η diam-MC εφαρμόζεται στην $G(\tau)' = e^{\mu\tau} G(\tau)$, όπου πλέον το πλήθος N_1 δεν είναι μικρό, και έχει σαν αποτέλεσμα τον δραστικό περιορισμό του στατιστικού σφάλματος. Η μέθοδος αυτή θα αποκαλείται standard-DMC για το υπόλοιπο περιεχόμενο.

3.2 Τεχνικές Flat Histogram

Εναλλακτικά της standard-DMC, για την λύση του προβλήματος της diag-MC μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τεχνικές flat histogram [15–17] οι οποίες μπορούν να συνδυαστούν με την diag-MC και να έχουμε όπως θα δούμε πολύ καλά αποτελέσματα.

Στην περίπτωση κλασσικού Monte Carlo, κάνοντας δειγματοληψία από μια κατανομή με στατιστικό βάρος $w_B(k) = w_B(E^k) = e^{-E^k}$ παράγουμε την κατανομή

$$P(E) = c_\beta w_B(E) = c_\beta n(E) e^{-\beta E}$$

Όπου ο συντελεστής c_β προσδιορίζεται από τη σχέση κανονικοποίησης της $P(E)$. Εάν η κατανομή έχει διακυμάνσεις και σε κάποια περιοχή, έστω της E_1 παρουσιάζει πολύ μικρή τιμή σε σχέση με τις υπόλοιπες περιοχές του φάσματος της E , τότε κατά την διαδικασία παραγωγής της $P(E)$ η επίσκεψη στην περιοχή της E_1 είναι εξαιρετικά πολύ μικρή έως απίθανη. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το στατιστικό σφάλμα της $P(E_1)$ να εξαιρετικά μεγάλο. Επομένως η μέτρηση μιας ποσότητας της οποίας η τιμή εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την $P(E_1)$ θα έχει εξαιρετικά μεγάλο στατιστικό σφάλμα.

Για τη θεραπεία αυτού του προβλήματος αναπτύχθηκαν διάφορες θεωρίες με κύριο χαρακτηριστικό την τροποποίηση της αρχικής κατανομής πολλαπλασιάζοντας με κατάλληλους αριθμούς ώστε αυτή να γίνει επίπεδη (flat). Η δειγματοληψία τώρα γίνεται στην τροποποιημένη (flat) κατανομή. Πολλαπλασιάζοντας το αποτέλεσμα της διαδικασίας με τους αντίστροφους αριθμούς παίρνουμε την αρχική μας κατανομή, όπου το στατιστικό λάθος της $P(E)$ έχει περιοριστεί δραστικά.

Αυτές οι τεχνικές λέγονται flat histogram. Παρακάτω περιγράφουμε δύο από αυτές τις μεθόδους.

3.2.1 Αναδρομική Πολλαπλή Κανονικοποίηση (Multicanonical Recursion)

Έστω θέλουμε να παράγουμε μια κατανομή $P(E)$. Θέτουμε αρχικά $w^0(k) = 1$ και τροποποιούμε το βάρος της δειγματοληψίας σε

$$w_B(k) \longrightarrow w_B(k) w^0(k)$$

Παράγουμε την κατανομή - ιστόγραμμα $H^0(E)$ και ορίζουμε νέα ποσότητα $w^1(k) = \frac{w^0(k)}{H^0(E^k)}$. Τροποποιούμε εκ νέου το στατιστικό βάρος σε

$$w_B(k) \longrightarrow w_B(k) w^1(k)$$

Παράγουμε την κατανομή - ιστόγραμμα $H^1(E)$ και ορίζουμε νέα ποσότητα $w^2(k) = \frac{w^1(k)}{H^1(E^k)}$. Τροποποιούμε πάλι το στατιστικό βάρος και επαναλαμβάνουμε την διαδικασία δειγματοληψίας κ.ο.κ.

Επομένως ο τροποποιητικός παράγοντας του στατιστικού βάρους δίνεται από την αναδρομική σχέση

$$w^{n+1}(k) = \frac{w^n(k)}{H^n(E^k)}$$

Η διαδικασία επαναλαμβάνεται με σχετικά μικρό πλήθος προσομοιώσεων ελέγχοντας κάθε φορά το λόγο $\frac{H_{\min}^n}{H_{\max}^n}$. Αν ο συγκεκριμένος λόγος γίνει $\frac{H_{\min}^n}{H_{\max}^n} > \frac{1}{10}$ τότε το $w^q(k)$ προσδιορίζει ένα τροποποιημένο στατιστικό βάρος $w_{mu}(k) = w_B(k)w^q(k)$ που είναι και το τελικό. Με το τελικό στατιστικό βάρος επαναλαμβάνουμε την διαδικασία με σημαντικό αριθμό προσομοιώσεων. Πολλαπλασιάζοντάς κατάλληλα το ιστόγραμμα που παράγεται παίρνουμε την κατανομή που ζητάμε.

3.2.2 Μέθοδος των Wang και Landau (W-L)

Η ιδέα των Wang και Landau ήταν η εξής: Αν για ένα σύστημα εκτελέσουμε τυχαίο περιπατητή όπου η πιθανότητα να επισκεφτεί μια δοσμένη ενέργεια E είναι ανάλογη του $\frac{1}{n(E)}$, δηλ. αντιστρόφως ανάλογη της πυκνότητας καταστάσεων του συστήματος, τότε το ιστόγραμμα της κατανομής της ενέργειας θα είναι επίπεδο. Αυτό επιτυγχάνεται με μια διαδικασία κατά τη διάρκεια της οποίας έχουμε την συστηματική τροποποίηση της πυκνότητας των καταστάσεων και συγχρόνως η τροποποιημένη πυκνότητα των καταστάσεων προσεγγίζει την αληθινή τιμή. Σε κάθε βήμα τροποποιείται η πυκνότητα των καταστάσεων και ο τυχαίος περιπατητής συνεχίζει να εκτελείται με την αναβαθμισμένη πυκνότητα των καταστάσεων.

Πώς εφαρμόζεται η μέθοδος: Επειδή δεν γνωρίζουμε a-priori την πυκνότητα καταστάσεων $n(E)$ θέτουμε αρχικά $n(E) = 1$ για όλες τις τιμές του E . Αρχίζει να εκτελείται ο τυχαίος περιπατητής και η πιθανότητα για δοσμένο επίπεδο της ενέργειας είναι $\frac{1}{n(E)}$. Τότε μια μετάβαση από την κατάσταση E_1 στην κατάσταση E_2 γίνεται αποδεχτεί με πιθανότητα

$$P(E_1 \rightarrow E_2) = \min \left[\frac{n(E_1)}{n(E_2)}, 1 \right]$$

Επίσης κάθε φορά που ο περιπατητής επισκέπτεται μία ενεργειακή κατάσταση E , η υπάρχουσα $n(E)$ τροποποιείται κατά ένα παράγοντα $f_i > 1$ δηλ. γίνεται $n(E) \rightarrow f_i n(E)$. Πρακτικά έχουμε $\ln[n(E)] \rightarrow \ln[n(E)] + \ln f_i$. Μετά από ένα σχετικά μικρό αριθμό επαναλήψεων ελέγχουμε αν το ιστόγραμμα $H(E)$ είναι ‘επίπεδο’. Με την έννοια “επίπεδο” εννοούμε ότι ο λόγος όλων των τιμών του ιστογράμματος προς τη μέση τιμή τους να είναι περιέχεται στο διάστημα $(1 - x, 1 + x)$. Όσο μικρότερη είναι η τιμή του x τόσο μικρότερο είναι το σφάλμα των αποτελεσμάτων μας. Μια τυπική τιμή του x είναι μεταξύ του 0.03 και 0.10.

Εφόσον το ιστόγραμμα είναι επίπεδο, επαναλαμβάνουμε την προηγούμενη διαδικασία με τροποποιημένο τον παράγοντα f_i σε $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$. Αρχικά συνήθως επιλέγουμε $f_0 = e$, όπου e η βάση των νεπερίων λογαρίθμων. Η όλη διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι ο παράγοντας

f_i να είναι πολύ κοντά στην μονάδα. Τότε η πυκνότητα των καταστάσεων προσεγγίζει την αληθινή. Το σφάλμα της μέτρησης εξαρτάται επίσης από το πόσο κοντά στην μονάδα είναι η τελική τιμή του πολλαπλασιαστικού παράγοντα.

4

Μέθοδοι Αντιστροφής, Αναλυτική Συνέχιση

Με την εφαρμογή των καβαντικών αλγορίθμων Monte Carlo μπορούμε να υπολογίσουμε διάφορες δυναμικές ποσότητες ενός συστήματος πολλών σωματιδίων. Όπως έχουμε δει στο προηγούμενο κεφάλαιο μια ποσότητα η οποία υπολογίζεται με την διαγραμματική Monte Carlo, είναι η συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$. Γνωρίζουμε ότι η συνάρτηση αυτή συνδέεται με τη φασματική συνάρτηση του συστήματος $A(\omega)$, η οποία είναι μια ποσότητα που μπορεί να προσδιοριστεί πειραματικά. Αν για ένα σύστημα γνωρίζουμε την αναλυτική έκφραση της $G(\tau)$, τότε μπορούμε εύκολα ή δύσκολα να προσδιορίσουμε μονοσήμαντα τη φασματική συνάρτηση $A(\omega)$ η οποία είναι και η μία και μοναδική φασματική συνάρτηση του συστήματος. Η διαδικασία αυτή είναι μια αντιστροφή και λέγεται αναλυτική συνέχιση διότι είναι μια διαδικασία που μας μεταφέρει από τον φανταστικό στον πραγματικό χρόνο. Τα αποτελέσματα όμως με την εφαρμογή του κβαντικού Monte Carlo είναι ένα πλήθος διακριτών τιμών της $G(\tau)$ με τα αντίστοιχα στατιστικά σφάλματα. Τίθεται το πρόβλημα αν με αυτά τα δεδομένα μπορούμε να προσδιορίσουμε τη φασματική συνάρτηση. Η απάντηση είναι όχι, διότι το αντίστοιχο πλήθος των λύσεων είναι άπειρο και γενικά μια αριθμητική λύση αυτού του προβλήματος είναι αδύνατη. Ένα τέτοιο πρόβλημα λέγεται άρρωστα τιθέμενο (ill-posed) πρόβλημα. Όμως τίθεται ο εξής προβληματισμός: *Μπορούμε να ορίσουμε κάποια κριτήρια με βάση τα οποία μπορεί να επιλεγεί μία από τις άπειρες $A(\omega)$ ως η πιο πιθανή να είναι αυτή η μοναδική φασματική συνάρτηση του συστήματος;*

Στη βάση του παραπάνω προβληματισμού αναπτύχθηκε η μέθοδος “Μέθοδος Μέγιστης Εντροπίας” (Maximum Entropy Method) (MEM) [20]. Είναι μια μέθοδος με ευρεία εφαρμογή στην αστρονομία, κρυσταλλογραφία, έρευνα αγοράς, κ.λ.π. Η MEM στηρίζεται στην Bayesian λογική (Θεώρημα του Bayes των πιθανοτήτων) συνδυάζοντας τα δεδομένα από το κβαντικό

Monte Carlo για την $G(\tau)$ με όλη την a-priori γνώση της $A(\omega)$ του συστήματος. Επίσης μια εναλλακτική μέθοδος της MEM είναι η μέθοδος “Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία” (Stochastic Analytical Inference) (SAI) [18, 19, 28, 29]. Παρακάτω περιγράφουμε τις δύο μεθόδους με περισσότερη έμφαση στην (SAI) την οποία χρησιμοποιούμε για την αντιστροφή των δεδομένων μας της $G(\tau)$ των προβλημάτων που θα εξετάσουμε, αφού πρώτα ορίσουμε την αναλυτική συνέχιση.

4.1 Αναλυτική Συνέχιση - Αρχή Ελαχίστων Τετραγώνων

Η σχέση που συνδέει την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου με τη φασματική συνάρτηση είναι:

$$G(\tau) = \int d\omega K(\tau, \omega) A(\omega) \quad (4.1)$$

Όπου στην περίπτωση των φερμιονίων είναι

$$K(\tau, \omega) = \frac{e^{-\omega\tau}}{e^{-\beta\omega} + 1}$$

Όπως έχουμε προαναφέρει εφαρμόζοντας κβαντικό Monte Carlo παίρνουμε πληροφορία για ένα πλήθος σημείων της $G(\tau)$. Πρακτικά χωρίζουμε το χρονικό διάστημα $[0, \tau_{\max}]$ σε L διαστήματα. Με το κβαντικό Monte Carlo παίρνουμε ένα πλήθος μετρήσεων N_d . Κάθε μέτρηση δίνει ένα σύνολο τιμών που η μέση τιμή της $G(\tau)$ σε κάθε ένα απο τα L διαστήματα. Δηλαδή η πληροφορία του κβαντικού Monte Carlo μπορεί να εκφραστεί με έναν πίνακα διαστάσεων $L \times N_d$, όπου το στοιχείο $G^{(d)}(i, j)$ με $i = 1, 2, \dots, L$ και $j = 1, 2, \dots, N_d$ είναι η μέση τιμή της $G(\tau)$ στο $-i$ διάστημα που προέκυψε κατά την j -μέτρηση. Στις μεθόδους MEM και SAI εμπλέκεται η ποσότητα χ^2 , η οποία εξαρτάται από τα δεδομένα και την συσχέτιση μεταξύ τους.

Μπορούμε να φροντίσουμε ώστε τα αποτελέσματα διαφορετικών μετρήσεων για το ίδιο χρονικό διάστημα, δηλ. τα δεδομένα $G^{(d)}(k, j)$ με $j = 1, 2, \dots, N_d$ να είναι ασυσχέτιστα μεταξύ τους. Όμως τα δεδομένα που αφορούν διαφορετικά χρονικά διαστήματα έχουν ισχυρή συσχέτιση μεταξύ τους. Για το λόγο αυτό υπολογίζουμε τον πίνακα συνδιακύμανσης (covariance) C των δεδομένων που είναι ένας τετραγωνικός πίνακας $L \times L$ και τα στοιχεία του δίνονται από την σχέση:

$$C(k, l) = \frac{1}{N_d(N_d - 1)} \sum_{j=1}^{N_d} ({}^{(d)}(k) - \bar{G}^{(d)}(k, l)) ({}^{(d)}(k) - \bar{G}^{(d)}(k, l)) \quad (4.2)$$

$$k, l = 1, 2, \dots, L$$

Όπου $\bar{G}^{(d)}(k)$ είναι η μέση τιμή των δεδομένων για το k -διάστημα, δηλ.

$$\bar{G}^{(d)}(k) = \frac{1}{N_d} \sum_{j=1}^{N_d} G^{(d)}(k, j)$$

Ολοκληρώνοντας την σχέση (4.1) για κάθε χρονικό διάστημα i προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta\tau_i} \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} d\tau G(\tau) &= \frac{1}{\Delta\tau} \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} d\tau \int d\omega K(\tau, \omega) A(\omega) \Rightarrow \\ \mathcal{G}(i) &= \int d\omega \bar{K}(i, \omega) A(\omega) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Όπου είναι $\mathcal{G}(i) = \frac{1}{\Delta\tau_i} \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} d\tau G(\tau)$ και $\bar{K}(i, \omega) = \frac{1}{\Delta\tau} \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} d\tau K(\tau, \omega)$

Τότε το χ^2 δίνεται από την σχέση:

$$\chi^2 = (\bar{G}^{(d)} - G)^T C^{-1} (\bar{G}^{(d)} - G) \quad (4.4)$$

Όπου είναι $\bar{G}^{(d)} \equiv (\bar{G}^{(d)}(1), \bar{G}^{(d)}(2), \dots, \bar{G}^{(d)}(L))^T$ και $G \equiv (\mathcal{G}(1), \mathcal{G}(2), \dots, \mathcal{G}(L))^T$.

Προσδιορίζουμε τον ορθογώνιο πίνακα O και τον διαγώνιο d ώστε να ισχύει $C = O d O^T$ και τότε η σχέση (4.4) γράφεται στην πιο κομψή μορφή:

$$\chi^2 = (\bar{G}_f^{(d)} - G_f)^T (\bar{G}_f^{(d)} - G_f) \quad (4.5)$$

με $\bar{G}_f^{(d)} = d^{-1/2} O^T \bar{G}^{(d)}$ και $G_f = d^{-1/2} O^T G$. Στην περίπτωση που τα δεδομένα είναι ασυσχέτιστα και για τα διάφορα χρονικά διαστήματα, τότε ο πίνακας συνδιακύμανσης είναι διαγώνιος με διαγώνια στοιχεία τις κανονικές διακυμάνσεις

$$\sigma^2(k) = \frac{1}{N_d(N_d - 1)} \sum_{j=1}^{N_d} (\bar{G}^{(d)}(k) - G^{(d)}(k, j))^2$$

Στην περίπτωση αυτή το χ^2 είναι:

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^L \frac{(\bar{G}^{(d)}(k) - \mathcal{G}(k))^2}{\sigma^2(k)} \quad (4.6)$$

Όπως έχουμε προαναφέρει η κατευθείαν αντιστροφή της σχέσεως (4.1) με τα δεδομένα $G^{(d)}$ είναι ένα ill-posed πρόβλημα και η αντιστροφή με αριθμητικές μεθόδους αδύνατη. Μια σκέψη θα ήταν να εφαρμόσουμε την αρχή του ελαχίστου τετραγώνου, με τους περιορισμούς $A(\omega) \geq 0$ και $\int d\omega A(\omega) = 1$ δηλ. του αθροιστικού νόμου. Θεωρώντας το χ^2 ως συναρτησοειδές της $A(\omega)$, δηλ. $\chi^2[A]$ τότε από τη λύση της εξίσωσης

$$\delta\chi^2[A] = 0 \quad (4.7)$$

θα μπορούσαμε να προσδιορίσουμε την φασματική συνάρτηση $A(\omega)$ του συστήματος. Όμως αυτή η προσέγγιση με το χ^2 οδηγεί σε πολλές διαφορετικές λύσεις. Πράγματι, το ίδιο G μπορεί να προκύψει από δύο τελείως διαφορετικές μορφές της $A(\omega)$. Ακόμη, πολύ μικρή αλλαγή των δεδομένων $G^{(d)}$, εντός των ορίων του στατιστικού λάθους, δίνει τελείως διαφορετικές μορφές για την $A(\omega)$.

4.2 Μέθοδος Μέγιστης Εντροπίας

Η Μέθοδος Μέγιστης Εντροπίας κοντρολάρει τον τρόπο υπολογισμού της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$ με την αρχή του ελαχίστου τετραγώνου, όπου χρησιμοποιούνται μόνο τα δεδομένα G^d , με την χρήση a priori γνώσεων της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$ του συστήματος. Για την θεμελίωση της MEM με στατιστική αιτιολόγηση χρησιμοποιούμε το θεώρημα του Bayes των πιθανοτήτων που είναι:

$$P[X, Y] = P[X/Y]P[Y] == P[Y/X]P[X]$$

Ορίζουμε τρεις πιθανότητες:

1. Την πιθανότητα κατανομής των μορφών της $A(\omega)$ πριν τα πειραματικά δεδομένα $P[A(\omega)]$, η οποία λέγεται prior πιθανότητα.
2. Την πιθανότητα $P[G^d/A(\omega)]$ η οποία είναι υπο συνθήκη πιθανότητα και εκφράζει την πιθανότητα να προκύψουν τα δεδομένα G^d υπό τον όρο ότι η αληθινή φασματική συνάρτηση του συστήματος είναι η $A(\omega)$. Αυτή ονομάζεται likelihood πιθανότητα.
3. Την πιθανότητα $P[A(\omega)/G^d]$ η οποία είναι η πιθανότητα η φασματική συνάρτηση του συστήματος να είναι η $A(\omega)$ υπό την προϋπόθεση ότι τα πειραματικά δεδομένα είναι G^d . Αυτή ονομάζεται posterior πιθανότητα.

Εφαρμόζοντας το θεώρημα του Bayes έχουμε:

$$P[A(\omega)/G^d] = P[G^d/A(\omega)] \frac{P[A(\omega)]}{P[G^d]} \quad (4.8)$$

Η πιθανότητα $P[G^d]$ λέγεται evidence και χρησιμοποιείται για την κανονικοποίηση της posterior πιθανότητας. Η υπόθεση που γίνεται είναι ότι η likelihood πιθανότητα είναι Gaussian κατανομή σε σχέση με το χ^2 , δηλ.

$$P[G^d/A(\omega)] = \frac{1}{Z_1} e^{-\frac{1}{2}\chi^2[A]}$$

όπου είναι $Z_1 = \int \mathcal{D}G^d e^{-\frac{1}{2}\chi^2[A]}$.

Αν θεωρήσουμε ότι η $P[A(\omega)]$ είναι σταθερή τότε η posterior πιθανότητα γίνεται μέγιστη όταν είναι $\delta\chi^2 = 0$ και είναι ισοδύναμο με το fitting των δεδομένων με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Όμως όταν έχουμε a priori γνώση της φασματικής συνάρτησης του

συστήματος συμπεριλαμβάνουμε την όποια αρχική γνώση σε μια συνάρτηση $D(\omega)$ την οποία ονομάζουμε *default* μοντέλο και για την οποία, όπως και για την $A(\omega)$, επίσης ισχύει $D(\omega) \geq 0$ και $\int d(\omega) D(\omega) = 1$. Ορίζουμε την εντροπία S ως

$$S = - \int d\omega A(\omega) \ln \left[\frac{A(\omega)}{D(\omega)} \right]$$

Τότε με διάφορα επιχειρήματα στηριζόμενα στην στατιστική προκύπτει ότι είναι:

$$P[A(\omega)] = \frac{1}{Z_2} e^{\alpha S[A]}$$

Όπου είναι $Z_2 = \int \mathcal{D}A e^{\alpha S[A]}$. Συνεπώς αντικαθιστώντας στην (4.8) έχουμε:

$$P[A(\omega)/G^d] = \frac{e^{-Q[A]}}{Z_1 Z_2 P[G^d]}$$

με

$$P[G^d] = \frac{\int \mathcal{D}A e^{-Q[A]}}{Z_1 Z_2}$$

ανεξάρτητη του $A(\omega)$.

Όπου είναι

$$Q[A] = \frac{1}{2} \chi^2[A] - \alpha S[A] \quad (4.9)$$

Άρα η posterior πιθανότητα είναι $P[A(\omega)/G^d] \propto e^{-Q}$ και συνεπώς η $A_I(\omega)$, η πιθανότερη μορφή της φασματικής συνάρτησης για το σύστημα, προκύπτει με την ελαχιστοποίηση του Q , δηλαδή είναι η λύση της εξίσωσης

$$\delta Q[A] = 0$$

Παρατηρούμε ότι αν $\alpha \rightarrow \infty$ τότε η $\delta Q[A] = 0$ δίνει $\hat{A}_\infty(\omega) = D(\omega)$ και όταν $\alpha = 0$ τότε $\delta Q[A] = 0 \Rightarrow \delta \chi^2[A] = 0$. Επομένως η τιμή της παραμέτρου α καθορίζει την βαρύτητα των δεδομένων και του *default* μοντέλου στη λύση του προβλήματος. Μεγάλες τιμές της παραμέτρου α επιβάλλουν μεγαλύτερη εξάρτηση της λύσης από το *default* μοντέλο και λιγότερη από τα δεδομένα. Αντίστροφα μικρές τιμές του α συνεπάγεται μεγαλύτερη βαρύτητα στη λύση των δεδομένων παρά του *default* μοντέλου.

Μένει το ερώτημα ποιά τιμή της παραμέτρου α πρέπει να χρησιμοποιήσουμε. Έχουμε δύο τρόπους επιλογής της παραμέτρου:

α) Ρυθμίζουμε την παράμετρο α ώστε να ισχύει $\chi^2 \sim L$. Με αυτή την τιμή της α λύνουμε την εξίσωση $\delta Q[A] = 0$ και η λύση της είναι η ζητούμενη $A_I(\omega)$. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται ιστορική MEM.

β) Επίσης μπορούμε να προσδιορίσουμε την παράμετρο α χρησιμοποιώντας Bayesian λογική. Πιο συγκεκριμένα προσδιορίζουμε την υπό συνθήκη πιθανότητα

$$P[\alpha/G^d] = \frac{P[\alpha] \int \mathcal{D}A e^{-Q[A]}}{Z_1 Z_2 P[\bar{G}^d]}$$

με

$$P[\bar{G}^d] = \int_0^\infty d\alpha \frac{P[\alpha] \int \mathcal{D}A e^{-Q[A]}}{Z_1 Z_2}$$

Η άγνωστη ποσότητα είναι η $P[\alpha]$, η prior πιθανότητα του α . Αυτή υποτίθεται ότι είναι σταθερή ή $P[\alpha] \propto \frac{1}{\alpha}$ χωρίς μεγάλη επίδραση στο αποτέλεσμα. Αφού έχει ορισθεί η $P[\alpha/G^d]$, έχουμε δύο επιλογές:

1. Να υπολογίσουμε την τιμή α^* για την οποία είναι μέγιστη η $P[\alpha/G^d]$. Για αυτή την τιμή α^* λύνουμε την εξίσωση $\delta Q[A] = 0$ και είναι $A_I(\omega) = A_{\alpha^*}(\omega)$.
2. Να βρούμε την μέση τιμή όλων των A_α με στατιστικό βάρος την κατανομή $P[\bar{G}^d]$. Για ένα πλήθος τιμών της παραμέτρου α υπολογίζουμε από την $\delta Q[A] = 0$ βρίσκουμε τα αντίστοιχα $A_\alpha(\omega)$ και είναι

$$A_I(\omega) = \int_0^\infty d\alpha P[\alpha/G^d] A_\alpha(\omega)$$

Η διαδικασία αυτή λέγεται κλασσική MEM.

4.3 Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία

4.3.1 Περιγραφή της Μεθόδου

Μια εναλλακτική μέθοδος της μεθόδου Μέθοδος Μεγίστης Εντροπίας είναι η **Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία** (Stochastic Analytical Inference) (SAI). Με τη μέθοδο αυτή η λύση της αντιστροφής για δεδομένα $G^{(d)}$ της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου είναι η μέση τιμή προτάσεων μορφών της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$ με στατιστική κατανομή:

$$P[A/G^d] \sim e^{-\frac{1}{2\alpha} \chi^2[A]} \quad (4.10)$$

Οι προτάσεις των μορφών της φασματικής συνάρτησης είναι γύρω από μια μορφή $D(\omega)$ η οποία εμπεριέχει όλη την a priori γνώση για την φασματική συνάρτηση του συστήματος και λέγεται *default* μοντέλο. Η παράμετρος α ονομάζεται “θερμοκρασία” και ο ρόλος της είναι παραπλήσιος με αυτόν της παραμέτρου α της Μεθόδου Μεγίστης Εντροπίας.

Έστω $D(\omega)$ το default μοντέλο το οποίο εμπεριέχει όλη την a priori γνώση για την φασματική συνάρτηση του συστήματος. Ορίζουμε αντιστοιχία της συχνότητας ω με μεταβλητή x ως εξής:

$$x = \phi(\omega) = \int_{-\infty}^{\omega} d\omega' D(\omega')$$

Κατόπιν ορίζουμε το αδιάστατο πεδίο $n(x)$ με $x \in [0, 1]$ ως

$$n(x) = \frac{A(\phi^{-1}(x))}{D(\phi^{-1}(x))} \quad (4.11)$$

Τότε το αδιάστατο πεδίο $n(x)$ είναι νορμαλισμένο και θετικό, δηλαδή ισχύει:

$$\begin{aligned} n(x) &\geq 0 \\ \int_0^1 dx n(x) &= 1 \end{aligned} \quad (4.12)$$

Αντικαθιστώντας στη σχέση (4.3) τη συχνότητα $\omega = \phi^{-1}(x)$ έχουμε

$$\mathcal{G} = \int_0^1 dx \hat{K}(i, x) n(x)$$

Όπου είναι $\hat{K}(i, x) = \bar{K}(i, \phi^{-1}(x))$.

Με αντικατάσταση στο χ^2 είναι πλέον $\chi^2 [A(\omega)] = \chi^2 [n(x)]$. Η μέση τιμή του αδιάστατου πεδίου δίνεται από τη σχέση:

$$\langle \langle n(x) \rangle \rangle_{\alpha} = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}'n(x) n(x) e^{-\frac{1}{2\alpha} \chi^2 [n(x)]} \quad (4.13)$$

με

$$Z = \int \mathcal{D}'n(x) e^{-\frac{1}{2\alpha} \chi^2 [n(x)]}$$

$$\mathcal{D}'n(x) = \mathcal{D}n(x) \Theta [n] \delta \left[\int_0^1 dx n(x) - 1 \right]$$

και

$$\Theta [n] = \begin{cases} 1 & \text{εάν } \forall x : n(x) \geq 0 \\ 0 & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

δηλαδή οποιαδήποτε μορφή του $n(x)$, με μόνο περιορισμό να ικανοποιούνται οι σχέσεις (4.12).

Τότε η μέση τιμή της φασματικής συνάρτησης δίνεται από τη σχέση

$$\langle A(\omega) \rangle_{\alpha} = D(\omega) \langle n(\phi(\omega)) \rangle_{\alpha} \quad (4.14)$$

Σύνδεση της SAI με τη MEM: Αν θεωρήσουμε ένα φανταστικό σύστημα όπου η Hamiltonian είναι $H[n(x)] = \frac{1}{2}\chi^2[n(x)]$, τότε η μέση τιμή της $A(\omega)$ για μια “θερμοκρασία” α η $\langle A \rangle_\alpha$, προσδιορίζεται από την ελαχιστοποίηση της “ελεύθερης ενέργειας” $F = U - TS$ ή $F + \frac{1}{2}\langle \chi^2 \rangle_\alpha - \alpha S$.

Συγκρίνοντας την τελευταία σχέση με τη σχέση που δίνει την ποσότητα Q στην περίπτωση της MEM, βλέπουμε την αντιστοιχία με την διαφορά ότι στην περίπτωση της SAI δεν χρειάζεται να ορίσουμε εντροπία. Επιπλέον, με την SAI, όπως και με την MEM έχουμε: για $\alpha \rightarrow 0$ οδηγούμαστε ότι η φασματική συνάρτηση προκύπτει ως λύση της εξίσωσης $\delta\chi^2 = 0$ και για $\alpha \rightarrow \infty$ είναι $\langle n(x) \rangle = 1$ και συνεπώς $\langle A \rangle_\infty = D(\omega)$. Ο Beach [18] επιπλέον, δείχνει ότι με εφαρμογή μέσου πεδίου στο φανταστικό σύστημα ότι η SAI είναι, κατά κάποιο τρόπο, γενίκευση της MEM.

Επιλογή της “θερμοκρασίας” α : Όπως στην περίπτωση της MEM η επιλογή της παραμέτρου α αποτελεί αντικείμενο συζήτησης, όμοια και για την τιμή της “θερμοκρασίας” α που πρέπει να επιλέξει κάποιος, υπάρχουν διάφορες απόψεις. Οι κυριότερες από αυτές είναι οι παρακάτω:

1. Ο Beach [18] επιλέγει την τιμή της “θερμοκρασίας” ως εκείνη για την οποία υπάρχει μια λοξότητα στο διάγραμμα του λογαρίθμου της $\langle \chi^2 \rangle$ με την “θερμοκρασία”.
2. Ο Syjuasen [29] προτείνει $\alpha = 1$.
3. Ο Sandvik [28] πρότεινε την επιλογή της α από την γραφική παράσταση της εντροπίας με την α εκεί όπου παρουσιάζεται οξεία και απότομη αλλαγή
4. Ισχύει πάντα το κριτήριο να έχουμε $\chi^2 \sim L$
5. τέλος με Bayesian λογική [19] υπολογίζουμε ότι είναι

$$P[\alpha/G^d] \propto P[\alpha] \alpha^{-\frac{L}{2}} \int \mathcal{D}'n(x) e^{-\frac{1}{2\alpha}\chi^2[n(x)]}$$

οπότε σε αναλογία με την MEM μπορούμε:

- α') Να υπολογίσουμε την τιμή της θερμοκρασίας α^* όπου $\delta P[\alpha/G^d] = 0$ και από την τιμή του $\langle n \rangle_{\alpha^*}$ υπολογίζουμε την φασματική συνάρτηση του συστήματος.
- β') για κάθε α υπολογίζουμε την $\langle n \rangle_\alpha$. Με στατιστικό βάρος $P[\alpha/C^d]$ βρίσκουμε

$$\langle \langle n \rangle_\alpha \rangle = \int d\alpha P[\alpha/G^d] \langle n \rangle_\alpha$$

και από αυτό τη φασματική συνάρτηση

Για αυτή την περίπτωση χρειάζεται κάποιος να υπολογίσει τη συνάρτηση επιμερισμού,

$$Z = \int \mathcal{D}'n(x) e^{-\frac{1}{2\alpha}\chi^2[n(x)]}$$

η οποία υπολογίζεται με την μέθοδο Wang-Landau

4.3.2 Πρακτική Εφαρμογή της Μεθόδου

Όπως αναφέραμε παραπάνω η καρδιά της SAI είναι ότι οι “υποψήφιος” μορφές της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$ θα πρέπει να είναι γύρω από το default μοντέλο $D(\omega)$, πράγμα το οποίο είναι κατά κάποιο τρόπο ισοδύναμο με τον χρήση της εντροπίας στη MEM.

Έστω ότι δίνεται το default μοντέλο $D(\omega)$ σε μορφή ιστογράμματος, το οποίο είναι $D(\omega) = 0$ για τιμές του ω έξω από το διάστημα $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$. Συγκεκριμένα για N_w διαδοχικά διαστήματα που η ένωσή τους δίνει το διάστημα $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ δίνονται:

- $\Delta\omega(i)$: το μήκος του i -διαστήματος
- $\omega(i)$: το μέσο του i -διαστήματος
- $Df(i)$: το ύψος του ιστογράμματος στο i -διάστημα

με $i = 1, 2, \dots, N_w$. Στην περίπτωση που το default μοντέλο δεν είναι κανονικοποιημένο τότε κανονικοποιείται με την αντικατάσταση:

$$Df(i) \longrightarrow \frac{Df(i)}{\sum_{j=1}^{N_w} Df(j)\Delta\omega(j)}$$

Ορίζουμε το διάνυσμα $x(i)$ με $i = 0, 1, 2, \dots, N_w$ ως:

$$x(i) = \begin{cases} 0 & \text{όταν } i = 0 \\ \sum_{j=1}^i Df(j)\Delta\omega(j) & \text{όταν } i = 1, \dots, N_w \end{cases} \quad (4.15)$$

Επινοούμε μια στοχαστική διαδικασία με την οποία παράγουμε ισοπίθανα οποιαδήποτε μορφή του αδιάστατου πεδίου $n(x)$, όπου όλες οι μορφές είναι ορισμένες στο διάστημα $[0, 1]$, δηλ. $x \in [0, 1]$, με τους περιορισμούς της σχέσης (4.12). Αφού επινοήσουμε αυτή την διαδικασία, τότε για κάθε υποψήφια μορφή του $n(x)$ η αντίστοιχη ιστογραμματική μορφή της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$, ορίζεται στα ίδια διαστήματα συχνότητας με αυτά του default μοντέλου, $\Delta\omega(i)$ με ύψη:

$$A(i) = \frac{1}{\Delta\omega(i)} \int_{x(i-1)}^{x(i)} dx n(x) \quad (4.16)$$

όπου $i = 1, 2, \dots, N_w$

Τα στοιχεία του πίνακα G που ορίζονται με την σχέση (4.3) είναι:

$$\mathcal{G}(i) = \sum_{j=1}^{N_w} \hat{K}_h(i, j) A_h(j) \quad (4.17)$$

όπου $i = 1, 2, \dots, L$

με $\hat{K}_h(i, j) = \hat{K}(i, \omega(j))$ και $A_h(j) = A(j)\Delta\omega(j)$ με $j = 1, \dots, L$.

Μια στοχαστική διαδικασία η οποία περιγράφεται από τον Beach [18] για το αδιάστατο πεδίο είναι η παρακάτω:

Κάθε μορφή \mathcal{C} του πεδίου $n(x)$, αντιστοιχεί σε ένα πίνακα διαστάσεως $2 \times M$ με στοιχεία της i -γραμμής $\{r(i), a(i)\}$ όπου ισχύει:

$$\sum_{i=1}^M r(i) = 1, \quad r(i) > 0, \quad \text{και} \quad 0 \leq a(i) \leq 1$$

με $i = 1, 2, \dots, M$.

και είναι

$$n_{\mathcal{C}} = \sum_{i=1}^M r(i) \delta(x - a(i)) \quad (4.18)$$

Κατά την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis με την στατιστική πιθανότητα (4.10) το update από μια μορφή $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'$ γίνεται ως ακολούθως: Επιλέγουμε τυχαία ένα πλήθος L_0 γραμμών από τις M της \mathcal{C} και αλλάζουμε αρχικά τα πρώτα στοιχεία των γραμμών με τέτοιο τρόπο ώστε να διατηρούνται οι ροπές $M^{(n)} = \int_0^1 dx n(x) x^n$ μέχρι $L_0 - 1$ τάξης[.].

Αν το σύνολο των επιλεγέντων γραμμών είναι $\Lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{L_0}\}$, ορίζουμε L_0 σύνολα $\Lambda / \{\lambda_i\}$ με $i = 1, \dots, L_0$ τα οποία προκύπτουν από το σύνολο Λ εξαιρώντας το αντίστοιχο στοιχείο λ_i . Κατόπιν ορίζουμε L_0 συντελεστές κλίμακας Q_λ ως:

$$Q_\lambda = \begin{cases} 1 & \text{όταν } \lambda = \lambda_1 \\ \frac{\prod_{\mu \in \Lambda / \{\lambda_1\}} (a_\mu - a_{\lambda_1})}{\prod_{\mu \in \Lambda / \{\lambda\}} (a_\mu - a_\lambda)} & \text{όταν } \lambda \neq \lambda_1 \end{cases} \quad (4.19)$$

Ορίζουμε δύο υποσύνολα του συνόλου Λ τα $\Lambda^- = \{\lambda : Q_\lambda < 0\}$ και $\Lambda^+ = \{\lambda : Q_\lambda > 0\}$. Ορίζουμε τους αριθμούς $s_1 = \max(\frac{r_\lambda}{Q_\lambda})$ για όλα τα λ όπου $\lambda \in \Lambda^-$ και $s_2 = \min(\frac{r_\lambda}{Q_\lambda})$ για όλα τα λ όπου $\lambda \in \Lambda^+$. Επιλέγουμε ομοιόμορφα τυχαίο αριθμό s ώστε:

$$s_1 < s < s_2$$

Τότε οι νέες τιμές της πρώτης στήλης των επιλεγμένων L_0 παίρνουν τις τιμές:

$$r(\lambda) \rightarrow r(\lambda)' = r(\lambda) - s Q(\lambda)$$

Το update συμπληρώνεται επιλέγοντας τυχαίο άνυσμα $\vec{R} = (R(1), R(2), \dots, R(L_0))$ όπου για κάθε συνιστώσα ισχύει $0 < R(i) < 1$ και οι δευτερες στήλες των επιλεγμένων γραμμών γίνονται:

$$a(i) \rightarrow a'(i) = R(i), \quad \text{με } i = 1, 2, \dots, L_0$$

Μετά εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο Metropolis.

5 t-J Μοντέλο και Παραλλαγές του

5.1 Εισαγωγή

Το μοντέλο Hubbard ([1]) είχε εισαχθεί για να περιγράψει τις μαγνητικές ιδιότητες των στοιχείων μετάπτωσης του τομέα d . Όμως εφαρμόστηκε σε ευρύτατο πεδίο, όπου μεταξύ άλλων περιγράφει, με αλλαγή των παραμέτρων του, και την μετάβαση φάσης μετάλλου-μονωτή

Το απλούστερο μοντέλο Hubbard είναι που περιγράφει μία μόνο ενεργειακή ζώνη και περιέχει δύο παραμέτρους. Η μία παράμετρος είναι το πλάτος W της αρχικής ενεργειακής ζώνης και το μέτρο U της απωστικής αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ δύο ηλεκτρονίων όταν κατέχουν το ίδιο πλεγματοειδές σημείο. Όταν ισχύει $U < W$ τότε το σύστημα είναι μέταλλο και όταν ισχύει $U \gg W$ τότε είναι μονωτής. Ο λόγος είναι ότι η ζώνη χωρίζεται σε δύο ζώνες με χάσμα μεταξύ τους. Στην περίπτωση της ημι-συμπλήρωσης (ένα ηλεκτρόνιο σε κάθε πλεγματοειδές σημείο) η επιφάνεια Fermi είναι στο χάσμα μεταξύ των δύο ενεργειακών ζωνών και η βασική κατάσταση είναι μονωτής. Τα ηλεκτρόνια παραμένουν στα πλεγματοειδή σημεία και συμπεριφέρονται ως μαγνητικές ροπές με spin $s = 1/2$. Τότε δε το σύστημα αυτό είναι ένας αντισιδηρομαγνήτης. Αν έχουμε παρέκκλιση από την ημι-συμπληρωμένη κατάσταση, τότε το σύστημα θα παρουσιάζει μια πεπερασμένη αγωγιμότητα. Όμως η αγωγιμότητα αυτή συνοδεύεται από μια ισχυρή αλληλεπίδραση μεταξύ των φορέων αγωγιμότητας και της μαγνητικής τάξης του υλικού. Αυτό έχει σαν συνέπεια την απόκλιση της συμπεριφοράς των φορέων αγωγιμότητας από αυτή του υγρού Fermi. Όλα τα παραπάνω οφείλονται στην τάση αποφυγής μεταξύ των ηλεκτρονίων. Γενικά όταν είναι $U > W$ το σύστημα εκδηλώνει τα παραπάνω φαινόμενα και τότε λέμε ότι είναι “Σύστημα Ισχυρής Συσχέτισης” [30].

Το μοντέλο Hubbard περιγράφεται με την Hamiltonian

$$H = -t \sum_{(i,j)\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (5.1)$$

Περιέχει έναν κινητικό όρο που περιγράφει την κίνηση των ηλεκτρονίων από σημείο σε σημείο του πλέγματος και την απωστική ενέργεια μεταξύ των ηλεκτρονίων στο ίδιο πλεγματοειδές σημείο. Με τον συμβολισμό $\langle \dots \rangle$ εννοούμε πρώτους γείτονες και $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) είναι ο τελεστής δημιουργίας (καταστροφής) ενός ηλεκτρονίου στο πλεγματοειδές σημείο i με spin σ . Είναι $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ ο αριθμός κατάληψης των ηλεκτρονίων του πλεγματοειδούς σημείου i με spin σ . Το πλάτος της αρχικής ζώνης είναι $W = 2zt$, όπου z το πλήθος των πρώτων "γειτόνων" ενός σημείου του πλέγματος.

Στο όριο όπου $U \gg W$ με την βοήθεια της θεωρίας διαταραχών αναπτύσσοντας ως προς την ποσότητα W/U [31] και διατηρώντας όρους μέχρι δεύτερης τάξης, καταλήγουμε για την Hamiltonian στην μορφή

$$H = -t \sum_{(i,j)\sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} J \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad (5.2)$$

όπου είναι $J = \frac{2t^2}{U}$ και $\bar{c}_{i\sigma}^\dagger = (1 - n_{i\bar{\sigma}}) c_{i\sigma}^\dagger$ ($\bar{\sigma} = -\sigma$) όπου αντανάκλαται η απαγόρευση διπλής κατάληψης. Η διπλή κατάληψη απαγορεύεται λόγω της μεγάλης τιμής του U . Με τον συμβολισμό $[i, j]$ νοούμε πρώτους γείτονες, όμως το άθροισμα να είναι διπλό, δηλ. διατρέχουμε όλα τα πλεγματοειδή σημεία και για κάθε πλεγματοειδές σημείο λογαριάζουμε στο άθροισμα όλους τους πρώτους γείτονες.

Η έκφραση (5.2) είναι το περίφημο μοντέλο $t - J$ και είναι το μοντέλο του Hubbard στο όριο όπου $U \gg W$. Έχει δε δύο νέους φαινομενολογικούς παράγοντες, τον παράγοντα t και τον παράγοντα J . Το μοντέλο αναπτύχθηκε για να περιγράψει την κίνηση των ηλεκτρονίων σε αντισιδηρομαγνητικό περιβάλλον, όμως έγινε δημοφιλές όταν ο Anderson [32] πρότεινε το $t - J$ μοντέλο για την περιγραφή των υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας T_c [33–38].

Το ερώτημα που τίθεται είναι ποιες ποσότητες πρέπει να υπολογίσει κάποιος στο μοντέλο $t - J$ και ποια προβλήματα πρέπει να λύσει το μοντέλο. Όπως προαναφέραμε το σύστημα αποκτά αγωγιμότητα όταν έχουμε απόκλιση από την κατάσταση των ημι-συμπληρωμένων ζωνών, όπου είναι μονωτής. Υποθέτουμε μια χαμηλή συγκέντρωση οπών, το οποίο είναι και το σπουδαιότερο πρόβλημα, και το πρόβλημά μας τότε ανάγεται σε αυτό της κίνησης μιας οπής στο αντισιδηρομαγνητικό περιβάλλον. Το κεντρικό πρόβλημα είναι να υπολογίσουμε την φασματική συνάρτηση του οιωνεί σωματιδίου που προκύπτει [5]. Η οπή καταστρέφει την μαγνητική τάξη σε μια συγκεκριμένη ακτίνα R_p . Η κρίσιμη συγκέντρωση των οπών δ_c , ώστε η προσέγγιση της μιας οπής να είναι σωστή, μπορεί να υπολογισθεί εύκολα από την σχέση $\delta_c \sim a^2/R_p^2$, όπου a είναι η παράμετρος πλέγματος. Η κίνηση μιας οπής συνοδεύεται από την

αλληλεπίδρασή της με το αντισιδηρομαγνητικό περιβάλλον μέσω των μαγνονίων που είναι τα κύματα spin. Επομένως η κίνηση είναι παρόμοια με την κίνηση του πολαρονίου, όπου το ηλεκτρόνιο αλληλεπιδρά με τα φωνόνια του πλέγματος.

Το μοντέλο $t - J$ μπορεί να επεκταθεί περικλείοντας και αλληλεπιδράσεις των spins μεταξύ και δευτέρων γειτόνων, καθώς επίσης και μετάβαση και μεταξύ δευτέρων γειτόνων. Γενικά η Hamiltonian έχει δύο τμήματα, το πρώτο είναι ο κινητικός όρος και το δεύτερο τμήμα είναι το τμήμα Heisenberg, δηλ. το μαγνητικό υπόβαθρο στο οποίο κινείται η οπή. Παρακάτω για διάφορες μορφές του μοντέλου, πρώτα εξετάζουμε το τμήμα Heisenberg της Hamiltonian και στα πλαίσια της γραμμικής προσέγγισης της θεωρίας των κυμάτων spin, ξεκινώντας έχοντας ως αναφορά την κλασική βασική κατάσταση γράφουμε αυτό το τμήμα ως άθροισμα της βασικής κατάστασης και ενός όρου που περιγράφει τις διεγέρσεις των μαγνονίων. Κατόπιν από τον κινητικό όρο προσδιορίζουμε τους ελεύθερους διαδότες των οπών και των μαγνονίων καθώς και τις κορυφές αλληλεπίδρασης οπών-μαγνονίων. Τα αποτελέσματα χρησιμοποιούνται σε παρακάτω κεφάλαια για τον υπολογισμό της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$ και στη συνέχεια μέσω αυτής υπολογίζουμε την φασματική συνάρτηση $A(\omega)$.

5.2 Φορμαλισμός

5.2.1 Περιορισμός του Χώρου Hilbert - Ορισμός Τελεστών

Θα αναπαραστήσουμε το μοντέλο $t - J$ με ένα φαινομενολογικό τρόπο, ο οποίος έχει μια γενικότητα για όλες τις εκδοχές του μοντέλου και διευκολύνει στην αντιμετώπιση του με έναν ενιαίο τρόπο. Σε αυτό τον φορμαλισμό λαμβάνουμε υπόψη εξ αρχής την $1/S$ προσέγγιση και ότι είναι πολύ μικρή η συγκέντρωση των οπών στο πλέγμα [39–43].

Έχουμε ένα μαγνητικό υπόβαθρο ημι-συμπληρωμένου πλέγματος, όπου ως βασική κατάσταση αφετηρίας λαμβάνουμε την κλασική βασική κατάσταση. Στην κατάσταση αφετηρίας χωρίζουμε το σύνολο των πλεγματικών σημείων σε δύο υποσύνολα, το υποσύνολο A , το οποίο περιέχει όλα τα πλεγματικά σημεία με spin επάνω (up) (\uparrow) και το υποσύνολο B , το οποίο περιέχει όλα τα πλεγματικά σημεία με spin κάτω (down) (\downarrow). Αυτή η κατάσταση είναι η κατάσταση κενού. Οι αποκλίσεις από την βασική κατάσταση είναι δύο, η πρώτη είναι αυτή όπου το spin είναι ανεστραμμένο (flip) σε σχέση με την κατάσταση κενού και η δεύτερη είναι αυτή όπου έχει δημιουργηθεί οπή (hole) στο πλεγματικό σημείο. Απαγορεύεται η διπλο- κατάληψη (doublons) και συνεπώς η κατάσταση αυτή δεν ανήκει στο χώρο Hilbert του προβλήματός μας.

Συνεπώς ο χώρος Hilbert για ένα πλεγματικό i σημείο είναι $V_i = \{|vac\rangle_i, |flip\rangle_i, |hol\rangle_i\}$. Ο χώρος Hilbert του συστήματός μας είναι το τανυστικό γινόμενο των συνόλων V_i με $i = 1, \dots, N$. N είναι το σύνολο των πλεγματικών σημείων του πλέγματος. Με βάση τον νέο χώρο είναι:

- Όταν $i \in A$ τότε

$$|\uparrow\rangle_i = |vac\rangle_i, \quad |\downarrow\rangle_i = |flip\rangle_i, \quad | \rangle_i = |hol\rangle_i \quad (5.3)$$

- Όταν $i \in B$ τότε

$$|\downarrow\rangle_i = |vac\rangle_i, \quad |\uparrow\rangle_i = |flip\rangle_i, \quad | \rangle_i = |hol\rangle_i \quad (5.4)$$

Ορίζουμε για κάθε πλεγματοκό σημείο i τους τελεστές h_i^\dagger (h_i) δημιουργίας (καταστροφής) οπής (hole) στο i πλεγματοκό σημείο και a_i^\dagger (a_i) δημιουργίας και καταστροφής αντιστροφής (flip) στο i πλεγματοκό σημείο. Η δράση στα διανύσματα του χώρου Hilbert είναι:

$$\begin{aligned} h_i^\dagger |vac\rangle_i &= |hol\rangle_i, & h_i^\dagger |flip\rangle_i &= 0, & h_i^\dagger |hol\rangle_i &= 0 \\ h_i |vac\rangle_i &= 0, & h_i |flip\rangle_i &= 0, & h_i |hol\rangle_i &= |vac\rangle_i \\ a_i^\dagger |vac\rangle_i &= |flip\rangle_i, & a_i^\dagger |flip\rangle_i &= 0, & a_i^\dagger |hol\rangle_i &= 0 \\ a_i |vac\rangle_i &= 0, & a_i |flip\rangle_i &= |vac\rangle_i, & a_i |hol\rangle_i &= 0 \end{aligned} \quad (5.5)$$

Όπου ο τελεστής a_i^\dagger έχει το ίδιο αποτέλεσμα με τον τελεστή Holstein-Primakoff στο όριο του $S \rightarrow \infty$. Επίσης ο περιορισμός του χώρου Hilbert εξασφαλίζει τον αποκλεισμό των διπλά κατειλημμένων καταστάσεων και την ικανοποίηση του μη ολονομικού τοπικού συνδέσμου $a_i^\dagger a_i \leq 2S$.

Τότε οι παλαιοί τελεστές στο μοντέλο $t - J$ (5.2) για τον περιορισμένο χώρο Hilbert του προβλήματος γράφονται:

- Για $i \in A$ έχουμε:

$$\begin{aligned} \bar{c}_{i\uparrow}^\dagger &= h_i, & \bar{c}_{i\downarrow}^\dagger &= a_i^\dagger h_i \\ \bar{c}_{i\uparrow} &= h_i^\dagger, & \bar{c}_{i\downarrow} &= h_i^\dagger a_i \\ S_i^z &= \frac{1}{2}(1 - 2a_i^\dagger a_i) \\ S_i^+ &= a_i, & S_i^- &= a_i^\dagger \end{aligned} \quad (5.6)$$

- Για $i \in B$ έχουμε:

$$\begin{aligned} \bar{c}_{i\uparrow}^\dagger &= a_i^\dagger h_i, & \bar{c}_{i\downarrow}^\dagger &= h_i \\ \bar{c}_{i\uparrow} &= h_i^\dagger a_i, & \bar{c}_{i\downarrow} &= h_i^\dagger \\ S_i^z &= \frac{1}{2}(2a_i^\dagger a_i - 1) \\ S_i^+ &= a_i^\dagger, & S_i^- &= a_i \end{aligned} \quad (5.7)$$

Χρειαζόμαστε τους τελεστές S_i^z , S_i^+ και S_i^- διότι αντικαθιστούμε με τη σχέση

$$\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \quad (5.8)$$

Επίσης θα χρειαστεί να εφαρμόσουμε την θεωρία μέσου πεδίου όπου για δύο τελεστές O_1 και O_2 ισχύει:

$$O_1 O_2 \sim \langle O_1 \rangle O_2 + O_1 \langle O_2 \rangle - \langle O_1 \rangle \langle O_2 \rangle \quad (5.9)$$

Ακόμη, επειδή η απόκλιση από κατάσταση αναφοράς είναι μικρή, ισχύει $\langle a_i^\dagger a_i \rangle \sim 0$

Μετασχηματισμός Bogoliubov

Σε όλες τις εφαρμογές μας θα χρειαστούμε τον μετασχηματισμό Bogoliubov ο οποίος στην γενική μορφή είναι ο εξής:

Αν η Hamiltonian έχει την μορφή:

$$H = \epsilon(c_1^\dagger c_1 + c_2^\dagger c_2) + \lambda(c_1^\dagger c_2^\dagger + c_2 c_1) \quad (5.10)$$

τότε με τον μετασχηματισμό:

$$\begin{aligned} c_1^\dagger &= u d_1^\dagger + v d_2 \\ c_2^\dagger &= u d_2^\dagger + v d_1 \end{aligned} \quad (5.11)$$

παίρνει την διαγώνια μορφή:

$$\begin{aligned} H &= \bar{\epsilon}(d_1^\dagger d_1 + d_2^\dagger d_2) - \epsilon + \bar{\epsilon} \\ \bar{\epsilon} &= \sqrt{\epsilon^2 - \lambda^2} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Οι συντελεστές του μετασχηματισμού δίνονται από τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} u &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{\lambda}{\epsilon})^2}} \right)} \\ v &= -\text{sgn} \left(\frac{\lambda}{\epsilon} \right) \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{\lambda}{\epsilon})^2}} - 1 \right)} \end{aligned} \quad (5.13)$$

5.3 Εφαρμογές

Στο κεφάλαιο αυτό μελετάμε με την βοήθεια του φορμαλισμού που αναπτύχθηκε στο προηγούμενο διάφορες εκδοχές του μοντέλου $t - J$.

5.3.1 Τετραγωνικό δισδιάστατο Αντισιδηρομαγνητικό Πλέγμα.

Αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων, Μετάβαση πρώτων γειτόνων

Στην περίπτωση του δισδιάστατου αντισιδηρομαγνητικού πλέγματος με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων και μετάβαση μεταξύ πρώτων γειτόνων, η Hamiltonian του προβλήματος είναι της μορφής:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} J \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad (5.14)$$

Η Heisenberg Hamiltonian

Ο όρος Heisenberg

$$H_J = \frac{1}{2} J \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$$

της παραπάνω (5.14) με την βοήθεια της (5.8) γίνεται:

$$H_J = \frac{1}{2} J \sum_{[i,j]} \left(\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right) \quad (5.15)$$

όπου το άθροισμα εννοείται σε όλα τα i πλεγματικά σημεία και στα αντίστοιχα γειτονικά του j . Δηλαδή το i διατρέχει όλα τα πλεγματικά σημεία. Αντικαθιστώντας με χρήση των σχέσεων (5.6) και (5.7) έχουμε:

$$H_J = H_J^{(I)} + H_J^{(II)}$$

όπου είναι

$$\begin{aligned} H_J^{(I)} &= \frac{J}{8} \sum_{[i \in A, j \in B]} (1 - 2a_i^\dagger a_i)(2a_j^\dagger a_j - 1) \\ &\quad + \frac{J}{8} \sum_{[i \in B, j \in A]} (1 - 2a_j^\dagger a_j)(2a_i^\dagger a_i - 1) \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} H_J^{(II)} &= \frac{J}{4} \sum_{[i \in A, j \in B]} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) + \frac{J}{4} \sum_{[i \in B, j \in A]} (a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i a_j) \\ &= \frac{J}{4} \sum_{[i \in N, j]} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) \end{aligned} \quad (5.17)$$

όπου με τον συμβολισμό $[i \in A, j \in B]$ εννοούμε ότι το i διατρέχει όλα τα σημεία του συνόλου A και τα j , αντίστοιχα γειτονικά του που ανήκουν στο σύνολο B . Με N συμβολίζουμε το σύνολο των πλεγματικών σημείων.

Με εφαρμογή της θεωρίας μέσου πεδίου σχέση 5.9 έχουμε:

$$\begin{aligned} (1 - 2a_i^\dagger a_i)(2a_j^\dagger a_j - 1) &\sim \left\langle 1 - 2a_i^\dagger a_i \right\rangle (2a_j^\dagger a_j - 1) \\ &\quad + (1 - 2a_i^\dagger a_i) \left\langle 2a_j^\dagger a_j - 1 \right\rangle - \left\langle 1 - 2a_i^\dagger a_i \right\rangle \left\langle 2a_j^\dagger a_j - 1 \right\rangle \end{aligned} \quad (5.18)$$

Όπως προαναφέραμε είναι $\left\langle a_i^\dagger a_i \right\rangle \sim 0$. Με την σχέση (5.19) και αντικαθιστώντας τους μετασχηματισμούς Fourier για τους τελεστές a_i^\dagger και a_i

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \in FBZ} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} a_{\vec{k}}, \quad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \in FBZ} e^{i\vec{k}\vec{r}_i} a_{\vec{k}}^\dagger$$

όπου \vec{r}_i η θέση του πλεγματοειδούς σημείου i , η δε πρώτη ζώνη Brillouin (FBZ) είναι $(-\pi, \pi] \times (-\pi, \pi]$, το τμήμα Heisenberg της Hamiltonian γίνεται:

$$H_J = -\frac{JzN}{8} + \frac{Jz}{2} \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} + \frac{1}{2} \gamma_{\vec{k}} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}^\dagger) \quad (5.19)$$

Όπου z είναι ο αριθμός των πρώτων γειτόνων και το $\gamma_{\vec{k}}$ δίνεται από τη σχέση:

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\vec{\delta}} \quad (5.20)$$

Είναι $\vec{\delta}$ οι θέσεις των πλησιέστερων γειτόνων για ένα πλεγματοειδές σημείο. Για το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα που εξετάζουμε είναι

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{2} (\cos k_x + \cos k_y)$$

Με τη χρήση μετασχηματισμού Bogoliubov (5.11)

$$a_{\vec{k}}^\dagger = u_k b_{\vec{k}}^\dagger + v_k b_{-\vec{k}} \quad (5.21)$$

η τελική διαγώνια μορφή της H_J είναι:

$$H_J = E_0 + \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} \omega(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \quad (5.22)$$

$$\text{με } E_0 = -\frac{3JzN}{8} + \frac{Jz}{4} \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} \sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2} \quad (5.23)$$

$$\text{και } \omega(\vec{k}) = \frac{Jz}{2} \sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2} \quad (5.24)$$

Οι συντελεστές του μετασχηματισμού Bogoliubov σύμφωνα με τη σχέση (5.13) είναι:

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2}} \right)}$$

$$v_k = -\text{sgn}(\gamma_{\vec{k}}) \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2}} - 1 \right)} \quad (5.25)$$

Ο κινητικός Όρος

Ο κινητικός όρος της Hamiltonian είναι:

$$H_t = -t \sum_{(i,j)\sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} = -t \sum_{(i \in A, j \in B)\sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} - t \sum_{(i \in B, j \in A)\sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma}$$

Αντικαθιστώντας με την βοήθεια της σχέσης (5.6) και (5.7) προκύπτει:

$$H_t = -t \sum_{\langle i,j \rangle} h_i h_j^\dagger a_j + h.c. \quad (5.26)$$

Αντικαθιστώντας τους μετασχηματισμούς Fourier των ποσοτήτων εύκολα καταλήγουμε στη σχέση:

$$H_t = + \frac{tz}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in FBZ} \gamma_{\vec{k}} h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}} a_{\vec{q}} + h.c. \quad (5.27)$$

Αντικαθιστώντας τον μετασχηματισμό Bogoliubov στην παραπάνω σχέση προκύπτει ο όρος αλληλεπίδρασης οπής και μαγνόνιων και είναι:

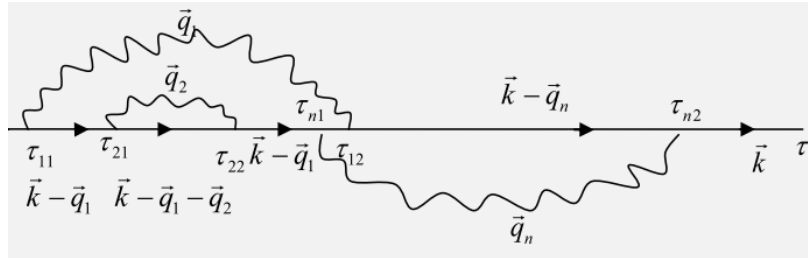
$$H_t = \frac{tz}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in FBZ} M_{\vec{k}, \vec{q}} h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}} b_{\vec{q}} + h.c. \quad (5.28)$$

$$\text{με } M_{\vec{k}, \vec{q}} = u_q \gamma_{\vec{k}} + v_q \gamma_{\vec{k}+\vec{q}} \quad (5.29)$$

Συνεπώς από την πλήρη Hamiltonian $H = H_t + H_J$ προκύπτει ότι οι ελεύθεροι διαδότες για το μαγνόνιο και την οπή είναι:

$$D^0(\vec{q}, \tau_2 - \tau_1) = \left\langle T_\tau \left[b_{\vec{q}}(\tau_2) b_{\vec{q}}^\dagger(\tau_1) \right] \right\rangle_o = \Theta(\tau_2 - \tau_1) e^{-\omega(\vec{q})(\tau_2 - \tau_1)} \quad (5.30)$$

$$G^0(\vec{k}, \tau_2 - \tau_1) = \left\langle T_\tau \left[h_{\vec{k}}(\tau_2) h_{\vec{k}}^\dagger(\tau_1) \right] \right\rangle_o = \Theta(\tau_2 - \tau_1) \quad (5.31)$$



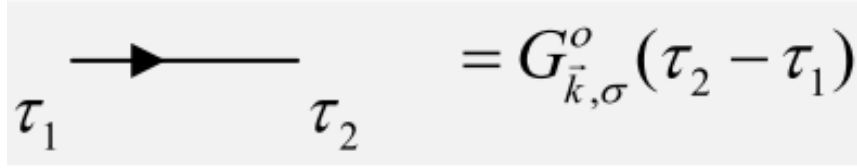
Σχήμα 5.1: Η μορφή των διαγραμμάτων Feynman είναι όπως αυτά του πολaronίου Froelich

Επειδή έχουμε μόνο μια οπή, κάθε μαγνόνιο που παράγεται απορροφάται από την ίδια την οπή, άρα για τον υπολογισμό της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου πρέπει να υπολογίσουμε το άθροισμα διαγραμμάτων όπως αυτά του σχήματος 5.1

Κάθε ελεύθερος διαδότης της οπής είναι αυτός του σχήματος 5.2

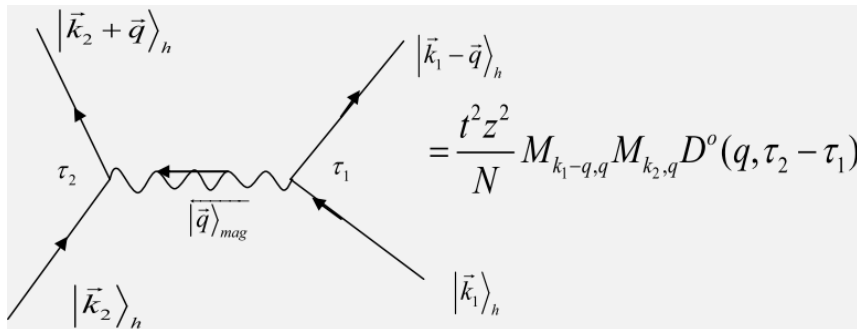
Κάθε μαγνονικός διαδότης με τις δύο κορυφές αντικαθίσταται όπως στο σχήμα 5.3

Παρατήρηση: Η κορυφή όπου απορροφάται το μαγνόνιο είναι M με δείκτη την ορμή της αρχικής οπής, ενώ όταν απορροφάται είναι με δείκτη την ορμή της τελικής οπής.



$$\tau_1 \longrightarrow \tau_2 = G_{\vec{k},\sigma}^o(\tau_2 - \tau_1)$$

Σχήμα 5.2: Ελεύθερος φερμιονικός διαδότης



$$= \frac{t^2 z^2}{N} M_{k_1-q,q} M_{k_2,q} D^o(q, \tau_2 - \tau_1)$$

Σχήμα 5.3: Μαγνητικός διαδότης με τις κορυφές του

5.3.2 Αλληλεπίδραση Πρώτων και Δεύτερων Γειτόνων-Διάνυσμα Τάξης

Στην περίπτωση ενός τετραγωνικού δισδιάστατου πλέγματος όπου έχουμε αλληλεπίδραση με συντελεστή J_1 για τους πρώτους γείτονες και J_2 για τους δεύτερους ($J_1, J_2 \geq 0$), στο σχήμα 5.4, η κλασική βασική κατάσταση προσδιορίζεται από τις τιμές του διανύσματος τάξης \vec{Q} . Πιο συγκεκριμένα, η κλασική Hamiltonian είναι:

$$H_{cl} = NS^2 [J(\vec{Q})] = NS^2 [J(Q_x, Q_y)]$$

Όπου είναι γενικά

$$J(\vec{Q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} J_{i,j} e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}$$

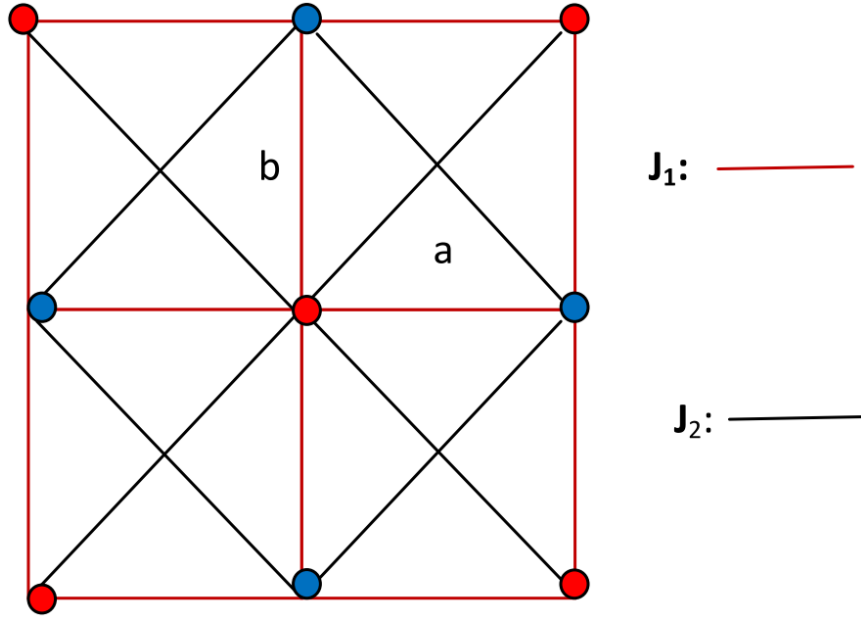
όπου $J_{i,j}$ είναι ο συντελεστής αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο πλεγματικών σημείων. Για την περίπτωση μας είναι:

$$J(\vec{Q}) = 2J_1(\cos Q_x + \cos Q_y) + 2\lambda \cos Q_x \cos Q_y$$

όπου είναι:

$$\lambda = \frac{J_2}{J_1}$$

Μελετώντας τα ακρότατα της $H_{cl}(Q_x, Q - Y)$ προσδιορίζουμε τα ελάχιστα όπου είναι ($J_1, J_2 \geq 0$).



Σχήμα 5.4: Αλληλεπίδραση πρώτων και δευτέρων γειτόνων

1. Για $\lambda < \frac{1}{2}$ τότε $\vec{Q} = (\pi, \pi)$ δηλ. έχουμε αντισιδηρομαγνητικό πλέγμα.
2. Για $\lambda > \frac{1}{2}$ τότε $\vec{Q} = (\pi, 0)$ ή $\vec{Q} = (0, \pi)$. Τότε έχουμε την μορφή Columnar, όπου το πλέγμα είναι αντισιδηρομαγνητικό στην μία διεύθυνση και σιδηρομαγνητικό στην κάθετη με αυτή.

Παρακάτω μελετάμε τις δύο περιπτώσεις ξεχωριστά.

5.3.3 Τετραγωνικό Αντισιδηρομαγνητικό Πλέγμα

Εξετάζουμε το πρόβλημα αντισιδηρομαγνητικού πλέγματος και μετάβαση οπών μεταξύ πρώτων και δευτέρων γειτόνων. Η Hamiltonian του προβλήματος έχει την μορφή:

$$\begin{aligned}
 H = & - t_1 \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} - t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} \\
 & + \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} J_2 \sum_{[[i,j]]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

Η Hamiltonian είναι $H = H_{t_1} + H_{t_2} + H_J$. Μελετάμε πρώτα το τμήμα Heisenberg.

Η Heisenberg Hamiltonian

Η Heisenberg Hamiltonian αποτελείται από το τμήμα H_{J_1} το οποίο μελετήσαμε προηγουμένως και το τμήμα H_{J_2} το οποίο με τον ίδιο τρόπο γίνεται:

$$H_{J_2} = J_2 \frac{zN}{8} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in FBZ} [-zJ_2(1 - \Gamma_{\vec{k}})] a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \quad (5.33)$$

Όπου είναι

$$\Gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\langle\langle \vec{\delta}' \rangle\rangle} e^{i\vec{k}\vec{\delta}'}$$

Τα $\vec{\delta}'$ είναι τα διανύσματα θέσης των δευτέρων γειτόνων για κάθε πλεγματοειδές σημείο. Στην περίπτωση του δισδιάστατου τετραγωνικού πλέγματος είναι

$$\Gamma_{\vec{k}} = \cos k_x \cos k_y$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (5.33) και (5.19) στην H_J παίρνουμε:

$$\begin{aligned} H_J &= -(J_1 - J_2) \frac{zN}{8} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in FBZ} [zJ_1 - zJ_2(1 - \Gamma_{\vec{k}})] a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in FBZ} \frac{zJ_1}{2} \gamma_{\vec{k}} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}^\dagger) \end{aligned} \quad (5.34)$$

Η διαγωνιοποίηση της παραπάνω με τον μετασχηματισμό Bogoliubov δίνει:

$$H_J = E_0 + \sum_{\vec{k} \in FBZ} \omega(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \quad (5.35)$$

$$\begin{aligned} \text{με } E_0 &= -\frac{J_1 z N}{8} (1 - \lambda) \\ &+ \frac{J_1 z}{4} \sum_{\vec{k} \in FBZ} \left[\sqrt{(1 - \lambda + \lambda \Gamma_{\vec{k}})^2 - \gamma_{\vec{k}}^2} - (1 - \lambda + \lambda \Gamma_{\vec{k}}) \right] \end{aligned} \quad (5.36)$$

$$\text{και } \omega(\vec{k}) = \frac{J_1 z}{2} \sqrt{(1 - \lambda + \lambda \Gamma_{\vec{k}})^2 - \gamma_{\vec{k}}^2} \quad (5.37)$$

Οι συντελεστές του μετασχηματισμού Bogoliubov δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \Lambda_{\vec{k}}^2}} \right)} \quad (5.38)$$

$$v_k = -\text{sgn}(\Lambda_{\vec{k}}) \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \Lambda_{\vec{k}}^2}} - 1 \right)} \quad (5.39)$$

$$\text{όπου } \Lambda_{\vec{k}} = \frac{\gamma_{\vec{k}}}{1 - \lambda + \lambda \Gamma_{\vec{k}}} \quad (5.40)$$

Ο κινητικός όρος

Ο κινητικός όρος είναι $H_t = H_{t_1} + H_{t_2}$. Ο όρος H_{t_1} μελετήθηκε πριν, για τον όρο

$$H_{t_2} = -t_2 \sum_{\langle(i,j)\rangle\sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma}$$

και με τις σχέσεις (5.6) και (5.7) παίρνουμε:

$$H_{t_2} = +t_2 \left[\sum_{\langle(i,j)\rangle} h_i^\dagger h_j + \sum_{\langle(i,j)\rangle} a_i^\dagger h_j^\dagger h_i a_j \right]$$

Αντικαθιστούμε τον μετασχηματισμό Fourier στην τελευταία έχουμε:

$$H_{t_2} = \sum_{\vec{k} \in FBZ} \epsilon(\vec{k}) h_{\vec{k}}^\dagger h_{\vec{k}} + \frac{zt_2}{N} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{k} \in FBZ} \Gamma_{\vec{k}-\vec{q}_2} a_{\vec{q}_2}^\dagger h_{\vec{k}+\vec{q}_1-\vec{q}_2}^\dagger h_{\vec{k}} a_{\vec{q}_1} \quad (5.41)$$

$$\text{με } \epsilon(\vec{k}) = zt_2 \Gamma_{\vec{k}} \quad (5.42)$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση (5.32) τις επιμέρους Hamiltonians προκύπτει τελικά:

$$\begin{aligned} H &= E_0 + \sum_{\vec{k} \in FBZ} \epsilon(\vec{k}) h_{\vec{k}}^\dagger h_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k} \in FBZ} \omega(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \\ &+ \frac{t_1 z}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in FBZ} M_{\vec{k}, \vec{q}} h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}} b_{\vec{q}} + h.c \\ &+ \frac{zt_2}{N} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{k} \in FBZ} \Gamma_{\vec{k}-\vec{q}_2} a_{\vec{q}_2}^\dagger h_{\vec{k}+\vec{q}_1-\vec{q}_2}^\dagger h_{\vec{k}} a_{\vec{q}_1} \end{aligned} \quad (5.43)$$

Όπου είναι:

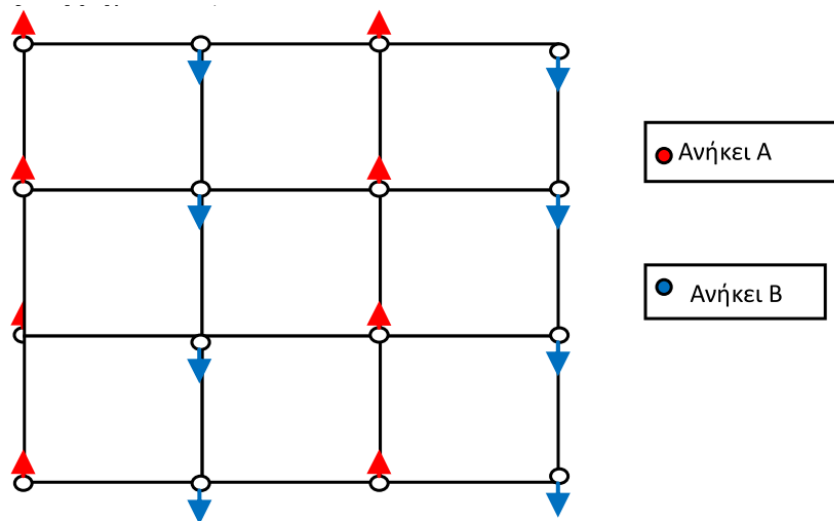
$$M_{\vec{k}, \vec{q}} = u_q \gamma_{\vec{k}} + v_q \gamma_{\vec{k}+\vec{q}}$$

Στον τελευταίο όρο δεν αντικαταστήσαμε τους τελεστές με τον μετασχηματισμό Bogoliubov, διότι ούτως ή άλλως δίνει μηδέν.

5.3.4 Columnar

Το διάνυσμα τάξης στη περίπτωση αυτή είναι $\vec{Q} = (\pi, 0)$, δηλ. το πλέγμα είναι αντισιδηρομαγνητικό κατά τον άξονα $x'x$ και σιδηρομαγνήτης κατά την διεύθυνση $y'y$.

Στο σχήμα 5.5, στην βασική κλασική κατάσταση έχουμε δύο υποπλέγματα, το $A(\uparrow)$ και το $B(\downarrow)$. Θεωρούμε μεταβάση στον κινητικό όρο μεταξύ πρώτων και δευτέρων γειτόνων. Τα αποτελέσματα για την επιμέρους περίπτωση με μετάβαση μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων, προκύπτει θέτοντας στα τελικά αποτελέσματα $t_2 = 0$.



Σχήμα 5.5: Η μορφή Columnar

Η Hamiltonian του προβλήματος είναι:

$$\begin{aligned}
 H = & - t_1 \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} - t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} \\
 & + \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} J_2 \sum_{[[i,j]]} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j
 \end{aligned} \tag{5.44}$$

Η Heisenberg Hamiltonian

Ο όρος Heisenberg αποτελείται από το τμήμα H_{J_1} και το τμήμα H_{J_2} . Εξετάζουμε αρχικά τον όρο H_{J_1} .

Διαδοχικά έχουμε:

$$\begin{aligned}
 H_{J_1} &= \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i,j]} \left(\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right) \\
 &= \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i \in A, j \in A]} (\dots) + \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i \in A, j \in B]} (\dots) \\
 &\quad + \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i \in B, j \in B]} (\dots) + \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i \in B, j \in A]} (\dots)
 \end{aligned} \tag{5.45}$$

Αντικαθιστώντας στην παραπάνω τους τελεστές πιστά με τις σχέσεις (5.6) και (5.7), και μετά από πλήθος πράξεων καταλήγουμε ότι είναι:

$$H_{J_1} = H_{J_1}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \in FBZ} \left[A(\vec{q}) a_{\vec{q}}^\dagger a_{-\vec{q}} + B(\vec{q}) (a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger) \right] \quad (5.46)$$

$$\text{όπου } H_{J_1}^0 = \frac{1}{2} \frac{J_1}{2} z_{sim} \sum_{\vec{q} \in FBZ} \gamma_{\vec{q}}^{sim} \quad (5.47)$$

$$\text{και } A(\vec{q}) = J_1 z_{sim} \gamma_{\vec{q}}^{sim}, \quad B(\vec{q}) = \frac{J_1}{2} z_{dif} \gamma_{\vec{q}}^{dif} \quad (5.48)$$

Όπου είναι:

z_{sim} : το πλήθος των πρώτων γειτόνων που ανήκουν στο ίδιο υπόπλεγμα $A(\uparrow)$ ή $B(\downarrow)$ για κάθε σημείο i του πλέγματος.

z_{dif} : το πλήθος των πρώτων γειτόνων που δεν ανήκουν στο ίδιο υπόπλεγμα $A(\uparrow)$ ή $B(\downarrow)$ για κάθε σημείο i του πλέγματος

$$\gamma_{\vec{q}}^{sim} = \frac{1}{z_{sim}} \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle_{sim}} e^{i\vec{k}\vec{\delta}} \quad \text{και} \quad \gamma_{\vec{q}}^{dif} = \frac{1}{z_{dif}} \sum_{\langle \vec{\delta} \rangle_{dif}} e^{i\vec{k}\vec{\delta}}.$$

Τα $\vec{\delta}_{sim}$ και $\vec{\delta}_{dif}$ είναι οι θέσεις των πρώτων γειτόνων για του ίδιου και του διαφορετικού υποπλέγματος αντίστοιχα. Για το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα είναι:

$$z_{sim} = z_{dif} = 2$$

επίσης

$$\gamma_{\vec{q}}^{sim} = \cos q_y \quad \text{και} \quad \gamma_{\vec{q}}^{dif} = \cos q_x$$

Για τον δεύτερο όρο H_{J_2}

$$\begin{aligned} H_{J_2} &= \frac{1}{2} J_2 \sum_{[[i,j]]} \left(\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right) \\ &= \frac{1}{2} J_2 \sum_{[[i \in A, j \in A]]} (\dots) + \frac{1}{2} J_2 \sum_{[[i \in A, j \in B]]} (\dots) \end{aligned} \quad (5.49)$$

Αντικαθιστώντας πάλι τους τελεστές σύμφωνα με τις σχέσεις (5.6) και (5.7) και μετά από πράξεις παίρνουμε:

$$H_{J_2} = -\frac{J_2 z N}{8} + \frac{1}{2} J_2 z \sum_{\vec{q} \in FBZ} \left[a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \Gamma_{\vec{q}} (a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger) \right] \quad (5.50)$$

Είναι

$$\Gamma_{\vec{q}} = \frac{1}{z} \sum_{\langle\langle \vec{\delta}' \rangle\rangle} e^{i\vec{\delta}'\vec{q}}$$

όπου $\vec{\delta}'$ είναι οι θέσεις των δευτέρων γειτόνων ενός πλεγματοειδούς σημείου. Για το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα είναι:

$$\Gamma_{\vec{q}} = \cos q_x \cos q_y$$

Με την βοήθεια των σχέσεων (5.46) και (5.50) η συνολική Heisenberg Hamiltonian του προβλήματος είναι:

$$H_J = h_J^0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \in FBZ} \left[2E(\vec{q}) a_{\vec{q}}^\dagger a_{-\vec{q}} + L(\vec{q}) (a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger) \right] \quad (5.51)$$

Όπου είναι:

$$h_J^0 = -\frac{J_2 z N}{8} + \frac{J_1}{4} z_{sim} \sum_{\vec{q} \in FBZ} \gamma_{\vec{q}}^{sim} \quad (5.52)$$

$$E(\vec{q}) = \frac{J_2 z}{2} + \frac{J_1 z_{sim} \gamma_{\vec{q}}^{sim}}{2} \quad (5.53)$$

$$L(\vec{q}) = \frac{J_1}{2} z_{dif} \gamma_{\vec{q}}^{dif} + \frac{J_2 z \Gamma_{\vec{q}}}{2} \quad (5.54)$$

Με τον μετασχηματισμό Bogoliubov

$$a_{\vec{k}}^\dagger = u_k b_{\vec{k}}^\dagger + v_k b_{-\vec{k}}$$

διαγωνιοποιούμε τον όρο H_J και τελικά έχουμε:

$$H_J = H_J^0 + \sum_{\vec{q} \in FBZ} \omega(\vec{q}) b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} \quad (5.55)$$

Η σχέση διασποράς $\omega(\vec{q})$ των μαγνονίων και η ενέργεια της βασικής κατάστασης δίνονται από τις σχέσεις:

$$\omega(\vec{q}) = \sqrt{E^2(\vec{q}) - L^2(\vec{q})} \quad (5.56)$$

$$H_J^0 = -\frac{J_2 z N}{8} + \frac{J_1}{4} z_{sim} \sum_{\vec{q} \in FBZ} \gamma_{\vec{q}}^{sim} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \in FBZ} \Phi(\vec{q}). \quad (5.57)$$

Με

$$\Phi(\vec{q}) = -E(\vec{q}) + \sqrt{E^2(\vec{q}) - L^2(\vec{q})}$$

Οι συντελεστές του μετασχηματισμού Bogoliubov δίνονται από τις σχέσεις:

$$u_q = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{L(\vec{q})}{E(\vec{q})} \right)^2}} \right)} \quad (5.58)$$

$$v_q = -\text{sgn} \left(\frac{L(\vec{q})}{E(\vec{q})} \right) \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{L(\vec{q})}{E(\vec{q})} \right)^2}} - 1 \right)} \quad (5.59)$$

Για το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα που μελετάμε είναι:

$$E(\vec{q}) = J_1(2\lambda + \cos q_y) \quad (5.60)$$

$$L(\vec{q}) = J_1 \cos q_x(1 + 2\lambda \cos q_y) \quad (5.61)$$

Επομένως είναι:

$$\omega(\vec{q}) = J_1 \sqrt{(2\lambda + \cos q_y)^2 - \cos^2 q_x(1 + 2\lambda \cos q_y)^2} \quad (5.62)$$

$$H_J^0 = -\frac{J_1}{2} \left\{ N\lambda - 2\sqrt{N} \sum_{\vec{q} \in \text{FBZ}} \cos q_x \right\} + J_1\lambda \sum_{q_x \in \text{FBZ}} \cos q_x \cos q_y \quad (5.63)$$

Ο κινητικός όρος

Ο κινητικός όρος αποτελείται από τον όρο πρώτης μετάβασης και τον όρο δεύτερης μετάβασης:

$$H_t = -t_1 \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} - t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} \quad (5.64)$$

Εξετάζουμε τον κάθε όρο ξεχωριστά. Συγκεκριμένα ο πρώτος όρος δίνει:

$$\begin{aligned} H_{t_1} &= -t_1 \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} \\ &= -t_1 \sum_{\langle i,j \rangle \text{ sim}} \left[\bar{c}_{i\uparrow}^\dagger \bar{c}_{j\uparrow} + \bar{c}_{i\downarrow}^\dagger \bar{c}_{j\downarrow} \right] - t_1 \sum_{\langle i,j \rangle \text{ dif}} \left[\bar{c}_{i\uparrow}^\dagger \bar{c}_{j\uparrow} + \bar{c}_{i\downarrow}^\dagger \bar{c}_{j\downarrow} \right] \end{aligned} \quad (5.65)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (5.6) και (5.7) έχουμε:

$$H_{t_1} = -t_1 \sum_{\langle i \in N, j \rangle \text{ sim}} \left[h_i h_j^\dagger + a_i^\dagger h_i h_j^\dagger a_j \right] - t_1 \sum_{\langle i \in N, j \rangle \text{ dif}} \left[h_i h_j^\dagger a_j + a_i^\dagger h_i h_j^\dagger \right] \quad (5.66)$$

Αντικαθιστώντας τους μετασχηματισμούς Fourier παίρνουμε:

$$\begin{aligned} H_{t_1} &= \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} \epsilon(\vec{k}) h_{\vec{k}}^\dagger h_{\vec{k}} + \frac{t_1 Z \text{ dif}}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in \text{FBZ}} \left[\gamma_{\vec{k}}^{\text{dif}} h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}-\vec{q}} + h.c. \right] \\ &+ \frac{t_1 Z \text{ sim}}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}_1, \vec{q}_2 \in \text{FBZ}} \left[\gamma_{\vec{k}-\vec{q}_2}^{\text{sim}} a_{\vec{q}_2}^\dagger h_{\vec{k}+\vec{q}_1-\vec{q}_2} h_{\vec{k}-\vec{q}_1} \right] \end{aligned} \quad (5.67)$$

Ο τελευταίος όρος έχει μηδενική συνεισφορά και παρακάτω δεν καταγράφεται. Η ενέργεια των οπών είναι:

$$\epsilon(\vec{k}) = t_1 z_{sim} \gamma_{\vec{k}}^{sim} \quad (5.68)$$

και για το διδιάστατο πλέγμα που εξετάζουμε είναι:

$$\epsilon(\vec{k}) = 2t_1 \cos k_y \quad (5.69)$$

Για την μετάβαση οπών μεταξύ δευτέρων γειτόνων με τον ίδιο τρόπο εύκολα προκύπτει ότι είναι;

$$H_{t_2} = \frac{t_2 z}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in FBZ} \left[\Gamma_{\vec{k}} h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}} a_{\vec{q}} + h.c. \right] \quad (5.70)$$

Αντικαθιστώντας στην συνολική Hamiltonian, καθώς και με τους τελεστές του μετασχηματισμού Bogoliubov τελικά προκύπτει:

$$\begin{aligned} H &= H_J^0 + \sum_{\vec{q} \in FBZ} \omega(\vec{q}) b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} + \sum_{\vec{k} \in FBZ} \epsilon(\vec{k}) h_{\vec{k}}^\dagger h_{\vec{k}} \\ &+ \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in FBZ} \left[V(t_1, t_2, \vec{k}, \vec{q}) h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}} b_{\vec{q}} + h.c. \right] \end{aligned} \quad (5.71)$$

Όπου είναι:

$$V(t_1, t_2, \vec{k}, \vec{q}) = \frac{t_1 z_{dif} (u_q \gamma_{\vec{k}}^{dif} + v_q \gamma_{\vec{k}+\vec{q}}^{dif}) + t_2 z (u + q \Gamma_{\vec{k}} + v_q \Gamma_{\vec{k}+\vec{q}})}{\sqrt{N}} \quad (5.72)$$

Στην περίπτωση μετάβασης μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων έχουμε:

$$V(t, \vec{k}, \vec{q}) = \frac{2t}{\sqrt{N}} [u_q \cos k_x + v_q \cos (k_x + q_x)]$$

6

Η Μέθοδος Επιπέδου

Ιστογράμματος Διαγραμματική

Monte Carlo (FHDMC)

Οι μέθοδοι κβαντικό Monte Carlo (QMC) για μποζονικά συστήματα μπορούν να εκτελεστούν για συστήματα μεγάλου μεγέθους τα οποία επιτρέπουν να εξάγουμε συμπεράσματα για το θερμοδυναμικό όριο. Όμως τα συστήματα αλληλεπιδρώντων φερμιονίων και συστήματα spin με frustration πάνω από μία διάσταση πάσχουν από το ανεπιθύμητο πρόβλημα αρνητικού πρόσημου (minus-sign), το οποίο μας οδηγεί σε στατιστικά λάθη τα οποία αυξάνουν εκθετικά με το μέγεθος του συστήματος. Η συντριπτική πλειονότητα των φυσικών συστημάτων είναι φερμιονικά, όπως για παράδειγμα η ηλεκτρονική δομή στερεού, πυρήνες, νετρόνια και υλικά των quark. Επιπλέον κατά την εφαρμογή της υπολογιστικής φυσικής στα φερμιονικά συστήματα έχουμε να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα του μπουτιλιαρίσματος (bottleneck). Η μέθοδος διαγραμματική Monte Carlo (DMC) [13, 14] είναι μια στατιστική διαδικασία υπολογισμού μέσω των τιμών όπου η συλλογή (ensemble) συνίσταται από τα διαγράμματα Feynman μιας πλήρους σειράς αθροίσματος από αυτά. Ο χώρος των αναπαραστάσεων (configuration) είναι τα διαγράμματα Feynman της σειράς. Η ακολουθία Markov d_0, d_1, \dots, d_n , προσδιορίζεται με την μετάβαση $d \rightarrow d'$, όπου η δειγματοληψία γίνεται με σχετικά βάρη ανάλογα της συνεισφοράς του κάθε διαγράμματος στην σειρά. Ένα από τα σπουδαιότερα προτερήματα της μεθόδου είναι ότι αθροίζει μόνο συνεκτικά διαγράμματα και με αυτόν τον τρόπο στην περίπτωση των φερμιονικών συστημάτων το πρόβλημα αρνητικού πρόσημου από ανεπιθύμητο γίνεται ευχή [44]. Η μέθοδος έχει εφαρμοστεί σε ένα μεγάλο πεδίο προβλημάτων όπως στην παγίδευση υπέρ-ψυχρών ατόμων σε οπτικό πλέγμα [45], στην υπεραγωγιμότητα [46], στο πρόβλημα του πολαρονίου του Fermi [13], σε συστήματα συσχετισμένων φερμιονίων [47–49], σε συστήματα εξιτονίων [50], σε κβαντικά συστήματα spin με frustration [51], κ.λ.π.

Οι καλούμενες επιπέδου ιστογράμματος (flat histogram) (FH) [15–17] μέθοδοι έχουν χρησιμοποιηθεί για την βελτίωση στις προσομοιώσεις Monte Carlo σε κλασικά συστήματα, για παράδειγμα σε συστήματα που υπόκεινται μετάβαση πρώτης τάξης, σε συστήματα με απότομη ενεργειακή κατανομή, κ.λπ. Επιπλέον ο αλγόριθμος των Wang και Landau (WL) εφαρμόστηκε στην προσομοίωση κβαντικών συστημάτων για ιδιότητες αυτού ισορροπίας στατιστικής μηχανικής [52]. Πρόσφατα οι Troyer, Wessel, και Alet (TWA) [52] κάνοντας χρήση του γεγονότος ότι, η προσομοίωση QMC χρησιμοποιεί την αντιστοίχιση ενός κβαντικού συστήματος πολλών σωματιδίων με ένα κλασικό σύστημα, μπόρεσαν έτσι να γενικεύσουν την χρήση των τεχνικών FH και για κβαντικά συστήματα πολλών σωματιδίων. Αυτοί έδειξαν ότι ο αλγόριθμος είναι αποτελεσματικός και μείωσε το πρόβλημα σήραγγος κατά την μετάβαση πρώτης τάξης. Επιπλέον υπολόγισαν κατευθείαν την ελεύθερη ενέργεια και την εντροπία του συστήματος. Ακολουθώντας τους οι Gull et al [53] εφάρμοσαν την ιδέα στο κβαντικό Monte Carlo για συνεχή χρόνο σε εφαρμογές της θεωρίας δυναμική μέθodos μέσου πεδίου. Παρότι αυτή η εφαρμογή [53] εμπεριέχει την χρήση της DMC, εντούτοις καταλήγει στον υπολογισμό παρατηρήσιμων μεγεθών με φορμαλισμό όμοιο με στατιστικής ισορροπίας, κάνοντας χρήση των “standard” πυκνοτήτων καταστάσεων, η οποία εμφανίζεται στην συνάρτηση επιμερισμού ως κατανομή η οποία γίνεται επίπεδη με την εφαρμογή του αλγορίθμου WL.

Εμείς εισάγουμε μια άλλη έκδοση της DMC η οποία βελτιώνει δραστικά την μέθοδο και μας επιτρέπει να εξάγουμε ακριβέστερα την συμπεριφορά της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$ για μεγάλες τιμές του φανταστικού χρόνου (μικρές ενέργειες), χωρίς την χρήση οποιασδήποτε a priori γνώσης της συμπεριφοράς του $G(\tau)$. Η ιδέα αυτής της μεθόδου στηρίζεται στον συνδυασμό των αρχών των μεθόδων FH [15, 17] και της μεθόδου DMC. Αυτή η μέθοδος «Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo» (Flat Histogram Diagrammatic Monte Carlo) (FHDMC), μας επιτρέπει να υπολογίσουμε με ακρίβεια και κατευθείαν, χωρίς την εισαγωγή οποιασδήποτε a priori γνώσης της εξάρτησης της συνάρτησης Green $G(\tau)$ της οποίας το μέτρο μεταβάλλεται κατά πολλές τάξεις μεγέθους. Η ιδέα είναι διαφορετική από τους TWA και Gull et al [53] διότι όπως θα γίνει ξεκάθαρο παρακάτω, οι TWA και Gull et al κάμνουν επίπεδη την «πυκνότητα των καταστάσεων» η οποία υπεισέρχεται στην συνάρτηση επιμερισμού, ενώ στην δικιά μας προσέγγιση ο ρόλος των πυκνοτήτων καταστάσεων είναι κατά τέτοιο τρόπο επιλεγμένος ώστε η $G(\tau)$ να γίνει επίπεδη. Παρακάτω περιγράφεται γενικά η μέθοδος FHDMC. Κατόπιν εφαρμόζεται στο παράδειγμα του πολaronίου του Froehlich [54, 55] όπου έχει δειχθεί ότι η εφαρμογή της DMC είναι ακριβής [13, 14], για να δείξουμε την αποτελεσματικότητά της.

6.1 Η Μέθοδος

Για την καλύτερη παρουσίαση της ιδέας μας θεωρούμε μια απλή περίπτωση της μεθόδου DMC. Η μέθοδος DMC είναι μια Markov διαδικασία η οποία πραγματοποιεί δειγματοληψία σε μια άπειρη σειρά της μορφής :

$$G(\tau) = \sum_n^{\infty} I_n(\tau), \quad I_0(\tau) = G^0(\tau), \quad (6.1)$$

$$I_n(\tau) = \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_n F_n(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, \tau), \quad (6.2)$$

όπου καθώς η τάξη n της σειράς αυξάνει, αυξάνει με όμοιο τρόπο και το πλήθος των μεταβλητών ολοκλήρωσης.

Η μέθοδος DMC είναι μια διαδικασία Markov $n \rightarrow n'$ η οποία παράγει την κατανομή $I_0(\tau)$, $I_1(\tau)$, ..., $I_n(\tau)$. Εάν γνωρίζουμε την ακριβή τιμή από έναν από τους όρους της σειράς, έστω τον $I_0(\tau)$, τότε μπορούμε στατιστικά να υπολογίσουμε το πλήρες άθροισμα $G(\tau)$. Έχουμε:

$$I_n(\tau) = \frac{N_n}{N_0} I_0(\tau), \quad (6.3)$$

όπου N_n είναι ο αριθμός των εμφανίσεων του n -οστού όρου στην Markovian ακολουθία. Συνεπώς η διακύμανση(και το λάθος) στον υπολογισμό του $I_n(\tau)$ εξαρτάται πάρα πολύ από τις διακυμάνσεις του N_0 . Άρα αν το $I_0(\tau)$ σε σχέση με τους άλλους όρους της σειράς είναι μικρό, τότε και ο πληθυσμός N_0 θα είναι πολύ μικρός σε σχέση με τον συνολικό πληθυσμό $N_T = \sum_{n=0}^{\infty} N_n$, ο οποίος είναι ο συνολικός αριθμός των επαναλήψεων του Monte Carlo. Κατά συνέπεια το λάθος στον υπολογισμό της τιμής του όρου $I_n(\tau)$ με την βοήθεια της παραπάνω σχέσης θα είναι πολύ μεγάλο. Πιο συγκεκριμένα, καθώς η τιμή του χρόνου τ αυξάνει τότε η τιμή του $n = n_{\max}$ όπου το I_n αποκτά μέγιστη τιμή αυξάνει με το χρόνο τ , το δε $I_{n_{\max}}$ αυξάνει εκθετικά με το τ . Επομένως για αρκετά μεγάλες τιμές του τ ο λόγος $I_{n_{\max}}/I_0$ γίνεται πολλές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερος της μονάδος. Το παραπάνω αντιστοιχεί στο πρόβλημα “κρίσιμο αργό κατέβασμα” (critical slowing down) της κλασικής προσομοίωσης Monte Carlo, οποία μπορεί να αντιμετωπιστεί με τις μεθόδους FH [15–17]. Η μέθοδος “επίπεδο ιστόγραμμα” κανονικοποιεί αυτούς τους πληθυσμούς με γνωστούς συντελεστές (οι οποίοι υπολογίζονται εύκολα) και κατόπιν η δειγματοληψία γίνεται σε λίγο πολύ επίπεδο ιστόγραμμα αυτών των πληθυσμών.

Θα εφαρμόσουμε τις μεθόδους FH [15, 17] σε δύο διαφορετικές εκφάνσεις της DMC. (i) Δειγματοληψία του $G(\tau)$ για σταθερή τιμή του χρόνου τ . Σε αυτή την περίπτωση η εφαρμογή των τεχνικών FH είναι αρκετά όμοια με την εφαρμογή τους στην κλασική στατιστική μηχανική. Εφαρμόζουμε κάθε μια από τις μεθόδους FH με την αντιστοίχιση μιας τιμής του n σε ένα ενεργειακό επίπεδο της στάνταρντ FH και του αντίστοιχου ολοκληρώματος $I_n(\tau)$ στις αντίστοιχες

πυκνότητες καταστάσεων που αντιστοιχούν στις αντίστοιχες αναπαραστάσεις. (ii) Δειγματοληψία στο ιστόγραμμα της $G(\tau)$. Στην περίπτωση αυτή διαιρούμε το διάστημα $[0, \tau_{\max}]$ το οποίο διατρέχει ο χρόνος τ σε L ίσα διαστήματα $\delta_i = [\tau_i, \tau_{i+1})$, όπου είναι $\tau_{i+1} = \tau_i + \Delta\tau$. Τότε επαναλαμβάνουμε την ίδια με πριν διαδικασία με ταυτόχρονη όμως δειγματοληψία της μεταβλητής τ . Επίσης ορίζουμε το ιστόγραμμα των ποσοτήτων $\mathcal{I}_k^{(l)}$ των $I_k(\tau)$ με την σχέση:

$$\mathcal{I}_k^{(l)} = \frac{1}{\Delta\tau} \int_{\tau_{l-1}}^{\tau_l} d\tau I_k(\tau), \quad (6.4)$$

Το ιστόγραμμα g_l της $G(\tau)$ ορίζεται ως

$$g_l = \frac{1}{\Delta\tau} \int_{\tau_{l-1}}^{\tau_l} d\tau G(\tau), \quad (6.5)$$

και τότε ισχύει

$$g_l = \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{I}_k^{(l)} \quad (6.6)$$

Όπως και στην περίπτωση του σταθερού χρόνου τ , η FHDMC μπορεί να εφαρμοστεί και σε τούτη την περίπτωση. Κατά την εφαρμογή τεχνικών FH για να υπολογίσουμε το ιστόγραμμα g_l αντιστοιχούμε την τιμή l με ενεργειακό επίπεδο και την αντίστοιχη τιμή g_l με την αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων της περίπτωσης κλασικής στατιστικής μηχανικής. Θα εφαρμόσουμε δύο τεχνικές FH. Την τεχνική “πολλαπλή κανονικοποίηση” (multicanonical) (MUCA) στην περίπτωση (i) και τον αλγόριθμο WL στην περίπτωση (i) και (ii).

Ο αλγόριθμος της MUCA εφαρμόζεται ως ακολούθως: Στην περίπτωση σταθερού τ κάνουμε ένα αρχικό διερευνητικό τρέξιμο της DMC με το οποίο βρίσκουμε ότι η κατανομή των I_n σε σχέση με το n παρουσιάζει μέγιστο στην τιμή $n = n_{\max}$, που εξαρτάται από την τιμή της μεταβλητής τ . Επίσης διαπιστώνουμε ότι η κατανομή πέφτει ταχέως για $n > n_{\max}$ και έτσι μπορούμε να βρούμε την μέγιστη τιμή n_c του n την οποία επισκέπτεται η διαδικασία Markov. Κατόπιν επιλέγουμε μια τιμή ασφαλείας m μεγαλύτερη της n_c , τέτοια ώστε η τιμή του I_m να είναι πρακτικά μηδέν. Κατόπιν χρεώνουμε σε κάθε n -οστό όρο ένα αρχικό βάρος $w_n^0 = 1$ για $n = 0, 1, 2, \dots, m$. Μετά από ένα καθορισμένο, σχετικά μικρό αριθμό βημάτων της DMC N_0 , επαναπροσδιορίζουμε τα βάρη σε $w_n^1 = w_n^0 / H_n^0$ για όλα τα $n = 0, 1, 2, \dots, m$, όπου H_n^0 είναι το ύψος της κατανομής των αναπαραστάσεων της n -οστής τάξης. Στο επόμενο βήμα εκτελούμε πάλι N_0 βήματα της DMC μετά από τα οποία επαναπροσδιορίζουμε τα βάρη σε $w_n^2 = w_n^1 / H_n^1$ για όλα τα n μικρότερα ή ίσα του m , όπου H_n^1 είναι τα ύψη της νέας κατανομής αναπαραστάσεων της n -οστής τάξης. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μερικές φορές ορίζοντας με αυτό τον τρόπο μια ακολουθία από ιστογράμματα H_n^k και βάρη w_n^k . Στο τέλος κάθε ενός από αυτά τα βήματα ελέγχουμε εάν το ιστόγραμμα H_n^k των n είναι “επίπεδο” εντός ενός

προκαθορισμένου ορίου ανεκτικότητας. Όταν τελικά το ιστόγραμμα H_n^k έγινε επίπεδο κατά το $k = \bar{k}$ βήμα, σταματάμε αυτή την διαδικασία και ξεκινάμε μια τελική διαδικασία εφαρμογής DMC με μεγάλο σχετικό αριθμό επαναλήψεων έχοντας ως βάρη τα $w_n^{\bar{k}}$. Πολλαπλασιάζοντας κατάλληλα το τελικό ιστόγραμμα προσδιορίζουμε το ιστόγραμμα της $G(\tau)$.

Ο αλγόριθμος WL εφαρμόζεται ως ακολούθως: Εφαρμόζουμε την DMC κάνοντας δειγματοληψία με τροποποιημένη πυκνότητα καταστάσεων $F_n/\rho(n)$, για $n = 0, 1, 2, \dots, m$, όπου $\rho(n)$ είναι η a priori άγνωστη πυκνότητα καταστάσεων. F_n είναι το I_n όταν κάνουμε δειγματοληψία των I_n (περίπτωση (i)) και $F_n = g_n$, $n = 1, \dots, L$, όταν κάνουμε δειγματοληψία του ιστογράμματος $G(\tau)$ (περίπτωση(ii)). Αρχικά θέτουμε $\rho(n) = 1$ για όλες τις τιμές του n . Κάθε φορά που μια κατάσταση k εμφανίζεται στη διαδικασία Markov η τιμή της $\rho(k)$ τροποποιείται άμεσα για το επόμενο βήμα ως $\rho(k) \rightarrow \rho(k)f$, όπου ο συντελεστής τροποποίησης είναι $f > 1$. Μετά από ένα συγκεκριμένο, κατά κανόνα μικρό, αριθμό επαναλήψεων N_0 ελέγχουμε εάν το ιστόγραμμα των καταστάσεων είναι επίπεδο ή όχι εντός ορίου το οποίο προεπιλέξαμε και έχει σχέση με το σφάλμα των αποτελεσμάτων. Εάν το ιστόγραμμα δεν είναι επίπεδο επαναλαμβάνουμε τις N_0 επαναλήψεις. Όταν τελικά βρεθεί το ιστόγραμμα επίπεδο, θέτουμε όλες τις τιμές του ιστογράμματος μηδέν και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία με νέο συντελεστή τροποποίησης $f \rightarrow \sqrt{f}$. Σταματάμε όταν η τιμή $f < f_{min}$, όπου η f_{min} είναι προκαθορισμένη και σχετίζεται και αυτή με το σφάλμα της μέτρησης. Οι τελικές τιμές $\rho(n)$ μετά από κανονικοποίηση είναι οι πυκνότητες καταστάσεων και είναι ανάλογες των ζητούμενων τιμών των F_n .

6.2 Εφαρμογή στο Πρόβλημα του Πολαρονίου

Η DMC έχει εκτενώς εφαρμοστεί στη Hamiltonian του πολαρονίου του Froehlich η οποία περιγράφει ένα ηλεκτρόνιο σε ένα πεδίο φωνονίων.

$$H = \sum_{\mathbf{k}} e(k)a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}} + \omega_0 \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^{\dagger}b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} V(\mathbf{q})(b_{\mathbf{q}}^{\dagger} - b_{-\mathbf{q}})a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}, \quad (6.7)$$

$$V(\mathbf{q}) = \frac{i}{\sqrt{\Lambda}} \sqrt{2\sqrt{2}\alpha\pi} \frac{1}{q}, \quad e(k) = \frac{k^2}{2} \quad (6.8)$$

όπου το άθροισμα εκτείνεται πάνω σε όλη την πρώτη ζώνη Brillouin και Λ ο όγκος του συστήματος. Αυτή η Hamiltonian παίρνει υπόψη ένα απλό οπτικό φωνόνιο με σταθερή συχνότητα ω_0 . Οι $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ και $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ είναι οι τελεστές δημιουργίας ηλεκτρονίου και φωνονίου αντίστοιχα. Θα εργαστούμε στο φανταστικό χρόνο και σε θερμοκρασία $T = 0$. Οι ελεύθεροι διαδότες του

ηλεκτρονίου και του φωνονίου αντίστοιχα δίνονται από τις σχέσεις

$$G^0(\mathbf{k}, \tau_2 - \tau_1) = e^{-e(k)(\tau_2 - \tau_1)} \Theta(\tau_2 - \tau_1), \quad (6.9)$$

$$D(q, \tau_2 - \tau_1) = e^{-\omega_0(\tau_2 - \tau_1)}. \quad (6.10)$$

Αν και το πρόγραμμα μας για το computer είναι γενικό και μπορεί να λύσει ακριβώς (εντός βέβαια των στατιστικών λαθών) το πρόβλημα του ενός πολaronίου, επιλέγουμε να περιορίσουμε την δειγματοληψία μας μόνο στα διαγράμματα της άπειρης σειράς που φαίνονται στην εικόνα 6.1. Ο λόγος είναι ότι μπορέσαμε και υπολογίσαμε το άθροισμα αυτής της άπειρης σειράς των επιλεγμένων διαγραμμάτων ακριβώς. Αυτό μας επιτρέπει να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα της DMC και της FHDMC με μία ακριβής λύση. Η σειρά αθροίζεται λύνοντας την εξίσωση Dyson η οποία στην περίπτωση $k = 0$ δίνεται ως;

$$G(\tau) = G^0(\tau) + \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 G^0(\tau_1) \Sigma(\tau_2 - \tau_1) \times G(\tau - \tau_2), \quad (6.11)$$

$$\Sigma(\tau') = 2\alpha \sqrt{2\pi} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} e^{-(q^2/2+1)\tau'}, \quad (6.12)$$

όπου έχουμε θέσει $\omega_0 = 1$. Μπορούμε να μετασχηματίσουμε κατά Laplace την παραπάνω εξίσωση χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες συνέλιξης ολοκληρώματος όπως παρακάτω:

$$\tilde{G}(s) = \tilde{G}^0(s) + \tilde{G}^0(s) \tilde{\Sigma}(s) \tilde{G}(s), \quad (6.13)$$

$$\tilde{G}^0(s) = \frac{1}{s}, \quad \tilde{\Sigma}(s) = \frac{\alpha}{\sqrt{s+1}}, \quad \text{Re}(s) > -1 \quad (6.14)$$

Η οποία δίνει

$$\tilde{G}(s) = \frac{\sqrt{s+1}}{s\sqrt{s+1} - \alpha}. \quad (6.15)$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace δίνεται από την σχέση

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{\sigma-iT}^{\sigma+iT} \tilde{G}(s) e^{s\tau} ds, \quad \sigma > 0. \quad (6.16)$$

Κάνοντας χρήση του αντίστοιχου διαγράμματος Bromwich παίρνουμε

$$G(\tau) = A_0 e^{s_1 \tau} + \frac{e^{-\tau}}{2\pi} \int_0^\infty dr \frac{2\alpha \sqrt{r} e^{-r\tau}}{r(r+1)^2 + \alpha^2}, \quad (6.17)$$

$$A_0 = \frac{s_1^2 + s_1 + \alpha \sqrt{s_1 + 1}}{(s_1 - s_2)(s_1 - s_3)}, \quad (6.18)$$

(a)

$$G = \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \dots$$

(b)

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \text{---}$$

Σχήμα 6.1: (Color online) (a) Μια άπειρη σειρά επιλεγμένων διαγραμμάτων που συνεισφέρουν στην συνάρτηση Green ενός ηλεκτρονίου. (b) Η εξίσωση Dyson η οποία αθροίζει την επιλεγμένη σειρά. Η κυματιστή γραμμή αναφέρεται στον φωνονικό διαδότη, η λεπτή συνεχής στον “γυμνό” φερμιονικό

όπου s_1, s_2, s_3 , είναι οι τρεις ρίζες της εξίσωσης $s^3 + s^2 - \alpha^2 = 0$. Η s_1 είναι η πραγματική ρίζα και s_2 και s_3 μιγαδικές συζυγείς. Για $\alpha = 2$ βρίσκουμε $s_1 = 1.314596$ και $A_0 = 0.7788386$. Ασυμπτωτικά για $\tau \rightarrow \infty$ έχουμε

$$G(\tau) = A_0 e^{s_1 \tau}. \quad (6.19)$$

Συνεπώς η βασική κατάσταση ενέργειας του πολaronίου στην προσέγγιση της σειράς της εικόνας 6.1 είναι $E_0 = -s_1$. Για ένα πεπερασμένο χημικό δυναμικό η $G(\tau)$ πρέπει να τροποποιηθεί στη μορφή $A_0 \exp((s_1 + \mu)\tau)$.

6.3 Ο Αλγόριθμος της Μεθόδου Διαγραμματική Monte Carlo

6.3.1 DMC με σταθερό χρόνο τ .

Όπως προαναφέραμε εφαρμόσαμε την DMC για σταθερό χρόνο. Ο τρόπος εφαρμογής αυτής είναι αρκετά όμοιος με τον τρόπο εφαρμογής από τους Prokof'ev et al. [14]. Περιέχει μόνο μεταβάσεις από την τάξη n στην τάξη $n + 1$, όπου επιλέγουμε την αρχή τ_1 τέλος τ_2 και την ορμή q του φωνονικού διαδότη. Επιπλέον περιέχει μετάβαση από την τάξη n στην τάξη $n - 1$ (εκτός $n = 0$) όπου ο φωνονικός διαδότης αφαιρείται. Τροποποιούμε αυτόν τον αλγόριθμο για να έχουμε προσομοίωση μόνο της σειράς της εικόνας 6.1 ως ακολούθως: Όταν προσπαθεί η Monte Carlo να πάει από n σε $n + 1$, δηλ. προσπαθούμε να προσθέσουμε έναν καινούργιο φωνονικό διαδότη, με χρονικά άκρα κατά σειρά $\tau_1^{(n+1)}$ και $\tau_2^{(n+1)}$, ο ελεύθερος φερμιονικός

διαδότης που θα τοποθετήσουμε την χρονική αρχή $\tau_1^{(n+1)}$ επιλέγεται μεταξύ των διαδοτών οι οποίοι δεν έχουν κοινά άκρα με κάποιο φωνονικό διαδότη. Το τέλος $\tau_2^{(n+1)}$, επιλέγεται μεταξύ του $\tau_1^{(n+1)}$ και του τέλους του ελεύθερου φερμιονικού.

6.3.2 Δειγματοληψία του ιστογράμματος του $G(\tau)$.

Όπως συζητήσαμε νωρίτερα σε αυτή την περίπτωση θεωρούμε το ιστόγραμμα σε διαστήματα δ_i . Η διαδικασία των update μεταξύ διαφορετικής τάξης n είναι η ίδια όπως και στην περίπτωση σταθερού χρόνου, την οποία συζητήσαμε προηγουμένως. Εδώ επιπλέον επιτρέπουμε και μεταβάσεις σε διαφορετικό χρόνο τ' ο οποίος μπορεί να ανήκει σε διαφορετικό διάστημα. Η τιμή του τ' επιλέγεται όπως και στην αναφορά [14], με την μόνη διαφορά ότι ο τ' επιλέγεται στο διάστημα $[\tau_{\text{end}}, \tau_{\text{max}}]$ αντί του διαστήματος $[\tau_{\text{end}}, \infty]$ (όπου τ_{end} είναι το τέλος του τελευταίου φωνονικού διαδότη στο συγκεκριμένο διάγραμμα.

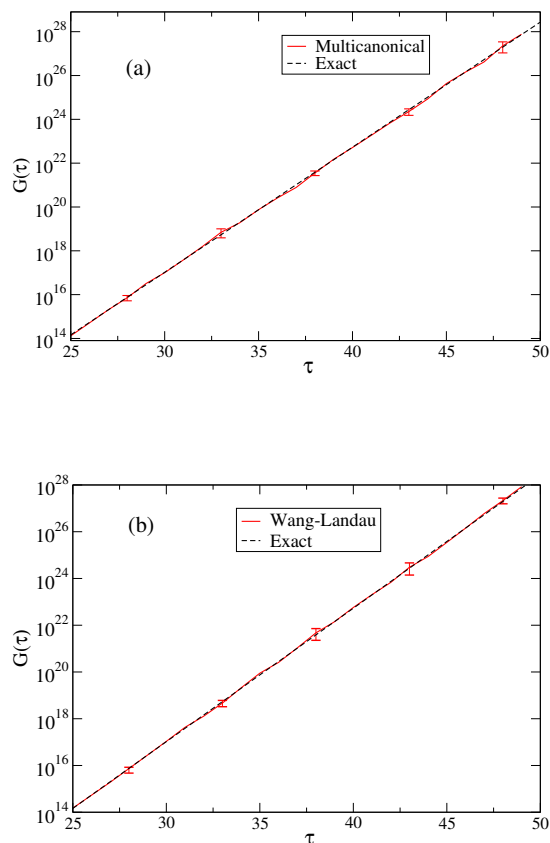
6.4 Αποτελέσματα και Συγκρίσεις

Στην Εικ. 6.2 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών μας της $G(\tau)$ για σταθερές τιμές του τ . Τα αποτελέσματα της FHDMC έχουν ληφθεί με εφαρμογή της MUCA [15] (πάνω της Εικ. 6.2) και με τον αλγόριθμο WL [17] (κάτω της Εικ. 6.2) για το αναγόμενο πρόβλημα του πολaronίου. Υπολογίσαμε την $G(\tau)$ για $\tau = 25.0, 26.0, \dots, 49.0$ και για προσεγγιστικά το ίδιο ποσό CPUχρόνου ώστε να μπορούμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα μεταξύ τους.

Κατά την εφαρμογή της MUCA για δεδομένη τιμή της τ , η ανεκτικότητα για να θεωρηθεί επίπεδο το ιστόγραμμα ήταν ότι για τις τιμές του ιστογράμματος των $I_n(\tau)$ για κάθε n να είναι η κάθε μία μικρότερη του δύο και μεγαλύτερη του μισού της τιμής του ιστογράμματος για το $I_0(\tau)$. Η επακανονικοποίηση της πυκνότητας των καταστάσεων γινόταν κάθε 10^5 επαναλήψεις. Αφού το ιστόγραμμα έγινε “επίπεδο”, εκτελέσαμε 3×10^7 επαναλήψεις για κάθε τιμή του τ . Ο ολικός αριθμός των επαναλήψεων που απαιτήθηκε ήταν 8×10^8 .

Κατά την εφαρμογή του αλγόριθμου Wang-Landau, δώσαμε αρχική τιμή του παράγοντα τροποποίησης $f = e$ και τον ελαττώναμε σύμφωνα με την σχέση $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ κάθε φορά που το ιστόγραμμα γινόταν επίπεδο. Η ανεκτικότητα για να ήταν επίπεδο ήταν τέτοιο ώστε η απόλυτη τιμή της διαφοράς του ιστογράμματος H_n για κάθε n από την μέση τιμή του ιστογράμματος \bar{H} να είναι μικρότερη του $\bar{H}/10$. Ο έλεγχος γινόταν κάθε 10^5 επαναλήψεις. Επιλέξαμε η τελική τιμή του παράγοντα f να είναι 1.000007629. Ο ολικός αριθμός επαναλήψεων που απαιτήθηκε ήταν περίπου 8×10^8 .

Σημειωτέον ότι και οι δύο αλγόριθμοι υπολογίζουν την $G(\tau)$ για κάθε τ συμπεριλαμβανομένων και μεγάλων τιμών του τ όπου η $G(\tau)$ μεταβάλλεται κατά πολλές τάξεις μεγέθους. Από το fitting για μεγάλα τ σε τμήμα της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$ με

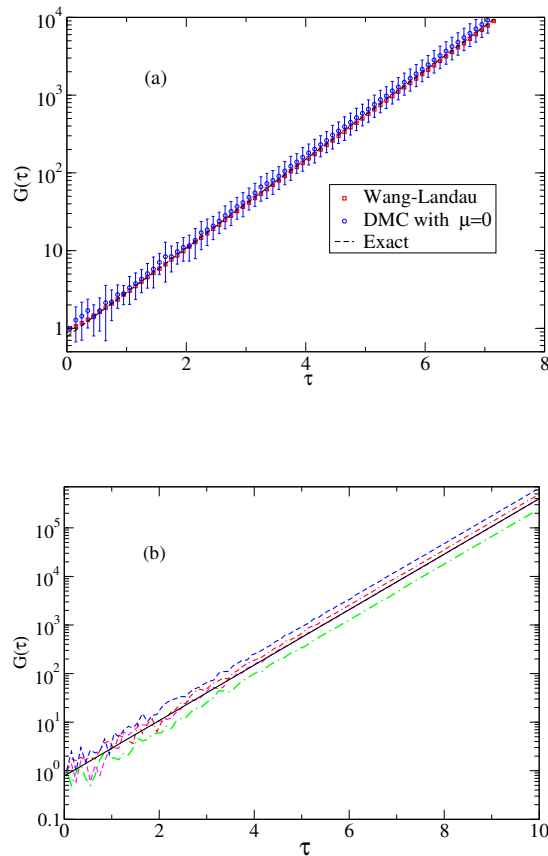


Σχήμα 6.2: Αποτελέσματα της FHDMC για την περίπτωση σταθερού χρόνου τ για το αναγόμενο πρόβλημα του πολαρονίου. Επάνω: Τα αποτελέσματα της FHDMC ελήφθησαν με εφαρμογή της MUCA [15]. Κάτω: Τα αποτελέσματα της FHDMC ελήφθησαν με εφαρμογή του αλγορίθμου των Wang-Landau [17] για τον ίδιο CPU. Σχεδιάστηκε επίσης και η “ακριβής” λύση με σκοπό την σύγκριση.

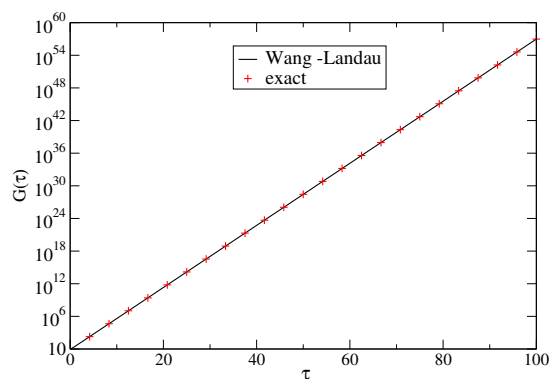
ένα απλό εκθετικό $G(\tau) = Ze^{-E_0\tau}$, βρίσκουμε ότι στην περίπτωση της MUCA η ενέργεια της βασικής κατάστασης είναι $E_0 = -1.310 \pm 0.004$ και $Z = 0.88 \pm 0.11$, στην περίπτωση δε του αλγορίθμου WL είναι $E_0 = -1.311 \pm 0.004$ και $Z = 0.88 \pm 0.12$. Υπενθυμίζουμε ότι η ακριβής λύση είναι $E_0 = -1.3146$ and $Z = 0.77883$.

6.5 Αποτελέσματα και Συγκρίσεις

Η Εικ. 6.3(a) συγκρίνει τα αποτελέσματα για δειγματοληψία και στο χρόνο της FHDMC και της DMC χωρίς τη χρήση των καλούμενων οδηγητριών συναρτήσεων, δηλ. $\mu = 0$. Προσομοίωση με την χρήση της WL ήταν όπως περιγράφηκε στα αποτελέσματα της Εικ. 6.2 για τον υπολογισμό της $G(\tau)$ για σταθερό χρόνο. Με σκοπό την σύγκριση η DMC εφαρμόστηκε για περίπου



Σχήμα 6.3: (a) Σύγκριση των ιστογραμμάτων της $G(\tau)$ που υπολογίστηκαν με την DMC και την FHDMC. Επίσης για σύγκριση έχει σχεδιαστεί και η ακριβής. (b) Τα αποτελέσματα της DMC για τέσσερα διαφορετικά τρεξίματα συγκρινόμενα με την ακριβή λύση (συνεχής γραμμή). Δες κείμενο για λεπτομέρειες.



Σχήμα 6.4: Σύγκριση της ακριβούς λύσης με τα αποτελέσματα της FHDMC για την $G(\tau)$, όπου έγινε χρήση του αλγορίθμου WL. Τα λάθη είναι τόσο μικρά που δεν φαίνονται στην κλίμακα παρουσίασης και για αυτό παραλείφθηκαν. Σημειωτέων ότι για το ιστόγραμμα χρησιμοποιήσαμε 2000 διαστήματα χρόνου.

τον ίδιο CPU χρόνο. Παρατηρούμε ότι ενώ τα στατιστικά λάθη για την WL είναι αμελητέα (στο μέγεθος των συμβόλων για αυτή την Εικόνα), για την DMC έχουμε σημαντικά στατιστικά λάθη. Και ενώ συμβαίνει αυτό παρατηρούμε ότι από διάστημα σε διαδοχικό διάστημα σε ένα παράθυρο του χρόνου η διακύμανση της μέσης τιμής γύρω από την ακριβή λύση δεν είναι τέτοια ώστε να είναι συνεπής με το στατιστικό λάθος. Για να ξεκαθαρίσουμε αυτό δείχνουμε και την Εικ. 6.3(b), με τα αποτελέσματα για τέσσερα διαφορετικά τρεξίματα όπου για το κάθε ένα χρησιμοποιήθηκε το ίδιο ποσό CPU χρόνου ξεκινώντας από διαφορετική αρχική τυχαία αναπαράσταση. Παρατηρούμε ότι από το ένα τρέξιμο στο επόμενο τα αποτελέσματα του ιστογράμματος μετακινούνται με έναν συσχετισμένο τρόπο (δηλ. μαζί) πάνω ή κάτω και οι τέσσερις γραμμές είναι μεταξύ τους παράλληλες για τις μεγάλες τιμές του τ . Ο λόγος για αυτό είναι ο παρακάτω: Επειδή η $G(\tau)$ αυξάνει εκθετικά με το χρόνο, έχουμε ότι $g_n \gg g_1$ για μεγάλα n . Συνέπεια αυτού είναι ο αριθμός των βημάτων της Monte Carlo που “πέφτουν” στο πρώτο διάστημα να είναι σχετικά λίγα. Αυτό σημαίνει ότι η στατιστική διακύμανση του ύψους του πρώτου ιστογράμματος να είναι πολύ μεγαλύτερη από τα άλλα διαστήματα. Όμως με την μέθοδο DMC οι τιμές του g_n λαμβάνονται απλά πολλαπλασιάζοντας το λόγο των αντίστοιχων υψών του ιστογράμματος με την τιμή του g_1 , η οποία είναι αναλυτικά γνωστή. Έτσι λόγω της μεγάλης διακύμανσης η τιμή του H_1 μεταξύ δύο διαφορετικών τρεξιμάτων είναι πολύ διαφορετική και αυτό επιδρά σε όλο το ιστόγραμμα με ένα πολλαπλασιαστικό παράγοντα.

Το πρόβλημα που συζητήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, όταν η DMC εφαρμόστηκε στο πρόβλημα του πολαρονίου [14], αντιμετωπίστηκε με την χρήση μιας οδηγέτριας εκθετικής συνάρτησης. Η DMC όπως αυτή χρησιμοποιήθηκε στο πρόβλημα του πολαρονίου [14], χρησιμοποιεί το χημικό δυναμικό ως “συντονίζουσα παράμετρο” για να μειώσει την παραπάνω αναφερόμενη διακύμανση. Σε αυτό ειδικά το πρόβλημα η ακριβής ασυμπτωτική λύση για την $G(\tau)$ είναι ένα απλό εκθετικό, $G(\tau) = Z \exp(-E_0 \tau)$, όπου E_0 είναι η ενέργεια της βασικής κατάστασης. Επομένως η χρήση ενός χημικού δυναμικού μ η οποία αντιστοιχεί στον πολλαπλασιασμό της $G(\tau)$ με ένα εκθετικό παράγοντα $\exp(\mu \tau)$ με το μ ως μια συντονίζουσα παράμετρο είναι απλή και αποτελεσματική στο να κάνει επίπεδο το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ για μεγάλα τ . Για το πρόβλημα του πολαρονίου το ιστόγραμμα γίνεται επίπεδο εάν επιλέξουμε $\mu \sim E_0$. Συνεπώς μια επιλογή του μ κοντά στη E_0 βελτιώνει σημαντικά την στατιστική της DMC. Άρα η χρήση του χημικού δυναμικού μ δουλεύει επειδή μια τέτοια οδηγέτρια συνάρτηση κάνει το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ επίπεδο. Όμως αυτή η μέθοδος της χρήσης μιας τέτοιας οδηγέτριας συνάρτησης είναι υποδεέστερη της παρούσας μεθόδου για τους παρακάτω λόγους: Δεν έχουμε καμιά a priori γνώση για την οδηγέτρια συνάρτηση για τα πιο σύνθετα προβλήματα. Επίσης μια εκθετική εξάρτηση της $G(\tau)$ με ένα χαρακτηριστικό εκθετικό δεν είναι ο γενικός κανόνας σε ένα πρόβλημα ενός συστήματος πολλών σωματιδίων. Για ένα τέτοιο

πρόβλημα γενικά η συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου μπορεί να γραφεί ως

$$G(\tau) = \int_0^{\infty} d\omega A(\omega) e^{-\omega\tau} \quad (6.20)$$

όπου το $A(\omega)$ συσχετίζεται με την αναλυτική συνέχιση της φασματικής συνάρτησης στον φανταστικό χρόνο. Άρα γενικώς αναμένουμε να χρειαζόμαστε μια συνέχεια ως προς την ενέργεια εκθετικά. Στα πιο ενδιαφέροντα συστήματα δεν είναι απλό να προσεγγίσουμε το $A(\omega)$ με την προσέγγιση που χρησιμοποιούνται στις αναφορές [13, 14]. Όμως η μέθοδος που παρουσιάζετε εδώ κατασκευάζει την ακριβή πυκνότητα καταστάσεων χωρίς καμιά a priori γνώση γύρω από αυτή.

Επίσης για να δείξουμε την ισχύ της παρούσας μεθόδου παρουσιάζουμε στην Εικ. 6.4 τον υπολογισμό του ιστογράμματος της $G(\tau)$ με ένα λεπτομερές πλήθος 2000 του χρόνου που διατρέχει από το 0 μέχρι το 100. Ο υπολογισμός έγινε περίπου σε τρεις μέρες CPU χρόνο από έναν απλό επεξεργαστή 3 GHz. Παρατηρούμε ότι η συμφωνία με την ακριβή λύση είναι εξαιρετική, αν και έχουμε μεταβολή της μέχρι 60 τάξεις μεγέθους.

6.6 Συμπεράσματα

Συμπερασματικά, έχουμε παρουσιάσει την FHDMC, η οποία στηρίζεται στην ιδέα των μεθόδων FH για να βελτιώσει την DMC. Η ιδέα επιδεικνύεται για ένα επιλύσιμο πρόβλημα, όμως είναι πολύ γενική και μπορεί να εφαρμοσθεί, όπου μπορεί και να εφαρμοσθεί και η DMC. Δείξαμε ότι με αυτή την μέθοδο οι σταδιακές διακυμάνσεις μπορούν να ελεγχθούν ακόμη και για μεγάλες τιμές του φανταστικού χρόνου, χωρίς την χρήση οποιασδήποτε a priori γνώσης της συμπεριφοράς της $G(\tau)$

7

Αναλυτική Συνέχιση και Μέθοδος Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo

Το κβαντικό Monte Carlo το οποίο είναι ένα χρήσιμο εργαλείο στο κβαντικό πρόβλημα των πολλών σωματιδίων δεν μπορεί να κάνει προσομοίωση σε δυναμικές πραγματικού χρόνου. Με την αναλυτική συνέχιση στον Ευκλείδειο χρόνο τ ($t \rightarrow -i\tau$), μετατρέπει την εξίσωση Schrödinger σε μία εξίσωση διάχυσης για την οποία μπορεί να γίνει προσομοίωση με την χρήση τυχαίων περιπατητών. Οι περιπατητές αυτοί ερευνώντας τη μορφή του δυναμικού ξοδεύουν πολύ χρόνο στις κοιλάδες του δυναμικού και λιγότερο στα υψηλά σημεία του δυναμικού. Ο ίδιος μετασχηματισμός στο φανταστικό χρόνο μετατρέπει την αναπαράσταση ενός τελεστή με ολοκληρώματα διαδρομών, από ένα ολοκλήρωμα πάνω σε διαδρομές του υπολογιστικού δυσάρεστου παράγοντα φάσης, ένα πρόβλημα σχεδόν αδύνατον να το μεταχειριστούμε στοχαστικά, σε ένα ολοκλήρωμα σε διαδρομές στον φανταστικό χρόνο με βάρος για το κάθε ένα πραγματικό και θετικό που μπορεί να θεωρηθεί σαν τα βάρη Boltzmann της στατιστικής. Ερμηνεύοντας αυτά τα βάρη σαν καλώς συμπεριφερόμενη πιθανότητα για την κάθε διαδρομή που συνεισφέρει στο άθροισμα, μας επιτρέπει να μεταχειριστούμε το πρόβλημα κατ' ευθείαν στοχαστικά [56].

Αν ενδιαφερόμαστε να πάρουμε πληροφορία για την δυναμική του πραγματικού χρόνου και πληροφορίες για τις διεργασίες του συστήματος τότε θα πρέπει να «αντιστρέψουμε» τα αποτελέσματα για μία συνάρτηση συσχέτισης $C(\tau)$ ενός τελεστή \hat{O} , ο οποίος αντιστοιχεί σε ένα παρατηρήσιμο μέγεθος δηλ.

$$C(\tau) = \langle \hat{T}_\tau \hat{O}(\tau) \hat{O}^\dagger(0) \rangle, \quad (7.1)$$

(όπου ο \hat{T}_τ είναι ο τελεστής διάταξης φανταστικού χρόνου) από τον φανταστικό πίσω στον πραγματικό χρόνο.

Η αναλυτική συνέχιση στον πραγματικό χρόνο είναι η διαδικασία της «αριθμητικής αντιστροφής» των δεδομένων από το κβαντικό Monte Carlo (QMC) για τον $C(\tau)$ με αποτέλεσμα της αντιστροφής τη φασματική συνάρτηση $A(\omega)$. Αυτό είναι ένα ασθενώς τοποθετημένο πρόβλημα. Οι τεχνικές αντιστροφής όπως η Μέθοδος Μεγίστης Εντροπίας [20] ή η εναλλακτική της Στοχαστικής Αναλυτικής Διαδικασίας (stochastic analytical inference (SAI) [18, 19], απαιτούν καλά στατιστικά αποτελέσματα του QMC για την $C(\tau)$. Ενδιαφερόμαστε κυρίως για δειγματοληψία του μεγάλου φανταστικού τμήματος μιας τέτοιας συνάρτησης συσχέτισης ή απόκρισης διότι αναδύονται συλλεκτικά φαινόμενα στις περιοχές ενέργειας που είναι μικρότερα από την τυπική ενέργεια αλληλεπίδρασης, μικρού εύρους. Τέτοιες συναρτήσεις απόκρισης που λαμβάνονται με εφαρμογή QMC είναι πληροφορία με θόρυβο και με περιορισμό του εύρους του τ . Εάν ενδιαφερόμαστε να εξάγουμε τις διεργασίες χαμηλής ενέργειας, η πληροφορία κρύβεται πιο καθαρά στην εξέλιξη των συναρτήσεων συσχέτισης σε μεγάλους φανταστικούς χρόνους, η οποία τυπικά παρεμποδίζεται από τα στατιστικά λάθη.

Οι μέθοδοι επιπέδου ιστογράμματος (flat histogram) (FH) ήταν πολύ χρήσιμες για τα κλασικά συστήματα [15–17, 57] για να ξεπεραστούν τα προβλήματα προσομοίωσης της μετάβασης φάσης πρώτης τάξης, για συστήματα με απότομα διαγράμματα πυκνοτήτων ενεργειακών καταστάσεων. Η ιδέα επεκτάθηκε στα κβαντικά προβλήματα πολλών σωματιδίων, στη στοχαστική σειρά επέκτασης [52] για το ξεπέρασμα του προβλήματος tunnel στην πρώτη τάξης μετάβαση φάσης, στη θεωρία δυναμικού μέσου πεδίου και στη μέθοδο διαγραμμάτων Monte Carlo.

Η κύρια ιδέα που θέλουμε να παρουσιάσουμε συνοψίζεται στα παρακάτω: Δείχνουμε ότι οι μέθοδοι FH μπορούν να εφαρμοστούν στο QMC για να κάνουν το ιστόγραμμα της $C(\tau)$ επίπεδο για όλα τα τ με δειγματοληψία στην μεταβλητή τ . Με αυτόν τον τρόπο είμαστε ικανοί να υπολογίσουμε την $C(\tau)$ μέχρι μεγάλους χρόνους με σημαντικά μικρότερο στατιστικό λάθος. Αυτή η προσέγγιση μας επιτρέπει να πετύχουμε μεγαλύτερο βαθμό ακρίβειας για την αντίστοιχη συνάρτηση $A(\omega)$ για όλο το φάσμα του ω , αντιστρέφοντας την πληροφορία που περιέχεται στην $C(\tau)$.

Για να παρουσιάσουμε την ιδέα μας χρειαζόμαστε να κάνουμε τις εξής ειδικές επιλογές:

1. ενός μη τετριμμένου προβλήματος πολλών σωματιδίων,
2. ενός ειδικού αλγόριθμου QMC,
3. μιας ειδικής συνάρτησης συσχέτισης $C(\tau)$, και
4. μιας μεθόδου για την εκτέλεση της αναλυτικής συνέχισης.

Χρησιμοποιώντας τις ίδιες μεθόδους και τεχνικές, θα υπολογίσουμε την φασματική συνάρτηση $A(\omega)$ χρησιμοποιώντας QMC με και χωρίς την εφαρμογή τεχνικών FH κατά τη διάρκεια που τρέχει η QMC μέθοδος που παράσχει την πληροφορία για την $C(\tau)$. Θα δείξουμε ότι η μέθοδος flat histogram QMC είναι ανώτερη από την απλή QMC στην οποία δεν εφαρμόζουμε τις ιδέες του FH. Επιλέγουμε το πρόβλημα της συνάρτησης Green $G_{\vec{r}}(\tau)$ μιας οπής όπως στο μοντέλο $t - J$ [12, 58] με την μέθοδο διαγραμματική Monte Carlo (DMC) [13, 14] χρησιμοποιώντας

την Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία (SAI) [19] για την αναλυτική συνέχιση για να πάρουμε την φασματική συνάρτηση $A_{\vec{k}}(\omega)$ από την πληροφορία για την $G_{\vec{k}}(\tau)$ που λαμβάνουμε από την QMC.

Εφαρμόζουμε την ιδέα FH συνδυάζοντας την μέθοδο DMC και τον αλγόριθμο Wang-Landau, την οποία θα αναφέρουμε ως μέθοδο επιπέδου ιστογράμματος διαγραμματικού Monte Carlo (FHDMC) (όπως περιγράψαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο). Επίσης θα χρησιμοποιήσουμε τη standard εφαρμογή της DMC [13, 14] όπου κατά της δειγματοληψία της $G_{\vec{k}}(\tau)$ χρησιμοποιείται μία οδηγήτρια συνάρτηση. Στην τελευταία περίπτωση, όπως θα δούμε, η χρήση μιας παραμέτρου μ επιδρά κάνοντας το ιστόγραμμα της $G_{\vec{k}}(\tau)$ επίπεδο. Από την άλλη πλευρά θα εφαρμόσουμε την DMC με $\mu = 0$ χωρίς την εφαρμογή της ιδέας FH, στην οποία θα αναφερόμαστε ως DMC0 και η οποία αποφέρει ένα ιστόγραμμα της $G_{\vec{k}}(\tau)$ το οποίο απέχει πολύ από το να είναι flat και θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματα με εκείνα από τις παραπάνω δύο μεθόδους QMC δηλ. την standard DMC και την FHDMC. Αυτή η σύγκριση γίνεται δια να αναδειχθεί ότι εάν συνδυαστεί η ιδέα FH με οποιαδήποτε μέθοδο QMC, αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα πιο ακριβή αναλυτική συνέχιση στον πραγματικό χρόνο. Παρακάτω:

- α') Περιγράφουμε το πρόβλημα, το μοντέλο και τη γενική προσέγγιση που θα ακολουθήσουμε.
- β') Περιγράφουμε τις λεπτομέρειες των υπολογισμών και την τεχνική της SAI την οποία υιοθετούμε.
- γ') Παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα για την φασματική συνάρτηση τα οποία λαμβάνονται από την DMC0, την standard-DMC και την FHDMC μέθοδο, τα οποία συγκρίνονται με αυτό το οποίο πιστεύουμε ότι είναι “ακριβής” (“exact”) λύση για μία επίλυση όμως περιορισμένης έκδοσης του μοντέλου $t - J$.
- δ') Τέλος παρουσιάζουμε τα κυριότερα από τα συμπεράσματα που προκύπτουν.

7.1 Μέθοδος

Πιο συγκεκριμένα παίρνουμε το παράδειγμα όπου ο τελεστής \hat{O}^\dagger είναι ο τελεστής δημιουργίας ενός σωματιδίου $a_{\vec{k}}^\dagger$, οπότε η $C(\tau)$ γίνεται συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου ενός σωματιδίου $G_{\vec{k}}(\tau)$. Στην περίπτωση αυτή η φασματική συνάρτηση $A_{\vec{k}}(\omega)$ συνδέεται με τη $G_{\vec{k}}(\tau)$ με τη σχέση

$$G_{\vec{k}}(\tau) = \int d\omega K(\tau, \omega) A_{\vec{k}}(\omega), \quad (7.2)$$

όπου το καλούμενο kernel $K(\tau, \omega)$ έχει τη μορφή $e^{-\omega\tau}$. Η φασματική συνάρτηση είναι μη αρνητική ποσότητα και κανονικοποιημένη στη μονάδα.

Θεωρούμε ένα πεπερασμένο διάστημα του φανταστικού χρόνου $0 < \tau < \tau_{\max}$ και το διαιρούμε σε L ίσα διαστήματα. Ολοκληρώνοντας την εξίσωση 7.2 σε κάθε χρονικό διάστημα παίρνουμε

$$\mathcal{G}_{\vec{k}}(i) = \int d\omega \bar{K}(i, \omega) A_{\vec{k}}(\omega), \quad (7.3)$$

$$\mathcal{G}_{\vec{k}}(i) \equiv \frac{1}{\Delta\tau_i} \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} G_{\vec{k}}(\tau) d\tau, \quad (7.4)$$

είναι $\bar{K}(i, \omega)$ η μέση τιμή του kernel $K(\tau, \omega) = e^{-\omega\tau}$ στο i διάστημα. Δηλ. $\bar{K}(i, \omega) = \frac{e^{-\omega\tau_i}}{\omega\Delta\tau_i} [e^{\omega\Delta\tau_i} - 1]$.

Στο προηγούμενο κεφάλαιο δείξαμε ότι μπορούμε να εφαρμόσουμε την τεχνική flat histogram (FH) στην καλούμενη διαγραμματική Monte Carlo μέθοδο [13, 14, 59–62] για να κάνουμε το ιστογράμμα $\mathcal{G}_{\vec{k}}(i)$ της $G_{\vec{k}}(\tau)$ επίπεδο. Η ιδέα είχε παρουσιαστεί για το πρόβλημα του πολaronίου του Froehlich. Τα αποτελέσματα της FHDMC για τη βασική κατάσταση του πολaronίου ήταν σημαντικά καλύτερα από αυτά της DMC0.

Χρησιμοποιούμε μία απλούστερη εκδοχή του $t - J$ μοντέλου, όπου οι όροι Heisenberg και οι μεταβάσεις οπής είναι γραμμικοποιημένοι εντός της προσέγγισης κυμάτων spin (spin wave). Τότε η Hamiltonian όμοια με αυτή του πολaronίου [5, 12], δηλαδή

$$\begin{aligned} \hat{H} &= - \sum_{\vec{k}, \vec{q}} g(\vec{k}, \vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} b_{\vec{q}} + H.c. \\ &\quad + \sum_{\vec{k}} \hbar\omega(k) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}, \end{aligned} \quad (7.5)$$

$$g(\vec{k}, \vec{q}) = \frac{4t}{\sqrt{N}} (u_{\vec{q}} \gamma_{\vec{k}-\vec{q}} + v_{\vec{q}} \gamma_{\vec{k}}), \quad (7.6)$$

$$\gamma_{\vec{k}} = -2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)). \quad (7.7)$$

Όπου ο τελεστής $b_{\vec{q}}^\dagger$ είναι ο τελεστής δημιουργίας ενός κύματος spin, $\omega(k)$ είναι η διασπορά των κυμάτων spin ενός τετραγωνικού κβαντικού αντισιδηρομαγνητικού πλέγματος [63], $a_{\vec{k}}^\dagger$ είναι ο τελεστής δημιουργίας οπής, $g(\vec{k}, \vec{q})$ είναι η σύζευξη της οπής και των κυμάτων spin και $u_{\vec{k}}$ and $v_{\vec{k}}$ είναι οι συντελεστές του μετασχηματισμού Bogoliubov όπως δίνονται στο [63].

Η φασματική συνάρτηση της μιας οπής για την παραπάνω Hamiltonian μπορεί να προσεγγιστεί με την προσέγγιση των μη τεμνομένων διαγραμμάτων προσέγγιση (NCA) (non-crossing approximation) [5, 12, 58]. Η μέθοδος DMC [59–62] με ή χωρίς την συνδρομή των τεχνικών FH μπορεί να εφαρμοστεί στο πρόβλημα της μίας οπής. Στο πρόβλημα περιορίζουμε την DMC στη δειγματοληψία μόνο των διαγραμμάτων που συνεισφέρουν στον NCA. Αυτός ο περιορισμός είναι πολύ πιο δύσκολος αριθμητικά από τη δειγματοληψία σε όλα τα συνεκτικά διαγράμματα που συνεισφέρουν στο $G_{\vec{k}}(\tau)$. Ο λόγος του περιορισμού εντός του διαγραμματικού χώρου

της NCA είναι επειδή στην περίπτωση αυτή υπάρχει μία «ακριβή» λύση του προβλήματος σε σχέση με την οποία μπορούμε να μετρήσουμε την προσέγγιση που επιχειρούμε εδώ. Για να λάβουμε την «ακριβή» λύση επαναλαμβάνουμε τον υπολογισμό της συνάρτησης Green μίας οπής εντός της NCA όπως περιγράφεται στην αναφορά [12] για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και μεγέθους 32×32 τετραγωνικό πλέγμα. Το δε πεπερασμένο φανταστικό μέρος που χρησιμοποιήθηκε στον διαδότη της ελεύθερης οπής ήταν με $\epsilon = 0.002$ (σε μονάδες της παραμέτρου t) η οποία σμιλεύει το μέγιστο της χαμηλότερης ενέργειας του οιονεί σωματιδίου (quasi-particle). Τα αποτελέσματα αυτού του υπολογισμού θα χρησιμοποιηθούν ως default μοντέλο και η αναφορά σε αυτό θα είναι ως «ακριβής» λύση.

Εφαρμόσαμε τις μεθόδους DMCO, την standard DMC και την FHDMC για να λάβουμε $G_{\vec{k}}(\tau)$ για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και $J/t = 0.2$, με τον περιορισμό στον χώρο των διαγραμμάτων της NCA. Επίσης εκτελέσαμε προσομοιώσεις QMC για μία σειρά από τιμές της ποσότητας J/t και κάναμε συγκρίσεις των αποτελεσμάτων με τα «ακριβή» αποτελέσματα, ώστε να είμαστε σίγουροι για την ορθότητα του προγράμματος του υπολογισμού.

Έστω λαμβάνουμε ένα σύνολο πληροφορίας $G_{\vec{k}}^{(d)}(i, j)$ $i = 1, \dots, L$, $j = 1, \dots, N_d$ της $\mathcal{G}_{\vec{k}}(i)$ προερχόμενο από οποιοδήποτε από τις τρεις μεθόδους QMC. Το j αναφέρεται σε συγκεκριμένη μέτρηση. Για την αναλυτική συνέχιση θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο SAI. Με την SAI η φασματική συνάρτηση της $A_{\vec{k}}(\omega)$ λαμβάνεται ως μέση μορφή όλων των πιθανών μορφών σε μία ολοκλήρωση Monte Carlo όπου οι επιμέρους μορφές της $A_{\vec{k}}(\omega)$ επιλέγονται από μία κατανομή που καθορίζεται από με το αποκαλούμενο default μοντέλο $D_{\vec{k}}(\omega)$. Η πιθανότητα για κάθε προτεινόμενη μορφή του $A_{\vec{k}}(\omega)$ να είναι η αληθινή μορφή για τα δεδομένα $G_{\vec{k}}^{(d)}(i, j)$ είναι

$$P[A/G_{\vec{k}}^{(d)}] \sim e^{-\frac{\chi^2[A]}{2\alpha}}, \quad (7.8)$$

Όπου $\chi^2[A]$ είναι το χ^2 καθοριζόμενα από τα δεδομένα $G_{\vec{k}}^{(d)}(i, j)$ της $\mathcal{G}_{\vec{k}}(i)$ και τα αποτελέσματα τα οποία λαμβάνονται από την εξίσωση 7.2 χρησιμοποιώντας την προτεινόμενη μορφή της $A_{\vec{k}}(\omega)$. Επίσης στον υπολογισμό του $\chi^2[A]$ χρησιμοποιείται ο πίνακας συνδιακύμανσης (covariance) των δεδομένων. Τεχνικές λεπτομέρειες για το πως επιλέγονται οι ειδικές μορφές της $A_{\vec{k}}(\omega)$ σύμφωνα με δοσμένο default μοντέλο $D_{\vec{k}}(\omega)$ και άλλες ενδιαφέροντες λεπτομέρειες των υπολογισμών περιγράφονται σε παρακάτω παραγράφους.

Κατά τη διαδικασία της αναλυτικής συνέχισης, θα αναλύσουμε τα δεδομένα της QMC τα οποία λαμβάνονται με τις τρεις διαφορετικές μεθόδους QMC που συζητήθηκαν και παραπάνω. Πρώτον θα χρησιμοποιήσουμε την DMC0 στην οποία δεν έχουμε οδηγήτριες συναρτήσεις (δηλ. $\mu = 0$). Δεύτερον θα χρησιμοποιήσουμε την standard-DMC όπου το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ γίνεται περίπου επίπεδο πολλαπλασιάζοντας την με μια οδηγήτρια συνάρτηση εκθετικής μορφής $\exp(\mu\tau)$ (χρησιμοποιούμε την ίδια ορολογία με αυτήν της αναφοράς [14]). Στην Εικ. 7.1(a) συγκρίνουμε το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ που παίρνουμε με την DMC0 και την standard

DMC. Είναι ξεκάθαρο ότι η standard DMC κάνει το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ επίπεδο με κάποια προσέγγιση. Επομένως θα θεωρήσουμε αυτή τη μέθοδο κατά κάποιο τρόπο ως μέθοδο με FH τεχνική. Τέλος θα χρησιμοποιηθούν δεδομένα που θα τα λάβουμε με τη χρήση της flat histogram DMC όπου το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ γίνεται επίπεδο με τον αλγόριθμο Wang-Landau. Επιπλέον θα χρησιμοποιήσουμε τρία διαφορετικά μοντέλα για κάθε μια από τις παραπάνω περιπτώσεις. Δηλαδή ο συνολικός αριθμός των αποτελεσμάτων που θα παρουσιασθούν θα αντιστοιχούν σε εννέα συνδυασμούς δεδομένων από QMC και default μοντέλων. Κατά σειρά στα αποτελέσματα θα χρησιμοποιήσουμε ως default μοντέλο την «ακριβή» λύση, μια επίπεδη κατανομή και ένα default μοντέλο το οποίο περιέχει κάποια στοιχεία από την «ακριβή» λύση, διαφέρει όμως σημαντικά από αυτήν. Το τελευταίο θα το καλούμε «λάθος» default μοντέλο. Και τις τρεις επιλογές θα τις συζητήσουμε αναλυτικά παρακάτω.

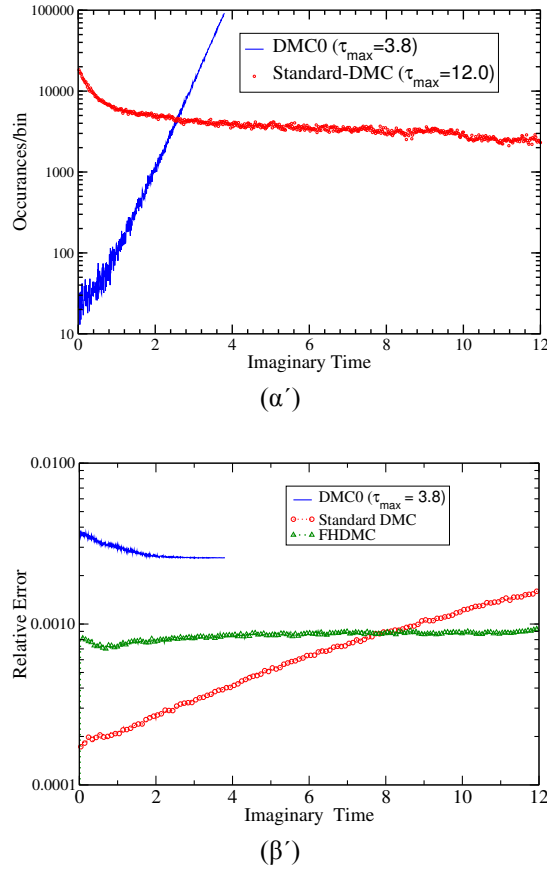
7.2 Υπολογιστικές λεπτομέρειες

Όπως προαναφέραμε περιοριζόμαστε στα διαγράμματα της NCA όπου έχουμε μία «ακριβή» λύση και την οποία μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ως μέτρο ακρίβειας για τα αποτελέσματα κάθε μιας από τις τρεις μεθόδους QMC. Θα επεξεργαστούμε τρία σύνολα δεδομένων από QMC για το ιστόγραμμα της $G_{\vec{k}}(\tau)$ για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και $J/t = 0.2$. Το πρώτο σύνολο δεδομένων το παίρνουμε με την DMC το δεύτερο με την standard DMC και το τρίτο με την FHDMC. Για κάθε μια από τις τρεις περιπτώσεις για τη λήψη των δεδομένων χρησιμοποιήθηκε περίπου το ίδιο ποσό από CPU χρόνο ώστε η σύγκριση να είναι αμερόληπτη. Το πρώτο σύνολο των δεδομένων για το ιστόγραμμα της $G_{\vec{k}}(\tau)$ το πήραμε για $0 < \tau < 3.8$ (σε μονάδες του αντίστροφου στοιχείου του πίνακα μετάβασης t) τα άλλα δε δύο σύνολα δεδομένων τα πήραμε για $0 < \tau < 12$. Και στα τρία παραπάνω σύνολα χρησιμοποιήσαμε εξακόσια τ - διαστήματα ($L = 600$) και ο αριθμός των δεδομένων για κάθε χρονικό διάστημα είναι $N_d = 1200$.

Το σχετικό στατιστικό λάθος για τα αποτελέσματα της FHDMC είναι λίγο έως πολύ ανεξάρτητο του χρόνου $G(\tau)$ (δες επίσης Εικ. 7.1(b)) και είναι περίπου $\sigma_r = 8 \times 10^{-4}$. Για τα αποτελέσματα της standard DMC το σ_r μεταβάλλεται από 2×10^{-4} για μικρά τ έως 2×10^{-3} για μεγάλα τ . Το σχετικό σφάλμα για τα αποτελέσματα της DMC0 είναι σημαντικά μεγαλύτερο, της τάξεως του 3×10^{-3} (δες Εικ. 7.1(b)).

7.2.1 Εφαρμογή της μεθόδου SAI

Επειδή τα δεδομένα της $G_{\vec{k}}(\tau)$ που λάβαμε εφαρμόζοντας τις τρεις μεθόδους DMC0, standard DMC και FHDMC έχουν την ίδια σταθερή τιμή για το \vec{k} , για απλούστευση συμβολίζονται ως $G^{(d)}(i, j)$ και το ιστόγραμμα της $G_{\vec{k}}(\tau)$ συμβολίζεται ως $\mathcal{G}(i)$. Επίσης γράφουμε $A(\omega)$ αντί $A_{\vec{k}}(\omega)$.



Σχήμα 7.1: (Color on-line) (α') Το ιστόγραμμα της $G_{\vec{k}}(\tau)$ (για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$) σαν συνάρτηση του φανταστικού χρόνου για τα αποτελέσματα από την standard-DMC και την DMC0. (β') Το σχετικό σφάλμα σαν συνάρτηση του φανταστικού χρόνου τ για τα αποτελέσματα από DMC0, standard-DMC, και FHDMC για περίπου ίδιο CPU χρόνο.

Υπάρχουν N_d δεδομένα $G^{(d)}(i, j)$, $j = 1, 2, \dots, N_d$ που παίρνουμε για το $G(i)$ σε κάθε φανταστικό χρονικό διάστημα i με $i = 1, 2, \dots, L$. Επειδή υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των δεδομένων $G^{(d)}(i, j)$ για διαφορετικά χρονικά διαστήματα, στον υπολογισμό του χ^2 κάνουμε χρήση του πίνακα συνδιακύμανσης \mathbf{C} που ορίζεται ως

$$C(k, l) = \frac{1}{N_d(N_d - 1)} \sum_{j=1}^{N_d} [\bar{G}^{(d)}(k) - G^{(d)}(k, j)] \times [\bar{G}^{(d)}(l) - G^{(d)}(l, j)], \quad k, l = 1, 2, \dots, L, \quad (7.9)$$

όπου $\bar{G}^{(d)}(k)$ είναι

$$\bar{G}^{(d)}(k) = \frac{1}{N_d} \sum_{j=1}^{N_d} G^{(d)}(k, j). \quad (7.10)$$

η μέση τιμή των δεδομένων για το k χρονικό διάστημα. Σε όρους του \mathbf{C} , $\bar{G}^{(d)}$ και του προτεινόμενου $A(\omega)$ το οποίο δίνει μέσω της εξίσωσης 7.2, ένα $\mathcal{G}(i)$ είναι

$$\chi^2 = (\bar{\mathbf{G}}^{(d)} - \mathbf{G})^T \mathbf{C}^{-1} (\bar{\mathbf{G}}^{(d)} - \mathbf{G}), \quad (7.11)$$

όπου $(\bar{\mathbf{G}}^{(d)})^T \equiv (\bar{G}^{(d)}(1), \bar{G}^{(d)}(2), \dots, \bar{G}^{(d)}(L))$ και $\mathbf{G}^T \equiv (\mathcal{G}(1), \mathcal{G}(2), \dots, \mathcal{G}(L))$.

Προσδιορίζουμε ορθογώνιο πίνακα \mathbf{O} και διαγώνιο \mathbf{d} ώστε

$$\mathbf{C} = \mathbf{O} \mathbf{d} \mathbf{O}^T. \quad (7.12)$$

Τότε το χ^2 γράφεται σε απλούστερη μορφή

$$\chi^2 = (\bar{\mathbf{G}}_f^{(d)} - \mathbf{G}_f)^T (\bar{\mathbf{G}}_f^{(d)} - \mathbf{G}_f), \quad (7.13)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_f^{(d)} = \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{O}^T \bar{\mathbf{G}}^{(d)}, \quad (7.14)$$

$$\mathbf{G}_f = \mathbf{d}^{-1/2} \mathbf{O}^T \mathbf{G}. \quad (7.15)$$

Κατά την εφαρμογή της μεθόδου SAI η $A(\omega)$ λαμβάνεται με αλγόριθμο Metropolis ως ο μέσος όρος μιας δειγματοληψίας των $A(\omega)$ η οποία καθορίζεται από το default μοντέλο $D(\omega)$. Η πιθανότητα μια προτεινόμενη μορφή του $A(\omega)$ να είναι αληθής για τα δεδομένα $G^{(d)}(i, j)$, δίνεται από την εξίσωση 7.8. Το $\chi^2[A]$ υπολογίζεται από την εξίσωση 7.13 η οποία με τη σειρά της υπολογίζεται από τα δεδομένα $G^{(d)}(i, j)$ για $\mathcal{G}(i)$. Τα $\mathcal{G}(i)$ καθορίζονται από την προτεινόμενη μορφή $A(\omega)$. Η βέλτιστη επιλογή της “θερμοκρασίας” α γίνεται σύμφωνα με τις συζητήσεις στις αναφορές [18, 28, 29]. Εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο Metropolis χρησιμοποιώντας την εξίσωση 7.8 σαν την πιθανότητα αποδοχής και υπολογίζουμε την μέση φασματική συνάρτηση $A(\omega)$. Το default μοντέλο το οποίο καθορίζει τις προτάσεις για το $A(\omega)$ περιέχει όλη την a priori γνώση για το πραγματικό $A(\omega)$. Θεωρούμε το διάστημα συχνοτήτων $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ εκτός του οποίου υποθέτουμε ότι το $A(\omega)$ είναι 0. Το χωρίζουμε σε N_w διαστήματα, $\Delta\omega(i)$, με μέσο του καθενός την συχνότητα $\omega(i)$, $i = 1, 2, \dots, N_w$. Ορίζουμε το κανονικοποιημένο ιστόγραμμα βασιζόμενοι στο default μοντέλο $D(\omega)$ ως

$$\mathcal{D}(i) = \frac{D(\omega(i))}{\sum_{j=1}^{N_w} D(\omega(j)) \Delta\omega(j)}, \quad (7.16)$$

και πάνω σε αυτό ορίζουμε μία νέα μεταβλητή $x(i)$ που παίρνει τιμές στο διάστημα $[0, 1]$, μήκους

$$\Delta x(i) = \mathcal{D}(i) \Delta\omega(i), \quad i = 1, 2, \dots, N_w, \quad (7.17)$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω είναι

$$x(0) = 0, \quad x(i) = \sum_{j=1}^i \Delta x(j), \quad x(N_w) = 1. \quad (7.18)$$

Επιλέγουμε κανονικοποιημένες παραστάσεις $n(x)$ ($n(x) \geq 0$, $\int_0^1 n(x)dx = 1$) από μια ομοιόμορφη κατανομή [18, 19]. Το ύψος $\mathcal{A}(i)$ του ιστογράμματος της $A(\omega)$ στο διάστημα $\Delta\omega(i)$ του ω είναι

$$\mathcal{A}(i) = \frac{1}{\Delta\omega(i)} \int_{x^{(i-1)}}^{x^{(i)}} n(x)dx. \quad (7.19)$$

7.2.2 Επιλογή του default μοντέλου

Για να αντιστρέψουμε τα δεδομένα με την SAI χρειαζόμαστε ένα default μοντέλο. Πρόκειται να χρησιμοποιήσουμε τα ακόλουθα τρία μοντέλα.

1. Πρώτον θα χρησιμοποιήσουμε το «ακριβές» default μοντέλο, δηλαδή τη λύση που προκύπτει εντός της NCA από την εξίσωση Dyson όπως γίνεται στις αναφορές [12, 58]. Για το λόγο αυτόν υπολογίζουμε πάλι τη φασματική συνάρτηση για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$, για $J/t = 0.2$, για τετραγωνικό πλέγμα 32×32 και $\epsilon/t = 0.002$. Το αποτέλεσμα αυτό είναι κοντά στην «ακριβή» λύση της NCA έχει όμως ακόμη μια επιρροή από το μικρό μέγεθος του πλέγματος και την πεπερασμένη τιμή του ϵ .

2. Δεύτερο default μοντέλο είναι η επίπεδη κατανομή, δηλ

$$A(\omega) = \begin{cases} C, & \omega_a < \omega < \omega_b, \\ 0, & \text{σε άλλη περίπτωση,} \end{cases} \quad (7.20)$$

Όπου $C = 1/(\omega_b - \omega_a)$ με $\omega_a = -3$ και $\omega_b = 5$

3. Ένα τρίτο default μοντέλο που θα χρησιμοποιηθεί είναι η φασματική συνάρτηση που προκύπτει ως λύση εντός της NCA σύμφωνα με την αναφορά [12] για $J/t = 0.2$ και $k = (0, 0)$. Ο λόγος που θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε αυτό το default μοντέλο είναι να ερευνήσουμε το βαθμό μέχρι τον οποίο η μέθοδος SAI είναι ικανή να βρει τη σωστή λύση ξεκινώντας από ένα default μοντέλο το οποίο μοιράζεται μερικά χαρακτηριστικά με τη σωστή λύση. Αυτά τα χαρακτηριστικά είναι η θέση των μεγίστων με διαφορετικό όμως μέγεθος. Σε πολλές εφαρμογές της θεωρίας του συναρτησοειδούς της πυκνότητας (density functional theory) για τον υπολογισμό της φασματικής συνάρτησης του οιονει σωματιδίου για ένα πραγματικό υλικό βρίσκουμε λίγο-πολύ τις σωστές ιδιοτιμές της ενέργειας. Όμως οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις δεν είναι κοντά στις σωστές με αποτέλεσμα να έχουμε τα peaks στη σωστή θέση με τα ύψη τους όμως λανθασμένα. Θα μπορούσαμε μια λύση σαν την παραπάνω να την χρησιμοποιήσουμε ως default μοντέλο της μεθόδου αντιστροφής.

7.3 Αποτελέσματα

7.3.1 Το default μοντέλο είναι η «ακριβής» λύση.

Στην Εικ. 7.2 παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα της αναλυτικής συνέχισης με την SAI των δεδομένων που παίρνουμε από την εφαρμογή των τριών μεθόδων, όταν το default μοντέλο είναι η «ακριβής» λύση. Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα είναι πολύ κοντά στην «ακριβή» λύση και ανεξάρτητα της τιμής της “θερμοκρασίας” α που χρησιμοποιούμε. Γενικά σε υψηλότερες τιμές του α το default μοντέλο επηρεάζει περισσότερο τα αποτελέσματα της αναλυτικής συνέχισης.

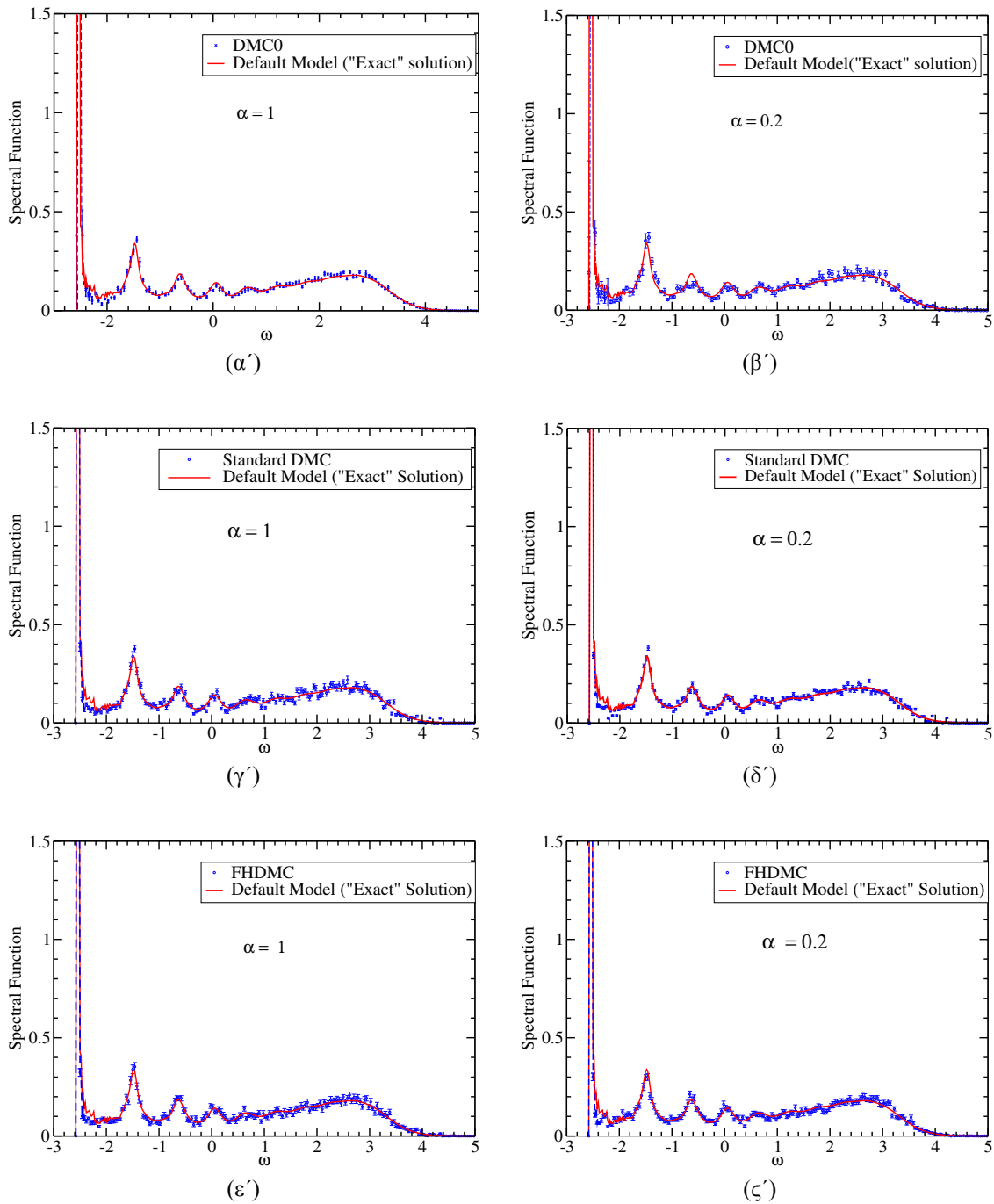
7.3.2 Default μοντέλο η επίπεδη κατανομή.

Για τρεις λόγους χρησιμοποιούμε ως default μοντέλο την επίπεδη κατανομή (εξίσωση 7.20). Ο ένας είναι ότι κάποιες φορές έχουμε πλήρη άγνοια εκ των προτέρων για την μορφή της φασματικής συνάρτησης. Ο άλλος είναι ότι στην περίπτωση αυτή όλη η πληροφορία για τη φασματική συνάρτηση προέρχεται από τα δεδομένα των μεθόδων QMC, οπότε τα αποτελέσματα της αναλυτικής συνέχισης μπορούν να δώσουν πληροφορία για την ποιότητα των δεδομένων. Ο τρίτος είναι ότι μπορούμε να συγκρίνουμε την SAI με ένα απλό fitting με συγκεκριμένο αριθμό εκθετικών. Στην Εικ. 7.3 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της αντιστροφής με την SAI για $\alpha = 1$. Για μικρότερες τιμές του α τα αποτελέσματα είναι παρόμοια. Οι εικόνες 7.3(α’), 7.3(β’) και 7.3(γ’) είναι τα αντίστοιχα αποτελέσματα της αντιστροφής για τα δεδομένα της μεθόδου DMC0, standard DMC και FHDMC. Επίσης κάναμε fitting με το ελάχιστο τετράγωνο, και για τα τρία σύνολα δεδομένων, με τη μορφή

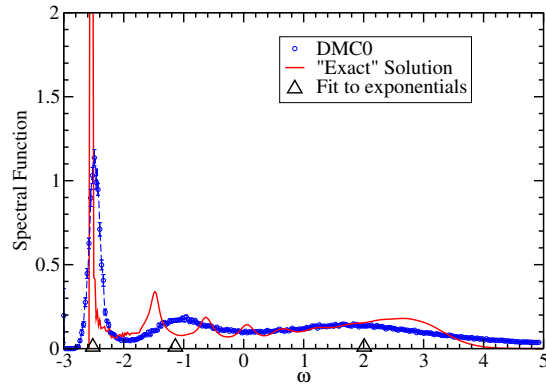
$$G(\tau) = Z_1 e^{-\omega_1 \tau} + Z_2 e^{-\omega_2 \tau} + Z_3 e^{-\omega_3 \tau}, \quad (7.21)$$

Οι τιμές των παραμέτρων $Z_{1,2,3}$ και $\omega_{1,2,3}$ που βρέθηκαν με το fitting καταγράφονται στον πίνακα 7.1. Επίσης σε κάθε εικόνα σημειώνουμε με τρίγωνο τις τρεις συχνότητες του fitting που βρήκαμε. Παρατηρούμε ότι οι δύο χαμηλότερες συμφωνούν με αυτά που βρέθηκαν με τη μέθοδο SAI. Επιπρόσθετα η Τρίτη συχνότητα ω_3 είναι περίπου στο κέντρο βάρους του διευρυμένου υπολειπόμενου φάσματος του οποίου το βάρος αντιστοιχεί στη τιμή Z_3 . Η τιμή του Z_1 , που αντιστοιχεί στο μέγιστο της ελάχιστης ενέργειας του οιονεί σωματιδίου συμφωνεί με τις αντίστοιχες τιμές που υπολογίστηκαν στην αναφορά [12], και που είναι κατά προσέγγιση 0.2.

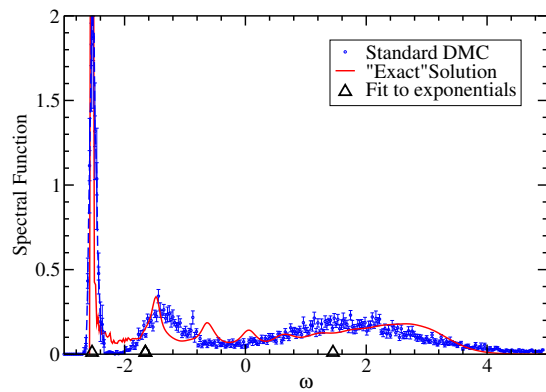
Σημειώνουμε ότι τα αποτελέσματα της αναλυτικής συνέχισης δεν μπορούν να αναπαράγουν τις λεπτομέρειες της «ακριβούς» λύσης όσο και αν μειώσουμε την τιμή του α . Οι επιδόσεις standard DMC και της μεθόδου FHDMC είναι σχεδόν ίδιες και σημαντικά καλύτερες από τα



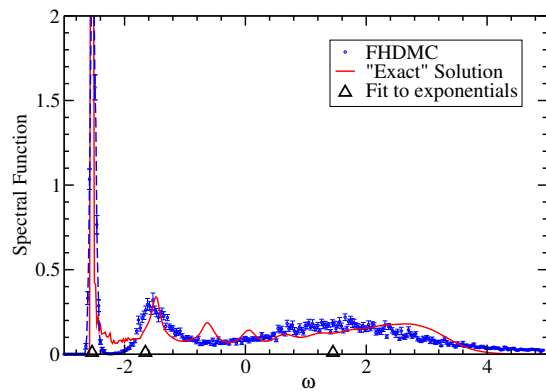
Σχήμα 7.2: (Color on-line) Αναλυτική συνέχιση με την SAI των δεδομένων της DMC0, FHDMC και standard DMC του $t - J$ μοντέλου για $J/t = 0.2$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$. Default μοντέλο η “ακριβής” λύση. Σχήματα (α') και (β'): είναι από τα δεδομένα της DMC0 για $\alpha = 1$ και $\alpha = 0.2$ αντίστοιχα. Σχήματα (γ') και (δ'): είναι από τα δεδομένα της standard DMC για $\alpha = 1$ και $\alpha = 0.2$ αντίστοιχα. Σχήματα (ε') και (ζ'): είναι από τα δεδομένα της FHDMC για $\alpha = 1$ και $\alpha = 0.2$ αντίστοιχα.



(α')

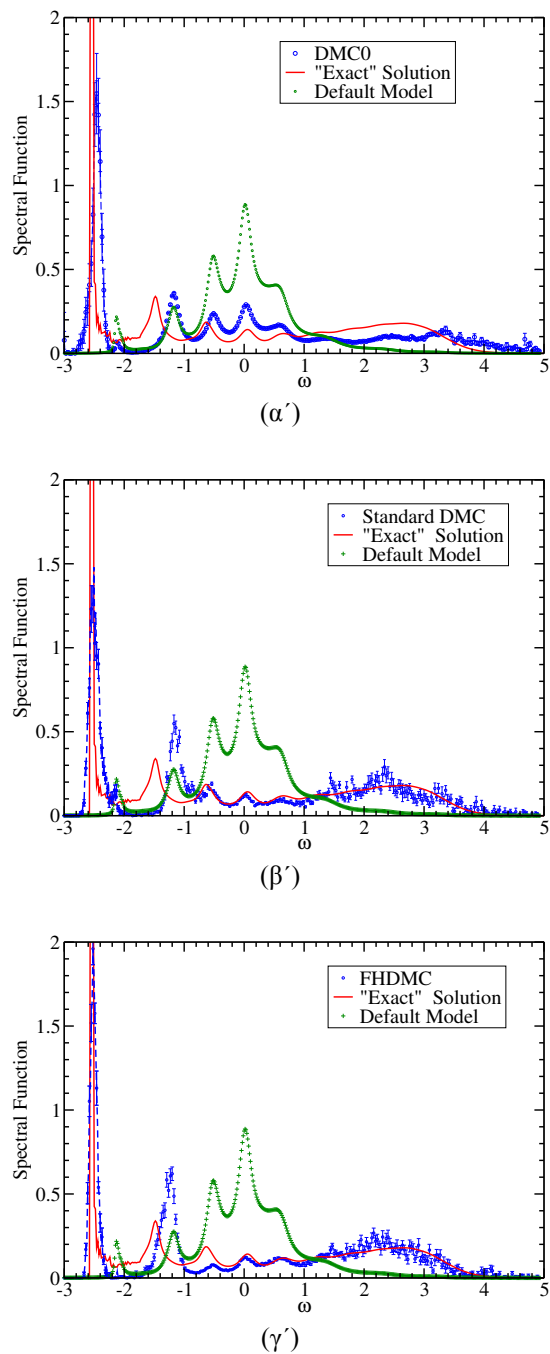


(β')



(γ')

Σχήμα 7.3: (Color on-line) Αναλυτική συνέχιση με την SAI των δεδομένων από τις QMC με default μοντέλο επίπεδο και $\alpha = 1$. Σχήμα(α') Για τα δεδομένα της DMC0 Σχήμα(β') Για τα δεδομένα της standard DMC Σχήμα(γ') Για τα δεδομένα της DMC0 FHDMC Τα τρίγωνα δείχνουν τις τιμές της συχνότητας που έδωσε fitting με τρία εκθετικά.



Σχήμα 7.4: (Color on-line) Αναλυτική συνέχιση με την SAI των δεδομένων από τις QMC με default μοντέλο την ακριβή λύση $A(k = 0, \omega)$ και $\alpha = 1$. Σχήμα(α') Για τα δεδομένα της DMC0 Σχήμα(β') Για τα δεδομένα της standard DMC Σχήμα(γ') Για τα δεδομένα της DMC0 FHDMC

Method	Z_1	Z_2	Z_3	ω_1	ω_2	ω_3
DMC0	0.27	0.26	0.47	-2.516	-1.14	2.01
SDMC	0.24	0.19	0.56	-2.538	-1.64	1.43
FHDMC	0.23	0.19	0.56	-2.538	-1.656	1.45

Πίνακας 7.1: Τα αποτελέσματα του fitting των δεδομένων για την $G(\tau)$ των DMC0, standard-DMC(SDMC) και FHDMC με την μορφή που δίνεται από την εξίσωση 7.21.

αποτελέσματα της αντιστροφής των δεδομένων της DMC0. Επίσης σημειώνουμε ότι το πλάτος του μεγίστου είναι λίγο πλησιέστερο σε αυτό της «ακριβής» λύσης όταν χρησιμοποιούμε τα δεδομένα της FHDMC.

7.3.3 Default μοντέλο η $A_{(0,0)}(\omega)$.

Το default μοντέλο που χρησιμοποιήσαμε πριν, υπέθετε πλήρη άγνοια για τα χαρακτηριστικά της φασματικής συνάρτησης και συνεπώς το αποτέλεσμα είχε απόλυτη επιρροή από την ελαχιστοποίηση του χ^2 . Σε πολλές περιπτώσεις έχουμε κάποια πληροφορία για το $A_{\vec{k}}(\omega)$ και αυτή η πληροφορία προέρχεται είτε από άλλες αναλυτικές ή ημι-αναλυτικές προσεγγίσεις (π.χ. διαταρακτικό ανάπτυγμα) είτε αριθμητικές τεχνικές είτε με θεωρία συναρτησοειδούς πυκνότητας στους υπολογισμούς της ηλεκτρονικής δομής. Το τυπικό είναι να γνωρίζουμε τις θέσεις των μεγίστων χωρίς να γνωρίζουμε τα ύψη του φάσματος σε αυτές τις θέσεις. Παρακάτω θα χρησιμοποιήσουμε ως default μοντέλο την «ακριβή» λύση που λαμβάνουμε για $\vec{k} = (0, 0)$ και θα εφαρμόσουμε την SAI για την αντιστροφή των αποτελεσμάτων των τριών μεθόδων QMC, ήτοι standard DMC, DMC0 και FHDMC για τα δεδομένα της $G_{(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})}(\tau)$. Μπορούμε να δούμε ότι πολλά μέγιστα του μοντέλου είναι κοντά ως προς τη θέση με αυτά της «ακριβούς» λύσης έχοντας όμως διαφορετικό ύψος. Ακόμη η ελάχιστη ενέργεια είναι διαφορετική από αυτή της «ακριβούς» λύσης.

Στην Εικ. 7.4 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα αντιστροφής των δεδομένων των τριών μεθόδων για $\alpha = 1$ και με default μοντέλο το «λάθος» που αντιστοιχεί στο $\vec{k} = (0, 0)$ αντί του ορθού $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$. Στην εικόνα Εικ.7.4(α') είναι τα αποτελέσματα χρησιμοποιώντας τα δεδομένα της DMC0. Στην εικόνα Εικ.7.4(β') και Εικ.7.4(γ') παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της αντιστροφής για τα δεδομένα από τη standard DMC και FHDMC αντίστοιχα. Το default μοντέλο παρουσιάζεται με πράσινους ανοικτούς κύκλους. Σημειώνουμε πάλι ότι οι αποδόσεις των μεθόδων standard DMC και FHDMC είναι περίπου οι ίδιες και σημαντικά καλύτερες από αυτή των δεδομένων που προέκυψαν από την εφαρμογή της DMC0. Σημειώνουμε όμως ότι το εύρος του μεγίστου του οιονεί σωματιδίου της ελάχιστης ενέργειας στην περίπτωση της FHDMC είναι μικρότερο και πλησιέστερο στην «ακριβή» λύση σε σχέση με αυτό των

δεδομένων της standard DMC. Επίσης η θέση του δεύτερου μεγίστου πλησιέστερη στη θέση του δεύτερου μεγίστου της «ακριβούς» λύσης στην περίπτωση της FHDMC παρά τη standard DMC. Οι διαφορές στον βαθμό προσέγγισης των χαρακτηριστικών της φασματικής συνάρτησης στις χαμηλές ενέργειες μπορεί να εξηγηθεί συγκρίνοντας τα σχετικά σφάλματα των δεδομένων της $G(\tau)$ που παίρνουμε με τις τρεις μεθόδους και τα οποία παρουσιάζονται στην Εικ. 7.1(β'). Στην Εικ. 7.1(β') γίνεται η σύγκριση των σχετικών σφαλμάτων σε σχέση με τον φανταστικό χρόνο τ των δεδομένων της $G(\tau)$ που πήραμε με τις DMC0, standard-DMC και FHDMC, εφαρμοζόμενες για τον ίδιο περίπου CPU χρόνο. Στην περίπτωση της DMC0, πήραμε $\tau_{\max} = 3.8$ ώστε να έχουμε σφάλμα συγκρίσιμο με αυτό των άλλων δύο μεθόδων. Σημειώνουμε ότι για σταθερή τιμή τ_{\max} και για σταθερό πλήθος βημάτων MC στην DMC0, το σχετικό σφάλμα εξαρτάται ασθενώς από το τ αποφέροντας μια μέση τιμή για αυτό $\sigma_r(\tau_{\max})$. Όμως για σταθερό πλήθος βημάτων Monte Carlo αυτό το μέσο σχετικό σφάλμα $\sigma_r(\tau_{\max})$ στην μέθοδο DMC0 αυξάνει εκθετικά με το τ_{\max} . Επιλέγοντας $\tau_{\max} = 3.8$ έχουμε την βέλτιστη τιμή του για την αναλυτική συνέχιση. Αυτό γιατί ενώ από την μια μεριά, για μεγαλύτερο εύρος του $G(\tau)$ τα αποτελέσματα της αντιστροφής στις χαμηλές ενέργειες είναι καλύτερα, από την άλλη η ποιότητα των δεδομένων πέφτει σημαντικά. Αυτός είναι και ο λόγος υπεροχής των μεθόδων standard DMC και FHDMC έναντι της DMC0.

Επιπλέον σημειώνουμε ότι το σχετικό σφάλμα των δεδομένων της standard DMC είναι πολύ μικρότερο από αυτό της FHDMC στους μικρούς χρόνους. Στους μεγάλους χρόνους παρατηρούμε όμως ότι η κατάσταση αντιστρέφεται. Οι μεγάλοι χρόνοι βοηθούν στην εξαγωγή των χαμηλών ενεργειών του προβλήματος. Στην παρούσα περίπτωση το σημείο διασταύρωσης είναι $\tau \sim 8$, το οποίο δηλώνει ότι τα χαρακτηριστικά της φασματικής συνάρτησης που λαμβάνονται από τις δύο μεθόδους θα διαφέρουν για $\delta\omega/t < 1/8$ (όπου το $\delta\omega$ μετριέται από την χαμηλή ενεργειακή κατάσταση). Για το παρόν πρόβλημα αυτό φαίνεται να είναι πολύ μικρό σε εύρος, όμως γενικά για άλλα προβλήματα όπου ενδιαφερόμαστε για τις διεγέρσεις στις χαμηλές ενέργειες, αυτό μπορεί να είναι σημαντικότερο.

7.4 Συμπεράσματα

Έχουμε δείξει ότι η εφαρμογή τεχνικών FH και QMC έτσι ώστε να κάνουμε επίπεδο το ιστόγραμμα από οποιαδήποτε συνάρτηση συσχέτισης του φανταστικού χρόνου $G(\tau)$, μας καθιστά ικανούς να εκτελούμε την αναλυτική συνέχιση με μεγαλύτερο βαθμό ακρίβειας σε σχέση με οποιαδήποτε μέθοδο QMC χωρίς τη χρήση των τεχνικών FH.

Αυτό δείχθηκε με τη χρήση της μεθόδου DMC η οποία τροποποιημένη εφαρμόστηκε για τον υπολογισμό της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου για την Hamiltonian του μοντέλου $t - J$ και εντός της προσέγγισης NCA. Για το παραπάνω μοντέλο έχουμε μια ακριβή λύση όπως περιγράφεται στις αναφορές [12, 58]. Εφαρμόσαμε την SAI, η οποία είναι μια εναλλακτική μέθοδος της MEM, για την αναλυτική συνέχιση των δεδομένων μας.

Από όλα τα προηγούμενα εξάγουμε τα παρακάτω συμπεράσματα :

1. Το κυριότερο σημείο είναι το ακόλουθο: βρίσκουμε ότι εάν τα δεδομένα της QMC λαμβάνονται με τεχνικές FH, όπου το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ είναι λίγο-πολύ επίπεδο, όπως με την FHDMC ή την standard-DMC, τότε τα αποτελέσματα της αναλυτικής συνέχισης βελτιώνονται σημαντικά συγκρινόμενα με τα αποτελέσματα από τα δεδομένα της μεθόδου QMC, χωρίς την χρήση τεχνικών FH, όπως η DMC0. Αυτό συμβαίνει διότι μπορούμε να προσεγγίσουμε μεγαλύτερους χρόνους, με ταυτόχρονη μείωση του σχετικού στατιστικού λάθους.
2. Γίνεται μια σύγκριση των μεθόδων FHDMC και standard-DMC, όταν αυτές χρησιμοποιούνται για την συλλογή των δεδομένων της $G(\tau)$ και με αυτά τα δεδομένα γίνεται η αναλυτική συνέχιση. Αυτή η σύγκριση μπορεί να γίνει διότι το μοντέλο της Hamiltonian που χρησιμοποιήσαμε, είναι επιλύσιμο. Από την σύγκριση των μεθόδων προέκυψε ότι :
 - α') Η μέθοδος standard-DMC απαιτεί μια τιμή του μ ώστε να προσεγγίσει την συμπεριφορά της $G(\tau)$ για μεγάλους χρόνους και να μπορέσει να κάνει το ιστόγραμμα επίπεδο. Συνεπώς απαιτείται κάποιο ποσό εργασίας εκ των προτέρων για τον προσδιορισμό του μ . Η FHDMC κάνει το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ επίπεδο αυτόματα, χωρίς την ανάγκη οποιασδήποτε τέτοιας a priori γνώσης.
 - β') Το λάθος στους μικρούς χρόνους για την $G(\tau)$ είναι σημαντικά μικρότερο στην περίπτωση της standard-DMC.
 - γ') Το λάθος στους μεγάλους χρόνους για την $G(\tau)$ είναι μικρότερο στην περίπτωση FHDMC.

Αυτό έχει σαν συνέπεια τα αποτελέσματα για την φασματική συνάρτηση σε πολύ χαμηλές ενέργειες να είναι ελαφρώς ποιοτικά καλύτερα. Σε αυτή τη περιοχή; Η FHDMC φαίνεται να έχει κάποιο πλεονέκτημα σε σχέση με την standard-DMC.

3. Τέλος εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι για το συγκεκριμένο πρόβλημα γνωρίζουμε την ακριβή λύση, εξάγουμε επιπλέον τα παρακάτω συμπεράσματα:
 - α') Όταν χρησιμοποιούμε default μοντέλο, το οποίο είναι κοντά στην ακριβή λύση, το αποτέλεσμα της αναλυτικής συνέχισης είναι και αυτό κοντά στην ακριβή λύση.
 - β') Όταν έχουμε πλήρη άγνοια για την σωστή απάντηση, τότε χρησιμοποιούμε ως default μοντέλο την επίπεδη κατανομή. Παρατηρούμε ότι το αποτέλεσμα για την θέση την ενέργεια και το υπόλοιπο του μεγίστου του οιονεί σωματιδίου και αυτό της δεύτερης ελάχιστης βρίσκονται σε συμφωνία με την ακριβή απάντηση. Οι όποιες λεπτομέρειες της φασματικής συνάρτησης γενικά δεν μπορούν να “πιαστούν”.

γ') Εάν έχουμε μια προσεγγιστική γνώση της λύσης δηλ. χρησιμοποιούμε ένα default μοντέλο με μερικά χαρακτηριστικά της σωστής λύσης (σωστή θέση των μεγίστων, όμως με λάθος ύψος της φασματικής συνάρτησης), τότε η αναλυτική συνέχιση τείνει να διορθώσει το ύψος των μεγίστων και να μετακινήσει τις λάθος θέσεις αυτών στο default μοντέλο προς τις σωστές.

Γενικά ενσωματώνοντας τεχνικές FH σε μεθόδους QMC η αναλυτική συνέχιση των δεδομένων έχει ποιοτικά καλύτερα αποτελέσματα από την απλή μέθοδο QMC.

8 Μελέτη της φασματικής συνάρτησης μιας οπής στο Μοντέλο t - J με την Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo

Δύο θεμελιώδη μοντέλα περιγράφουν τις ισχυρές αλληλεπιδράσεις, ένα είναι το μοντέλο Hubbard [1] και το άλλο είναι το περίφημο μοντέλο $t - J$ [31].

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} J \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (8.1)$$

όπου έχουμε απαγόρευση διπλής κατάληψης μιας ζώνης.

Το μοντέλο διατυπώθηκε αρχικά για την μελέτη της κίνησης ενός ηλεκτρονίου εντός αντισιδηρομαγνητικού περιβάλλοντος, όμως αργότερα ο Anderson [32] πρότεινε και την μελέτη των υπεραγωγών μεγάλης θερμοκρασίας με το ίδιο μοντέλο.

Το πρόβλημα της συμπεριφοράς μιας οπής σε ένα κβαντικό αντισιδηρομαγνητικό περιβάλλον θεμελιώθηκε πολύ πριν την ανακάλυψη των υλικών με υψηλή θερμοκρασία υπεραγωγιμότητα. Οι Brinkman και Rice [64] καθώς και άλλοι, θεμελίωσαν την θεωρία της κίνησης οπής ως πρόβλημα κβαντικού συστήματος πολλών σωματιδίων και πιο συγκεκριμένα μια οπή και η κατάσταση Néel.

Το γεγονός της ύπαρξης φάσματος ενός οιονεί σωματιδίου για την οπή σε αντισιδηρομαγνητικό περιβάλλον είχεδειχθεί από ένα πλήθος ερευνητών όπως αυτούς των αναφορών [12, 65, 66] και άλλους, οι οποίοι χρησιμοποίησαν αριθμητικές μεθόδους διαγωνιοποίησης μικρών διαστάσεων πλεγμάτων.

Οι Kane et al [5] ήταν αυτοί που επισφράγισαν την εικόνα του φάσματος των οιονεί σωματιδίων αναλυτικά. Στην περίπτωση όπου έχουμε ακριβώς ημικατάληψη, τότε στο αντισιδηρομαγνητικό πλέγμα έχουμε ασθενείς διεγέρσεις που περιγράφονται με τα κύματα spin. Όταν

έχουμε ακριβώς μια οπή σε ένα σημείο του πλέγματος, τότε η απώλεια του ηλεκτρονίου σε εκείνο το σημείο είναι μια διαταραχή η οποία περιγράφεται με την ενεργό αλληλεπίδραση της οπής με τα κύματα spin. Προσεγγίζουν το πρόβλημα με την non-crossing approximation (NCA), δηλ. συμπεριλαμβάνονται τα διαγράμματα Feynman στα οποία οι μαγνητικοί διαδότες δεν τέμνονται. Η NCA είναι η αυτοσυνεπής προσέγγιση Born(SCBA). Υπολογισμοί του φάσματος των οιονεί σωματιδίων για διάφορες τιμές της σταθεράς αλληλεπίδρασης J έγιναν από τους συγγραφείς της αναφοράς [12].

Η μέθοδος Διαγραμματική Monte Carlo (diag-MC) μας δίνει την δυνατότητα να υπολογίσουμε ολόκληρη την σειρά των διαγραμμάτων Feynman που υπολογίζουν την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου,

$$G(\tau) \equiv \left\langle T_{\tau} \left(h_{\vec{k}}^{-}(\tau) h_{\vec{k}}^{\dagger}(0) \right) \right\rangle \quad (8.2)$$

όπου $h_{\vec{k}}^{\dagger} \left(h_{\vec{k}}^{-} \right)$ ο τελεστής δημιουργίας(καταστροφής) μιας οπής. Η μέθοδος Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo (FHDMC), όπως έχουμε αναλύσει σε προηγούμενα κεφάλαια, είναι ο συνδυασμός των μεθόδων Επιπέδου Ιστογράμματος και της Διαγραμματική Monte Carlo.

Παρακάτω, με την χρήση της FHDMC υπολογίζουμε την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$ για το μοντέλο $t - J$ στην γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin, υπολογίζοντας όλα τα διαγράμματα Feynman της σειράς. Στην συνέχεια η αναλυτική συνέχιση των δεδομένων της $G(\tau)$ για τον υπολογισμό της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$, γίνεται με την μέθοδο Στοχαστική Αναλυτική Διαδικασία (SAI). Ο ίδιος υπολογισμός έγινε από τους συγγραφείς της αναφοράς [60] όπου όμως και ο υπολογισμός της $G(\tau)$ και η αντιστροφή γίνονται με διαφορετικές μεθόδους. Τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα από το προηγούμενο κεφάλαιο μας κάνουν να πιστεύουμε ότι ο υπολογισμός μας είναι ακριβέστερος.

Στο συγκεκριμένο πρόβλημα παρουσιάζεται το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου με συνέπεια τον περιορισμό της τιμής του μέγιστου φανταστικού χρόνου τ_{\max} , μέχρι του οποίου υπολογίζεται η $G(\tau)$. Με δοκιμές που έγιναν διαπιστώθηκε ότι η FHDMC μας δίνει περιθώριο υπολογισμού της $G(\tau)$ μέχρι μεγαλύτερου μέγιστου φανταστικού χρόνου σε σχέση με την στάνταρντ Διαγραμματική Monte Carlo, με αποτέλεσμα να έχουμε καλύτερη πληροφορία στις χαμηλές ενέργειες. Επίσης η SAI, σε αντίθεση με την μέθοδο αντιστροφής που χρησιμοποιείται στην αναφορά [60], λαμβάνει υπόψη και το στατιστικό λάθος των μετρήσεων και όποια a priori γνώση για την μορφή της φασματικής συνάρτησης $A(\omega)$.

Στα κεφάλαια που ακολουθούν κατά σειρά έχουμε, στο πρώτο κεφάλαιο περιγράφεται το πρόβλημα και ο τρόπος εφαρμογής της FHDMC σε τέτοια περίπτωση όπου εμφανίζεται το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου, επίσης περιγράφεται ο τρόπος εφαρμογής της μεθόδου

αντιστροφής. Στο δεύτερο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα και καταγράφονται τα αντίστοιχα συμπεράσματα που εξάγονται. Στο τρίτο κεφάλαιο αναφέρονται τα γενικά συμπεράσματα που προκύπτουν.

8.1 Το πρόβλημα. Μέθοδοι

Εξετάζουμε την κίνηση μιας οπής στο δισδιάστατο τετραγωνικό αντισηδρομαγνητικό πλέγμα (αριθμός πρώτων γειτόνων $z = 4$) για θερμοκρασία $T = 0$. Η αρχική Hamiltonian 8.1, είναι άθροισμα του κινητικού όρου και του όρου Heisenberg, $H = H_t + H_J$. Στη γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin και με εφαρμογή των μετασχηματισμών Holstein-Primakoff και Bogoliubov οι δύο όροι έχουν την μορφή:

$$H_J = E_0 + \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} \omega(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \quad (8.3)$$

$$\text{με } E_0 = -\frac{3JzN}{8} + \frac{Jz}{4} \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} \sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2} \quad (8.4)$$

$$\text{και } \omega(\vec{k}) = \frac{Jz}{2} \sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2} \quad (8.5)$$

και

$$H_t = \frac{tz}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in \text{FBZ}} M_{\vec{k}, \vec{q}} h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}} b_{\vec{q}} + h.c \quad (8.6)$$

$$\text{με } M_{\vec{k}, \vec{q}} = u_q \gamma_{\vec{k}} + v_q \gamma_{\vec{k}+\vec{q}} \quad (8.7)$$

Όπου $h_{\vec{k}}^\dagger$ και $b_{\vec{q}}^\dagger$ είναι ο τελεστής δημιουργίας μιας οπής ορμής \vec{k} και μαγνονίου ορμής \vec{q} αντίστοιχα.

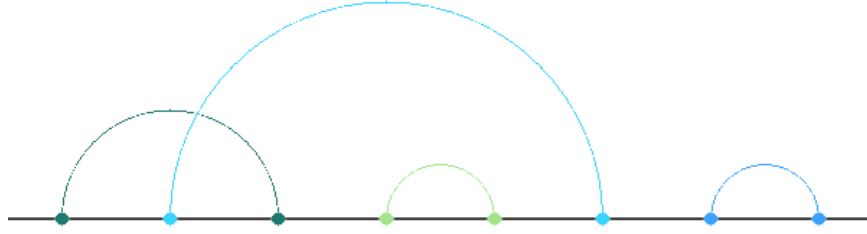
Είναι:

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y) \quad (8.8)$$

Τέλος, οι συντελεστές Bogoliubov δίνονται από τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} u_k &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2}} \right)} \\ v_k &= -\text{sgn}(\gamma_{\vec{k}}) \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2}} - 1 \right)} \end{aligned} \quad (8.9)$$

Η συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου αποτελείται από το άθροισμα απείρων όρων όπου ο



Σχήμα 8.1: Η μορφή των διαγραμμάτων Feynman είναι όπως αυτά του πολαρονίου Froelich

κάθε όρος είναι διαγράμματα Feynman της μορφής του σχήματος 8.1. Κάθε όρος είναι της ίδιας τάξης, η οποία αυξάνει από το 0 μέχρι το άπειρο. Γράφουμε:

$$G(\tau) = I_0(\tau) + I_1(\tau) + I_2(\tau) + \dots + I_m(\tau) + \dots$$

Όπου

$$I_m(\tau) = \int \dots \int_V F_m(x_1, x_2, \dots) dx_1 dx_2 \dots$$

είναι η συνεισφορά των διαγραμμάτων m τάξης στην $G(\tau)$.

Κάθε όρος $I_m(\tau)$ είναι ολοκλήρωμα πολλαπλής τάξης και η υπό ολοκλήρωση ποσότητα παίρνει και θετικές και αρνητικές τιμές. Χωρίζουμε τον κάθε όρο σε δύο όρους. Ο πρώτος, I_m^{pos} , ο οποίος περιέχει την ολοκλήρωση στον υπόχωρο V^+ του χώρου ολοκλήρωσης όπου η υπό ολοκλήρωση ποσότητα είναι θετική, και ο δεύτερος, I_m^{neg} , ο οποίος περιέχει την ολοκλήρωση της απόλυτης τιμής της υπό ολοκλήρωσης ποσότητας στον υπόχωρο V^- , όπου η υπό ολοκλήρωση ποσότητα είναι αρνητική. Είναι:

$$I_m(\tau) = I_m^{pos} - I_m^{neg}$$

Όπου τα I_m^{pos} και I_m^{neg} ορίζονται ως:

$$I_m^{pos} = \int \dots \int_{V^+} F_m(x_1, x_2, \dots) dx_1 dx_2 \dots \quad \text{και} \quad I_m^{neg} = \int \dots \int_{V^-} |F_m(x_1, x_2, \dots)| dx_1 dx_2 \dots$$

Γράφουμε την $G(\tau)$ ως:

$$G(\tau) = G_p(\tau) - G_n(\tau)$$

όπου οι ποσότητες $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ είναι θετικές και δίνονται αντίστοιχα από τις σχέσεις:

$$G_p(\tau) = \sum_m I_m^{pos}(\tau) \quad \text{και} \quad G_n(\tau) = \sum_m I_m^{neg}(\tau)$$

Κατά την εφαρμογή της FHDMC η προσομοίωση γίνεται στις απόλυτες τιμές των ποσοτήτων $|F_m(x_1, x_2, \dots)|$ και υπολογίζουμε ταυτόχρονα το ιστόγραμμα των θετικών ποσοτήτων $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$. Οι διαδικασίες κατά την εφαρμογή του αλγορίθμου Metropolis είναι πάλι δύο. Η πρώτη είναι η πρόσθεση ενός μαγνονικού διαδότη με επιλογή του αρχικού χρόνου του διαδότη τ_1 από όλο το διάστημα $[0, \tau]$ και του τελικού άκρου τ_2 από το διάστημα $[\tau_1, \tau]$. Κατόπιν η επιλογή της νέας τιμής του φανταστικού χρόνου τ' γίνεται στο διάστημα μεταξύ του μεγαλύτερου τελικού άκρου από τους μαγνονικούς διαδότες και το μέγιστο φανταστικό χρόνο τ_{\max} . Η δεύτερη είναι η τυχαία αφαίρεση ενός μαγνονικού διαδότη και κατόπιν η επιλογή της νέας τιμής του φανταστικού χρόνου με τον ίδιο τρόπο όπως πριν.

Οι ποσότητες των οποίων τα ιστογράμματα γίνονται επίπεδα, είναι οι $\mathcal{G}_p(\tau_i)$, και $\mathcal{G}_n(\tau_i)$ με $i = 1, \dots, L$. Όπου L είναι το πλήθος της διαμέρισης του διαστήματος $[0, \tau_{\max}]$ σε L ίσα $\Delta\tau_i$ ($i = 1, \dots, L$) διαστήματα. $\mathcal{G}_p(\tau_i)$, και $\mathcal{G}_n(\tau_i)$ είναι οι μέσες τιμές των ποσοτήτων $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ αντίστοιχα στο διάστημα $\Delta\tau_i$.

Στην πράξη οι δύο ποσότητες $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ πέραν κάποιας τιμής του τ είναι ίδιας τάξης μεγέθους και αυξάνονται εκθετικά με το τ κατά τον ίδιο τρόπο. Η συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$ είναι μικρότερη κατά αυξανόμενη τάξη μεγέθους από τις $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ με την αύξηση του τ . Αυτό έχει ως συνέπεια τον περιορισμό της επιλογής μέγιστης τιμής τ_{\max} . Έστω κάποια τιμή τ η τάξη μεγέθους των $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ είναι s_1 και το σχετικό σφάλμα της μέτρησής τους είναι $-q_1$. Αν τότε η τάξη μεγέθους της $G(\tau)$ είναι s , το σχετικό σφάλμα υπολογισμού του είναι $-q$ και δίνεται από την σχέση:

$$(-q) = (-q_1) + (s_1 - s)$$

Επειδή με την αύξηση του τ αυξάνεται η διαφορά $s_1 - s$, για κάποια τιμή θα ισχύει $s_1 - s = q_1$ οπότε το σχετικό σφάλμα είναι της τάξης της μονάδας και το αποτέλεσμα για την $G(\tau)$ δεν έχει νόημα. Για κάθε μέτρηση που κάνουμε παραθέτουμε τα αντίστοιχα διαγράμματα των $G(\tau)$, $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$, καθώς και τις τιμές των σχετικών σφαλμάτων.

Η αναλυτική επέκταση πραγματοποιείται με την SAI και για κάθε πειραματικό δεδομένο επαναλαμβάνεται τέσσερις φορές, για δύο διαφορετικές “θερμοκρασίες” $\alpha = 1.0$ και $\alpha = 0.1$, και για δύο διαφορετικά default μοντέλα, το αποτέλεσμα της NCA για κάθε περίπτωση και την επίπεδη κατανομή.

8.1.1 Υπολογιστικά στοιχεία

Επαναλαμβάνουμε τις μετρήσεις για διάφορες τιμές της σταθεράς σύζευξης J και για διάφορες τιμές της ορμής \vec{k} της οπής. Το διάστημα $[0, \tau_{\max}]$ χωρίζεται σε L ίσα διαστήματα. Επειδή κοντά στο 0 η τιμή της $G_n(\tau)$ είναι μικρότερη από το σφάλμα της $G_p(\tau)$, ένα πλήθος των bins από 0 έως L_b για την $G_n(\tau)$ τοποθετούνται όλα σε ένα μόνο bin. Αυτό συντομεύει

σημαντικά το κομπιούτερ χρόνο κατά την εφαρμογή της FHDMC. Συνεπώς τα δεδομένα μας για κάθε μέτρηση είναι για $L_d = L - L_b$ σημεία. Η κάθε μέτρηση επαναλαμβάνεται N_d φορές κα επομένως όπως και στο προηγούμενο κεφάλαιο ο πίνακας των δεδομένων έχει στοιχεία $G^{(d)}(i, j)$ με $i = 1, \dots, L_d$ και $j = 1, \dots, N_d$. Η μέθοδος επιπέδου διαγράμματος που χρησιμοποιείται είναι των Wang-Landau [17]. Στο επόμενο κεφάλαιο παραθέτουμε τα αποτελέσματα για τις παρακάτω περιπτώσεις:

1. Για $J = 0.3, \vec{k} = (\pi/2, \pi/2), \tau_{\max} = 4.8, L_b = 30, L_d = 300$ και $N_d = 600$
2. Για $J = 0.3, \vec{k} = (0, 0), \tau_{\max} = 3.6, L_b = 20, L_d = 300$ και $N_d = 600$
3. Για $J = 0.7, \vec{k} = (\pi/2, \pi/2), \tau_{\max} = 6.0, L_b = 30, L_d = 400$ και $N_d = 800$
4. Για $J = 0.7, \vec{k} = (0, 0), \tau_{\max} = 5.0, L_b = 30, L_d = 300$ και $N_d = 600$

Επίσης γίνεται ο υπολογισμός της $G(\tau)$ για ένα σημαντικό πλήθος ορμών της ζώνης Brillouin για την τιμή $J = 0.3$. Τέλος για διάφορες τιμές της σταθεράς J , υπολογίζουμε την $G(\tau)$ για $\vec{k} = (0, 0)$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$. Από το γεγονός ότι η $G(\tau)$ για μεγάλα τ προσεγγίζεται από την σχέση $G(\vec{k}, \tau) \sim Z(\vec{k}) \exp(-E(\vec{k})\tau)$, όπου $E(\vec{k})$ και $Z(\vec{k})$ η ελάχιστη ενέργεια οιονεί σωματιδίου (QP) και το αντίστοιχο φασματικό βάρος, μπορούμε με fitting ενός εκθετικού στις μεγάλες τιμές του τ να υπολογίσουμε τις αντίστοιχες τιμές των $E(\vec{k})$ και $Z(\vec{k})$. Οι υπολογισμοί που αναφέρονται σε αυτή την παράγραφο γίνονται υπολογίζοντας το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ ως τη μέση τιμή των ιστογραμμάτων που υπολογίζονται από δέκα επαναλήψεις της FHDMC για κάθε περίπτωση ξεχωριστά. Τα δεδομένα της παραγράφου αυτής σχετίζονται με τα αποτελέσματα που αποτυπώνονται στα σχήματα 8.10 και 8.11.

8.2 Αποτελέσματα-Συμπεράσματα

8.2.1 Οι συναρτήσεις $G(\tau), G_p(\tau), G_n(\tau)$ -Σχετικά Σφάλματα

Τα σχήματα 8.2α' και 8.2β' δείχνουν την μεταβολή των ποσοτήτων $G(\tau), G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ και των αντίστοιχων σχετικών σφαλμάτων για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$.

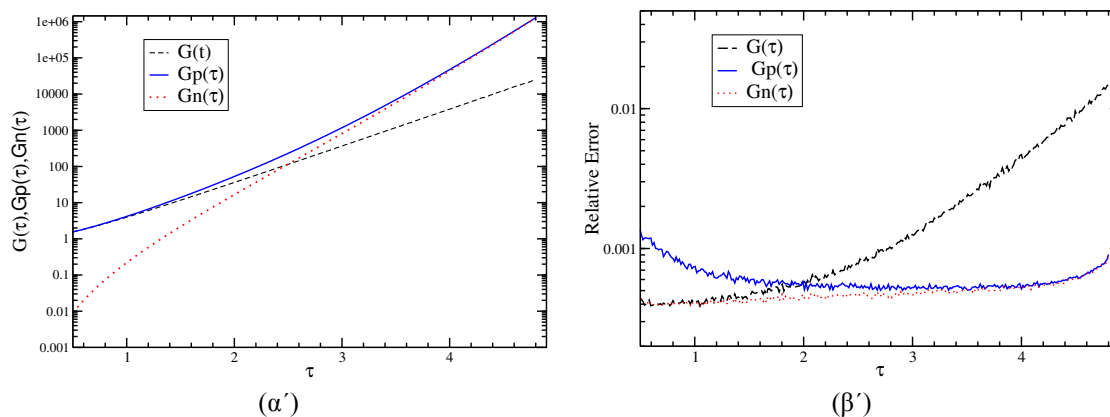
Αντίστοιχες πληροφορίες δίνουν:

Τα σχήματα 8.3α' και 8.3β' για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (0, 0)$.

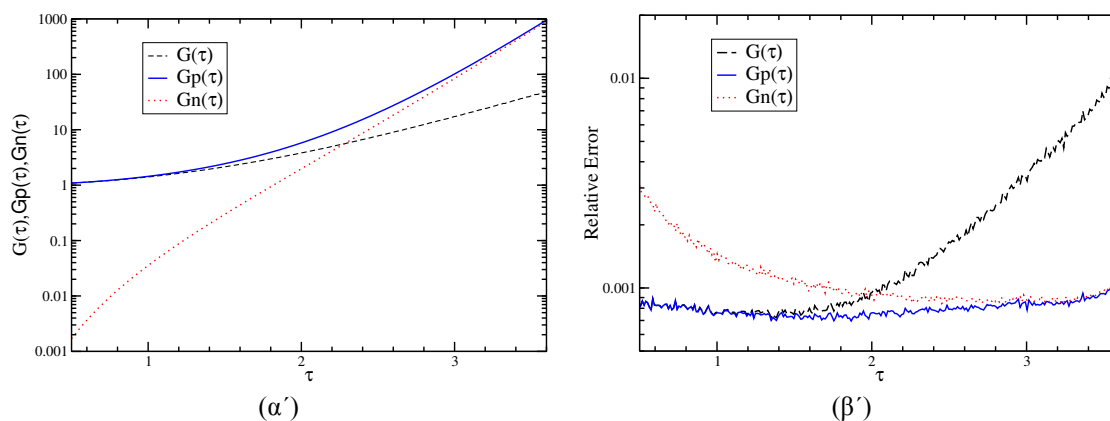
Τα σχήματα 8.4α' και 8.4β' για $J = 0.7$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$.

Τα σχήματα 8.5α' και 8.5β' για $J = 0.7$ και $\vec{k} = (0, 0)$.

Παρατηρούμε ότι για το ίδιο \vec{k} , για μικρότερες τιμές του J το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου είναι εντονότερο από ότι για μεγαλύτερες. Αυτό μας περιορίζει την μέγιστη τιμή τ_{\max} , ώστε να περιορίζεται και αντίστοιχο σχετικό σφάλμα της $G(\tau)$. Επίσης παρατηρούμε ότι, για την ίδια τιμή του J ο επιτρεπόμενος μέγιστος χρόνος είναι μεγαλύτερος για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$



Σχήμα 8.2: (α') $G(\tau)$, $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ (β') Τα αντίστοιχα σχετικά Σφάλματα, για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$

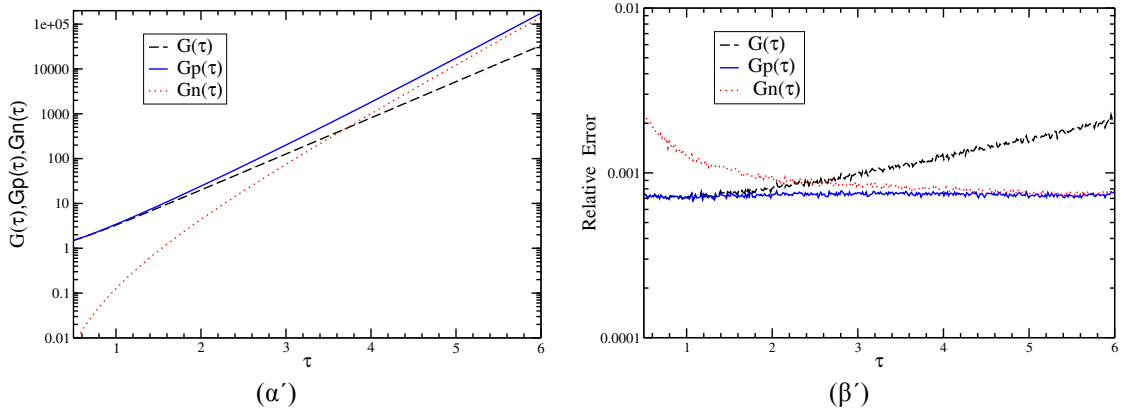


Σχήμα 8.3: (α') $G(\tau)$, $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ (β') Τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα, για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (0, 0)$

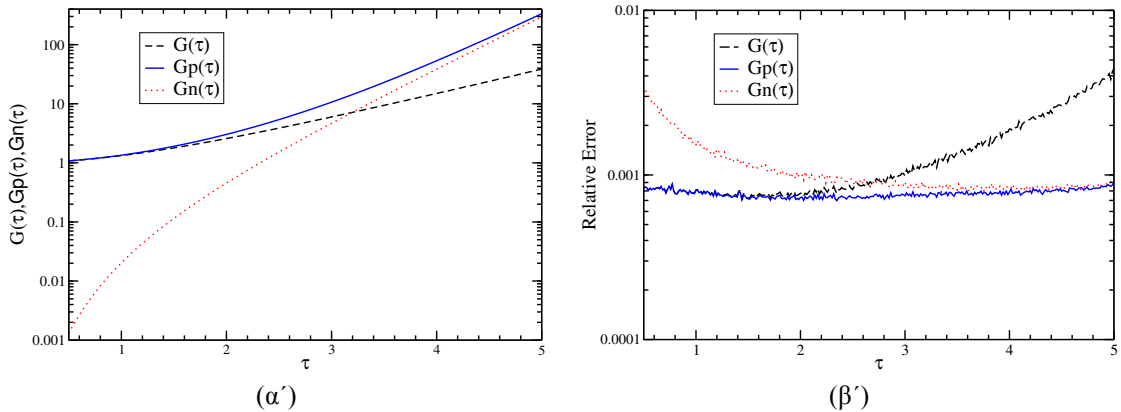
από ότι για $\vec{k} = (0, 0)$. Λαμβάνοντας υπόψη και τις άλλες μετρήσεις που έγιναν, γενικά για την ίδια τιμή της σταθεράς αλληλεπίδρασης J , συμπεραίνουμε ότι το πρόβλημα γίνεται εντονότερο καθώς από της τιμές $\vec{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ προχωράμε προς την τιμή $\vec{k} = (0, 0)$.

8.2.2 Η Φασματική Συνάρτηση $A(\omega)$.

Παρακάτω παρατίθενται τα αποτελέσματα της φασματικής συνάρτησης που προκύπτουν από την αναλυτική συνέχιση για τα εκάστοτε αποτελέσματα.

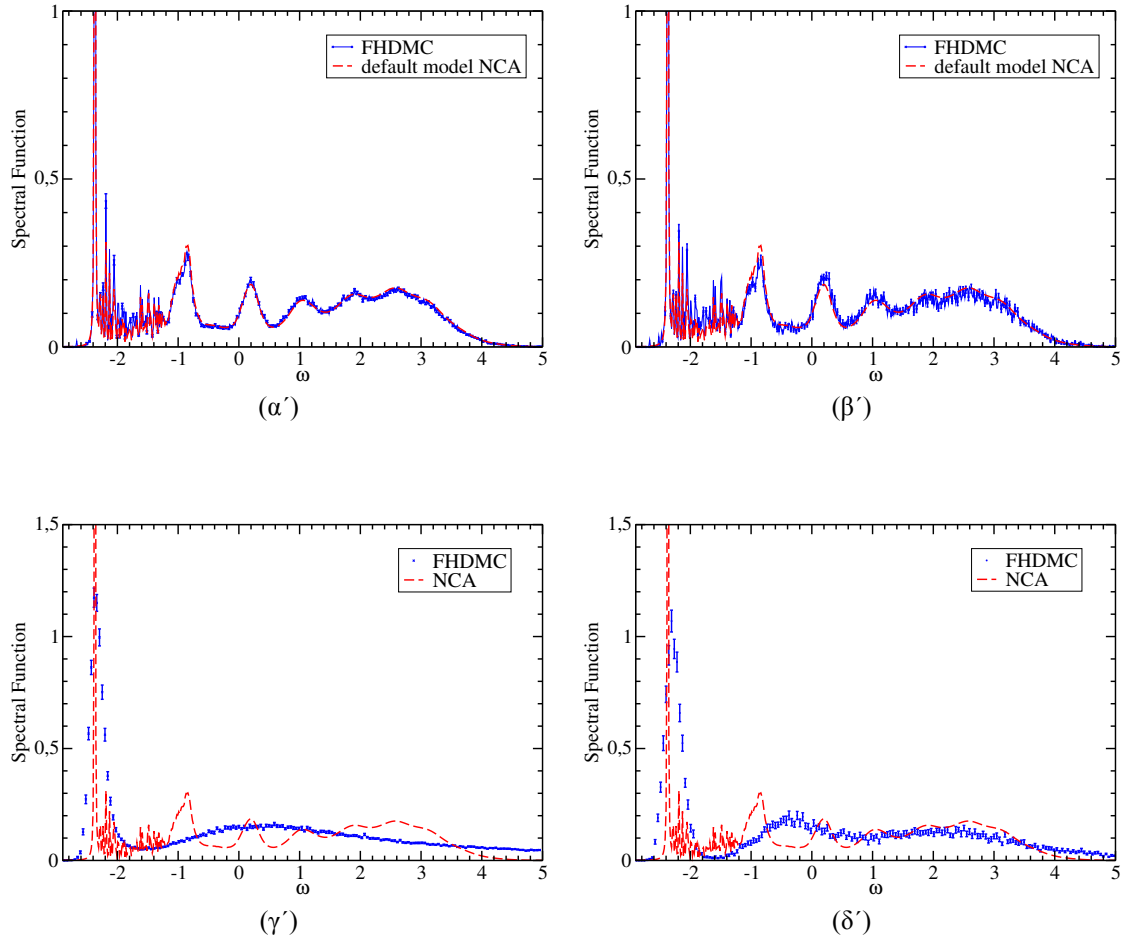


Σχήμα 8.4: (α') $G(\tau)$, $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ (β') Τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα για $J = 0.7$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$.



Σχήμα 8.5: (α') $G(\tau)$, $G_p(\tau)$ και $G_n(\tau)$ (β') Τα αντίστοιχα σχετικά σφάλματα για $J = 0.7$ και $\vec{k} = (0, 0)$.

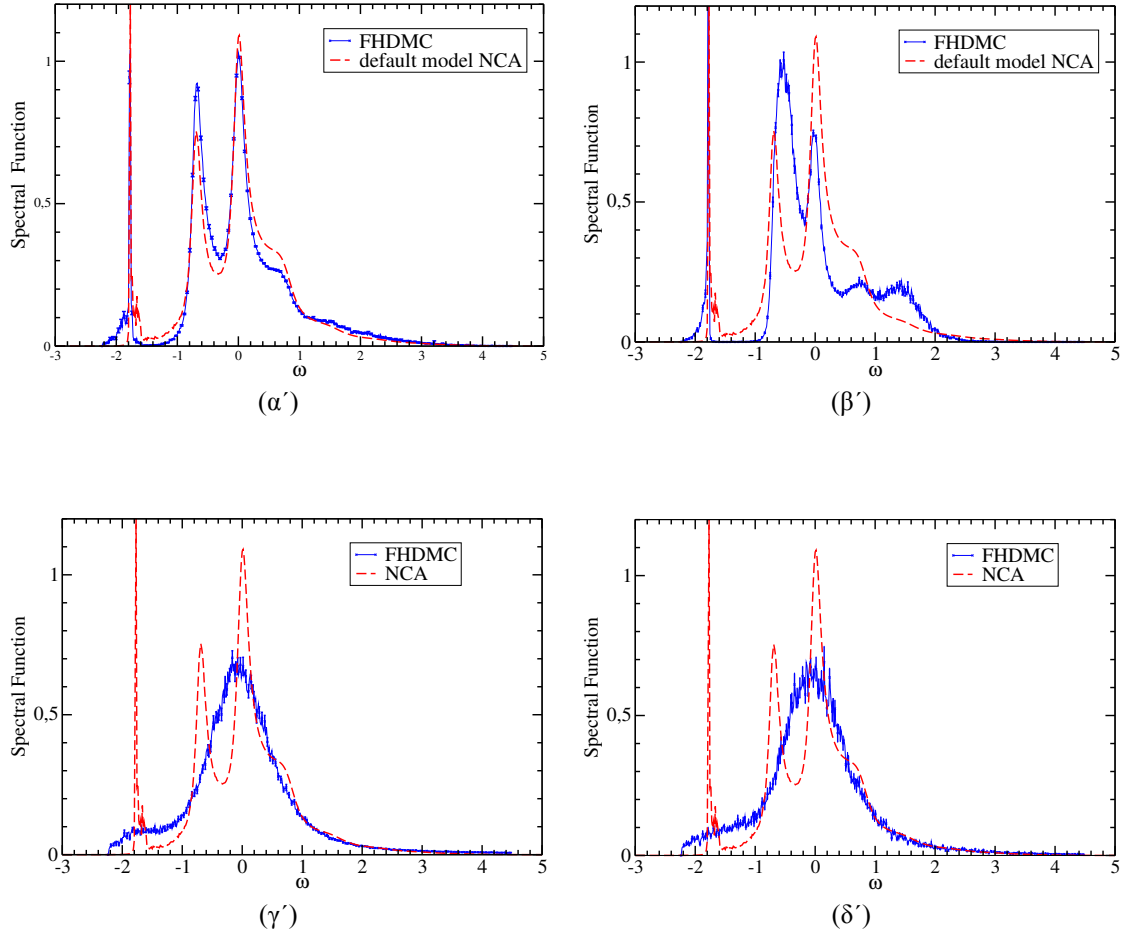
Στο σχήμα 8.6 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της αντιστροφής για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$. Στα πάνω σχήματα χρησιμοποιήθηκε ως default μοντέλο τα αντίστοιχα αποτελέσματα της NCA και στα κάτω η επίπεδη κατανομή. Για τα σχήματα στην αριστερή πλευρά η “θερμοκρασία” είναι $\alpha = 1.0$ και για τα σχήματα της δεξιάς πλευράς είναι $\alpha = 0.1$. Σε όλες τις περιπτώσεις είναι $\chi^2/L_d \sim 4.0$. Ένα απλό fitting με τρία εκθετικά, δηλ. $G(\tau) = z_1 \exp(-E_1) + z_2 \exp(-E_2) + z_3 \exp(-E_3)$ έδωσε: $z_1 = 0.31$, $E_1 = -2.36$, $z_2 = 0.22$, $E_2 = -1.06$, $z_3 = 0.47$, $E_3 = +1.95$.



Σχήμα 8.6: Η φασματική συνάρτηση $A(\omega)$, για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$. Πάνω default μοντέλο NCA. Κάτω default μοντέλο επίπεδη κατανομή. Αριστερά: $\alpha = 1.0$. Δεξιά: $\alpha = 0.1$

Στο σχήμα 8.7 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την φασματική συνάρτηση (Spectral Function) για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (0, 0)$ με την ίδια διάταξη του σχήματος 8.6. Σε όλες τις περιπτώσεις είναι $\chi^2/L_d \sim 3.5$. Ένα απλό fitting με τρία εκθετικά, δηλ. $G(\tau) = z_1 \exp(-E_1) + z_2 \exp(-E_2) + z_3 \exp(-E_3)$ έδωσε: $z_1 = 0.05$, $E_1 = -1.87$, $z_2 = 0.54$, $E_2 = -0.50$, $z_3 = 0.40$, $E_3 = +0.90$.

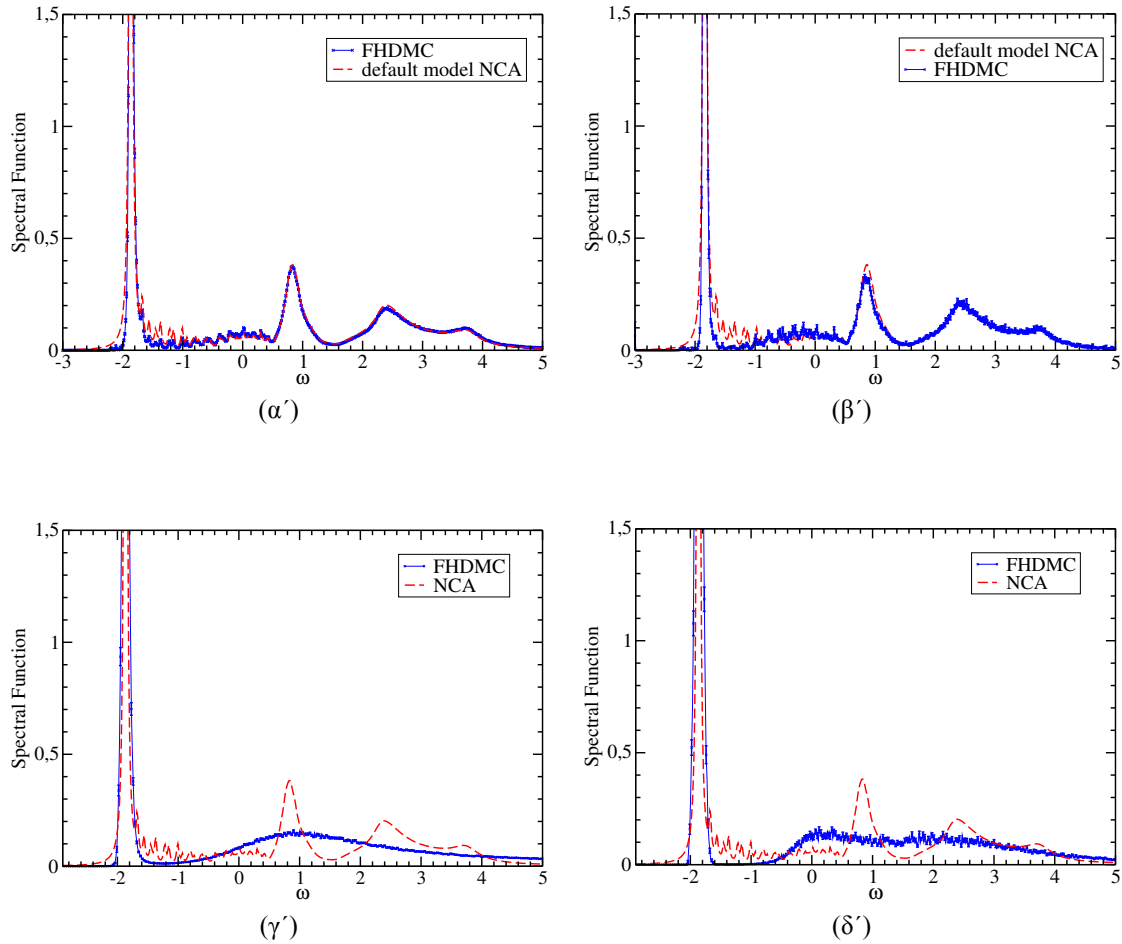
Στο σχήμα 8.8 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τα δεδομένα με $J = 0.7$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ με ίδια διάταξη όπως και προηγουμένως. Σε όλες τις περιπτώσεις είναι $\chi^2/L_d \sim 4.0$. Ένα απλό fitting με δύο εκθετικά, δηλ. $G(\tau) = z_1 \exp(-E_1) + z_2 \exp(-E_2)$ έδωσε: $z_1 = 0.49$, $E_1 = -1.85$, $z_2 = 0.49$, $E_2 = +1.20$.



Σχήμα 8.7: Η φασματική συνάρτηση $A(\omega)$, για $J = 0.3$ και $\vec{k} = (0, 0)$. Πάνω: default μοντέλο NCA. Κάτω: default μοντέλο επίπεδη κατανομή. Αριστερά: $\alpha = 1.0$. Δεξιά: $\alpha = 0.1$

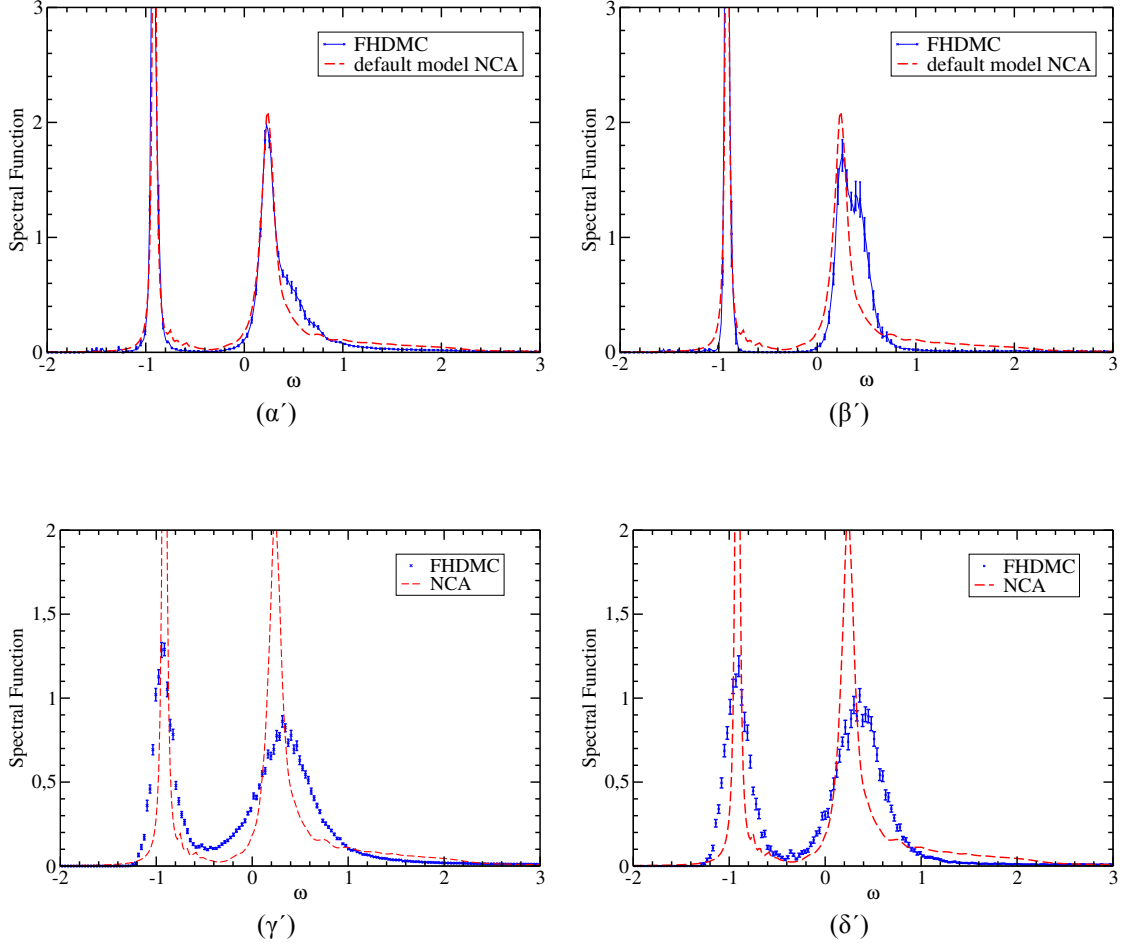
Τέλος στο σχήμα 8.9 έχουμε $J = 0.7$ και $\vec{k} = (0, 0)$. Για την περίπτωση που default μοντέλο είναι το αντίστοιχο αποτέλεσμα της NCA, είναι $\chi^2/L_d \sim 5.0$, ενώ για την περίπτωση της επίπεδης κατανομής είναι $\chi^2/L_d \sim 4.0$. Το απλό fitting με δύο εκθετικά έδωσε: $z_1 = 0.33$, $E_1 = -1.03$, $z_2 = 0.64$, $E_2 = +0.30$.

Στο σχήμα 8.10 παρατίθενται τα αποτελέσματα του ενεργειακού φάσματος της οπής για $J = 0.3$ που προκύπτουν από τους υπολογισμούς, όπως περιγράφονται στην αναφορά [12], με την προσέγγιση NCA.



Σχήμα 8.8: Η φασματική συνάρτηση $A(\omega)$, για $J = 0.7$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$. Πάνω: default μοντέλο NCA. Κάτω: default μοντέλο επίπεδη κατανομή. Αριστερά: $\alpha = 1.0$. Δεξιά: $\alpha = 0.1$

Στο σχήμα 8.11α' αναφέρονται τα αποτελέσματα που αφορούν τη μεταβολή της ελάχιστης ενέργειας $E(\pi/2, \pi/2)$ της ενέργειας μέγιστης $E(0, 0)$ καθώς και του εύρους $W = E(0, 0) - E(\pi/2, \pi/2)$ του ενεργειακού φάσματος του QP. Το δε σχήμα 8.11β' παρουσιάζει τις αντίστοιχες μεταβολές των φασματικών βαρών $Z(0, 0)$ και $Z(\pi/2, \pi/2)$.

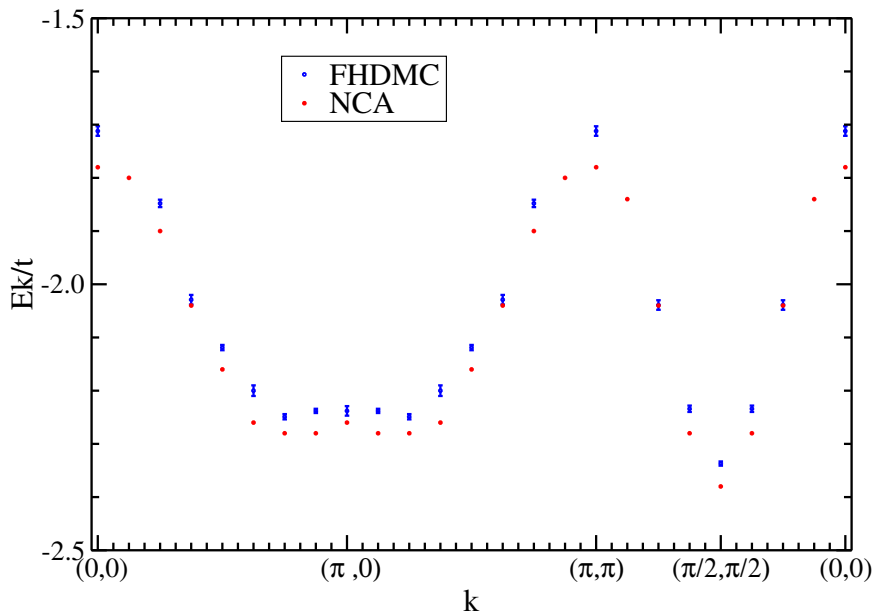


Σχήμα 8.9: Η φασματική συνάρτηση $A(\omega)$, για $J = 0.7$ και $\vec{k} = (0, 0)$. Πάνω: default μοντέλο NCA. Κάτω: default μοντέλο επίπεδη κατανομή. Αριστερά: $\alpha = 1.0$. Δεξιά: $\alpha = 0.1$

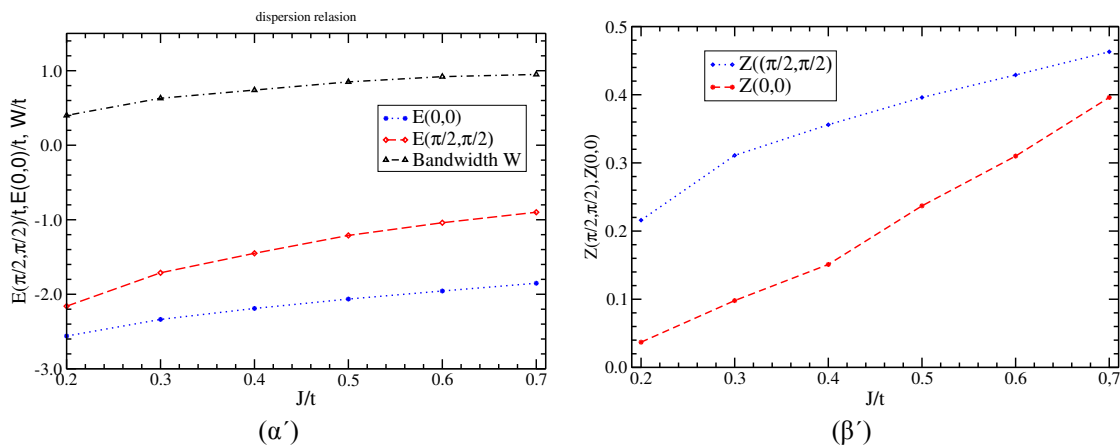
Παρατηρήσεις

Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση όπου είναι $J = 0.3$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ (δες σχήμα 8.6) το αποτέλεσμα της NCA σχεδόν αναπαράγεται όταν χρησιμοποιείται ως default μοντέλο. Όταν χρησιμοποιείται ως default μοντέλο η επίπεδη κατανομή παρουσιάζεται στο αποτέλεσμα η πρώτη κορυφή, ξεκινώντας από τις χαμηλότερες ενέργειες, ενώ η δεύτερη είναι μεταξύ της δεύτερης και τρίτης της NCA.

Για την περίπτωση $J = 0.3$ και $\vec{k} = (0, 0)$, αναπαράγεται πάλι η NCA όταν αυτή είναι το default μοντέλο, όμως τα αποτελέσματα για την χαμηλότερη ενέργεια είναι ποιοτικά χειρότερα από τα υπόλοιπα λόγω του περιορισμού του τ_{\max} λόγω του φαινομένου του φερμιονικού πρόσημου και λόγω της μικρής τιμής του παράγοντα z .



Σχήμα 8.10: Το ενεργειακό φάσμα της οπής για $J = 0.3$, που προκύπτει με υπολογισμούς στην NCA προσέγγιση και με υπολογισμούς που συμπεριλαμβάνεται το σύνολο των διαγραμμμάτων Feynman και προκύπτουν με εφαρμογή της FHDMC.



Σχήμα 8.11: (α') Η μέγιστη και ελάχιστη τιμή της ενέργειας του QP καθώς και το εύρος της ενεργειακής ζώνης. (β') Τα φασματικά βάρη για διάφορες τιμές της σταθεράς J

Για την περίπτωση $J = 0.7$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ αναπαράγεται η NCA όμοια με την περίπτωση $J = 0.3$ και $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$.

Τέλος για την περίπτωση $J = 0.7$ και $\vec{k} = (0, 0)$, επειδή έχουμε μόνο δύο κορυφές τα αποτελέσματα είναι σχεδόν ίδια για όλες τις περιπτώσεις. παρατηρούμε ότι η απόκλιση από την NCA είναι μεγαλύτερη σε σχέση με τα προηγούμενα.

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των σχημάτων 8.10, 8.11α' και 8.11β' με αντίστοιχες τιμές της αναφοράς [12], παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα της NCA είναι κοντά με αυτά που προκύπτουν από την FHDMC όπου υπολογίζεται όπως έχουμε πει όλοι η σειρά των διαγραμμάτων Feynman. Παρουσιάζουν μια μικρή συστηματική απόκλιση, η οποία όμως δεν παρατηρείται στους υπολογισμούς με την αντιστροφή.

Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα

Παρατηρούμε ότι η μορφή για την φασματική συνάρτηση $A(\omega)$ που υπολογίζεται συμπεριλαμβάνοντας όλα τα διαγράμματα Feynman της σειράς είναι πολύ κοντά με αυτή που προκύπτει με την προσέγγιση NCA. Στην αναφορά [67] διαπιστώνεται ότι τα αποτελέσματα της NCA για την φασματική συνάρτηση συμφωνούν με αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα που προέκυψαν με την μέθοδο Γωνιακής Ανάλυσης Φωτοεκπομπή Φασματοσκοπία (ARPES) [68–70]. Συνεπώς έμμεσα προκύπτει η συμφωνία των αποτελεσμάτων για την πλήρη σειρά των διαγραμμάτων Feynman με τα πειραματικά δεδομένα.

8.3 Συμπέρασμα

Από τα παραπάνω μπορούμε να εξάγουμε τα ακόλουθα συμπεράσματα:

1. Υπολογισμός της $G(\tau)$ με την FHDMC

α') Στο συγκεκριμένο πρόβλημα που εξετάσαμε παρουσιάζεται το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου. Με την εφαρμογή της FHDMC εξασφαλίζουμε την πλέον μεγαλύτερη τιμή της μέγιστης τιμής του φανταστικού χρόνου τ_{\max} μέχρι του οποίου υπολογίζουμε το ιστόγραμμα της $G(\tau)$. Προσπάθειες που έγιναν με χρήση οδηγέτριας συνάρτησης για την Διαγραμματική Monte Carlo είχαν κατώτερα αποτελέσματα.

β') Ο ταυτόχρονος υπολογισμός της $G_p(\tau)$, $G_n(\tau)$ και $G(\tau)$ μας παρέχει μια άμμεση εικόνα των μεταβολών των παραπάνω ποσοτήτων με τον φανταστικό χρόνο τ . Αυτό μας δίνει την δυνατότητα να επιλέξουμε σύντομα την ασφαλή και χωρίς μεγάλα στατιστικά λάθη, μέγιστη τιμή της μέγιστης τιμής του φανταστικού χρόνου τ_{\max} , μέχρι του οποίου θα υπολογισθεί με την FHDMC η $G(\tau)$.

γ') Το σχετικό σφάλμα της $G(\tau)$ έχει περίπου σταθερή τιμή για όλους τους χρόνους και συνεπώς γίνεται καλύτερη αξιοποίηση της πληροφορίας που περιέχεται στην $G(\tau)$ για όλο το φάσμα του χρόνου.

2. Τα αποτελέσματα της αντιστροφής

Η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων της αντιστροφής γίνεται εξετάζοντας μαζί τα αποτελέσματα που λαμβάνονται όταν το default μοντέλο είναι η επίπεδη κατανομή με αυτά όταν το default μοντέλο περιέχει a priori γνώση της φασματικής συνάρτησης. Στην πρώτη περίπτωση παρατηρούμε ότι το αποτέλεσμα της φασματικής συνάρτησης περιέχει κατά κανόνα τα δύο μέγιστα για τις δύο πρώτες ελάχιστες ενέργειες χωρίς όμως να αναδεικνύει τις περισσότερα μέγιστα αν αυτά υπάρχουν. Επίσης αν το φασματικό βάρος για την ελάχιστη ενέργεια είναι μικρό το μέγιστο αναδεικνύεται με μικρό ύψος και στις ακραίες περιπτώσεις έχει και μεγάλο πλάτος. Όταν η φασματική συνάρτηση περιέχει δύο μέγιστα τότε αυτή αναδεικνύεται πλήρως και με default μοντέλο την επίπεδη κατανομή. Από την άλλη μεριά όταν το default μοντέλο περιέχει a priori γνώση αυτή αναδεικνύεται με την αντιστροφή αναπαράγοντας και περισσότερα μέγιστα της φασματικής συνάρτησης.

Λαμβάνοντας υπόψη τα παραπάνω, καθώς επίσης και τα συμπεράσματα του προηγούμενου κεφαλαίου, συμπεραίνουμε ότι τα αποτελέσματα της αντιστροφής, όταν το default μοντέλο είναι τα αντίστοιχα αποτελέσματα της NCA για το πρόβλημα, αντικατοπτρίζουν την φασματική συνάρτηση του συστήματος.

3. Fitting σε μεγάλους χρόνους.

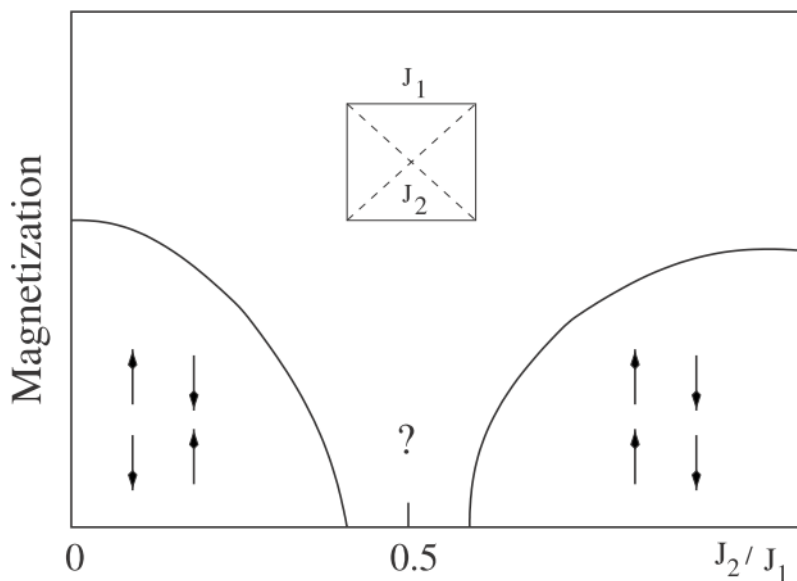
Όταν ο υπολογισμός της ελάχιστης ενέργειας του οιονεί σωματιδίου γίνεται το fitting ενός απλού εκθετικού της $G(\tau)$ για μεγάλους χρόνους, τότε υπάρχει συστηματικό λάθος και οφείλεται σε δύο λόγους. Πρώτον, ο υπολογισμός της $G(\tau)$ δεν γίνεται για αρκετά μεγάλους χρόνους ώστε να ισχύει με καλή ακρίβεια η ασυμπτωτική της προσέγγιση με το εκθετικό της ελάχιστης ενέργειας. Δεύτερον, σε σχέση με την αντιστροφή αξιοποιούμε την πληροφορία για την $G(\tau)$ σε ένα παράθυρο στους μεγάλους χρόνους και όχι το σύνολό της πληροφορίας που έχουμε και αφορά την τιμή του $G(\tau)$ σε όλα τα χρονικά σημεία.

9

Μελέτη της φασματικής συνάρτησης μιας οπής στο μοντέλο $t - J_1 - J_2$ με την Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo

Σε προηγούμενο κεφάλαιο (κεφάλαιο 5) εξετάσαμε την περίπτωση του μοντέλου Heisenberg, όπου σε ένα δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα υπάρχει αντισιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση και μεταξύ πρώτων γειτόνων, με σταθερά αλληλεπίδρασης ανταλλαγής J_1 και μεταξύ δευτέρων γειτόνων με αντίστοιχη σταθερά J_2 . Το φαινόμενο που παρουσιάζεται τότε ονομάζεται frustration και στην περίπτωση αυτή εξετάζοντας την κλασική ενέργεια του συστήματος οδηγηθήκαμε σε δύο βασικές καταστάσεις για το σύστημα οι οποίες προκύπτουν ανάλογα με την τιμή του λόγου των δύο σταθερών J_1 και J_2 . Στην πρώτη βασική κατάσταση, Néel τάξη, το διάνυσμα τάξης είναι $\vec{Q} = (\pi, \pi)$, δηλ. το πλέγμα είναι αντισιδηρομαγνητικό. Στην άλλη βασική κατάσταση, columnar τάξη, το αντίστοιχο διάνυσμα τάξης είναι $\vec{Q} = (\pi, 0)$ ή $\vec{Q} = (0, \pi)$ και το πλέγμα είναι αντισιδηρομαγνητικό στην μία διεύθυνση και σιδηρομαγνητικό στην άλλη. Για την κάθε περίπτωση, με την στάνταρντ διαδικασία (χρήση μετασχηματισμών Holstein-Primakoff και Bogoliubov), διαγωνιοποιήσαμε την Hamiltonian Heisenberg στα πλαίσια της γραμμικής προσέγγισης των κυμάτων spin εξάγοντας τις αντίστοιχες σχέσεις διασποράς, $\omega(\vec{q})$ για τις διεγέρσεις δηλ. τα μαγνόνια.

Το μοντέλο Heisenberg $J_1 - J_2$ που αναφέρουμε παραπάνω, έχει μελετηθεί εκτενώς [72–76] και το διάγραμμα φάσης που προκύπτει για τις διάφορες τιμές του λόγου J_2/J_1 είναι αυτό του σχήματος 9.1. Για τις τιμές $J_2/J_1 < 0.4$ η τοπική μαγνήτιση μειώνεται μέχρι το κρίσιμο σημείο, όπου $J_2/J_1 = 0.4$, και από την άλλη μεριά η columnar τάξη διατηρείται καθώς το κλάσμα J_2/J_1 μειώνεται προσεγγίζοντας την τιμή $J_2/J_1 = 0.6$. Για τις ενδιάμεσες τιμές $0.4 < J_2/J_1 < 0.6$, διάφορες μελέτες έχουν γίνει [77–79], όπου φαίνεται η φάση του



Σχήμα 9.1: Σχηματικό διάγραμμα της μαγνητικής φάσης του $J_1 - J_2$ μοντέλου. Οι συνεχείς γραμμές δείχνουν την τιμή της τοπικής μαγνήτισης. (αναφορά [71])

συστήματος να είναι υγρό spin χωρίς τάξη. Από πρακτικής πλευράς, η Néel τάξη απαντάται ευρέως στα οξειδία των στοιχείων μεταπτώσεων, το δε στοιχείο Li_2VO_4 περιγράφεται με το μοντέλο $J_1 - J_2$ στην περιοχή της columnar.

Με την ανακάλυψη των υπεραγώγιμων υλικών υψηλής θερμοκρασίας, προτάθηκε η άποψη ότι η μελέτη και η εξήγηση του φαινομένου πρέπει να γίνει στα πλαίσια της κίνησης οπών σε σύστημα ισχυρής συσχέτισης. Οι Kane et al [5], διατύπωσαν μία θεωρία όπου μεταχειρίζονται την οπή ως ένα οιονεί σωματίδιο. Εξέτασαν την περίπτωση του μοντέλου $t - J$ στη γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin, όπου η οπή κινείται μέσα στο αντισιδηρομαγνητικό περιβάλλον αλληλεπιδρώντας με τα μαγνόνια. Υπολογίζουν τη συνάρτηση Green πραγματικού χρόνου στο όριο $J \ll t$, όπου λαμβάνονται υπόψη μόνο τα διαγράμματα Feynman όπου οι μαγνονικοί διαδότες δεν τέμνονται. Αυτή η προσέγγιση λέγεται NCA (noncrossing approximation) και καταλήγει σε μια αυτοσυνεπή θεωρία διαταραχών. Για θερμοκρασία $T = 0$ ο υπολογισμός της συνάρτησης Green $G(\vec{k}, \omega)$ γίνεται από την αυτοσυνεπή ολοκληρωτική εξίσωση:

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \sum_{\vec{q}} f(\vec{k}, \vec{q})G(\vec{k} - \vec{q}, \omega - \omega_{\vec{q}})} \quad (9.1)$$

Η συνάρτηση $f(\vec{k}, \vec{q})$ είναι της τάξης t^2 και περιέχει την πληροφορία της σύζευξης της οπής με τα μαγνόνια. Η $\omega(\vec{q})$ είναι η ενέργεια των μαγνόνιων.

Από την $G(\vec{k}, \omega)$ υπολογίζεται η φασματική συνάρτηση $A(\vec{k}, \omega)$ με την βοήθεια της σχέσης:

$$A(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G(\vec{k}, \omega) \quad (9.2)$$

Η $A(\vec{k}, \omega)$ περιγράφει το φάσμα της ενέργειας των διεγέρσεων της οπής. Εάν η συνάρτηση $A(\vec{k}, \omega)$ παρουσιάζει τοπικό μέγιστο σε κάποια τιμή του ω , τότε υφίσταται οιονεί σωματίδιο με ενέργεια ω , στην αντίθετη περίπτωση δεν υπάρχει οιονεί σωματίδιο. Η αριθμητική επίλυση της εξίσωσης 9.1 περιγράφεται στην αναφορά [12] και είναι ο τρόπος τον οποίο εφαρμόσαμε για την επίλυση των αντιστοιχών περιπτώσεων που χρειάστηκε.

Θα εφαρμόσουμε την εικόνα αυτή για την οπή, δηλ. της θεωρίας των Kane et al [5] του οιονεί σωματιδίου για το μοντέλο $t - J_1 - J_2$ στις δύο περιοχές και στην ενδιάμεση περιοχή. Η θερμοκρασία λαμβάνεται πάντα $T = 0$. Εξετάζουμε την σχέση διασποράς του οιονεί σωματιδίου καθώς και το αντίστοιχο βάρος Z_k . Το ίδιο πρόβλημα αντιμετωπίζεται και από τους συγγραφείς της αναφοράς [71]. Εμείς χρησιμοποιούμε διαφορετική μέθοδο προσέγγισης καθώς και επιπλέον υπολογίζουμε τις αντίστοιχες ποσότητες χωρίς τον περιορισμό στα διαγράμματα που περιέχει η NCA. Στο πρώτο κεφάλαιο που ακολουθεί περιγράφουμε το πρόβλημα και τις μεθόδους που εφαρμόζουμε, στο δεύτερο παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα και στο τρίτο τα αντίστοιχα συμπεράσματα που προκύπτουν.

9.1 Το Πρόβλημα και οι Μέθοδοι

Για την περίπτωση αλληλεπίδρασης μεταξύ πρώτων και δεύτερων γειτόνων, καθώς και για μετάβαση της οπής μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων, η Hamiltonian που περιγράφει το πρόβλημα έχει τη μορφή:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \bar{c}_{i\sigma}^\dagger \bar{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} J_1 \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} J_2 \sum_{[[i,j]]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (9.3)$$

Όπως προαναφέραμε ανάλογα με την τιμή του λόγου $\lambda = J_2/J_1$ η τάξη του πλέγματος είναι Néel ή columnar. Παρακάτω εξετάζουμε κάθε περίπτωση ξεχωριστά.

A') Néel τάξη

Στην περίπτωση αυτή μετά την στάνταρντ διαδικασία η Hamiltonian παίρνει τη μορφή:

$$H = E_0 + \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} \epsilon(\vec{k}) h_{\vec{k}}^\dagger h_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k} \in \text{FBZ}} \omega(\vec{k}) b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + \frac{tz}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in \text{FBZ}} M_{\vec{k}, \vec{q}} h_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger h_{\vec{k}} b_{\vec{q}} + h.c$$

Όπου $h_{\vec{k}}^{\dagger}(h_{\vec{k}})$ και $b_{\vec{k}}^{\dagger}(b_{\vec{k}})$ οι τελεστές δημιουργίας (καταστροφής) οπής χωρίς spin και μαγνονίου αντίστοιχα, ορμής \vec{k} . Επίσης είναι $\epsilon(\vec{k}) = 0$. Η ενέργεια των μαγνονίων δίνεται από τη σχέση:

$$\omega(\vec{k}) = \frac{J_1 z}{2} \sqrt{(1 - \lambda + \lambda \Gamma_{\vec{k}})^2 - \gamma_{\vec{k}}^2} \quad (9.4)$$

Είναι $M_{\vec{k}, \vec{q}} = u_q \gamma_{\vec{k}} + v_q \gamma_{\vec{k} + \vec{q}}$, όπου οι συντελεστές Bogoliubov δίνονται από τις σχέσεις:

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \Lambda_{\vec{k}}^2}} \right)} \quad (9.5)$$

$$v_k = -\text{sgn}(\Lambda_{\vec{k}}) \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \Lambda_{\vec{k}}^2}} - 1 \right)} \quad (9.6)$$

$$\text{όπου} \quad \Lambda_{\vec{k}} = \frac{\gamma_{\vec{k}}}{1 - \lambda + \lambda \Gamma_{\vec{k}}} \quad (9.7)$$

Είναι δε $\Gamma_{\vec{k}} = \cos k_x \cos k_y$ και $\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y)$.

B') Columnar Τάξη

Σε αυτή την περίπτωση, όπως έχουμε δει, η τελική μορφή της Hamiltonian είναι:

$$\begin{aligned} H = & H_J^0 + \sum_{\vec{q} \in FBZ} \omega(\vec{q}) b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} + \sum_{\vec{k} \in FBZ} \epsilon(\vec{k}) h_{\vec{k}}^{\dagger} h_{\vec{k}} \\ & + \sum_{\vec{k}, \vec{q} \in FBZ} \left[V(t, \vec{k}, \vec{q}) h_{\vec{k} + \vec{q}}^{\dagger} h_{\vec{k}} b_{\vec{q}} + h.c. \right] \end{aligned} \quad (9.8)$$

Όπου οι σχέσεις διασποράς της οπής και του μαγνονίου αντίστοιχα είναι:

$$\epsilon(\vec{k}) = 2t \cos k_y \quad (9.9)$$

$$\text{και} \quad \omega(\vec{q}) = J_1 \sqrt{(2\lambda + \cos q_y)^2 - \cos^2 q_x (1 + 2\lambda \cos q_y)^2} \quad (9.10)$$

Η κορυφή δίνεται από τη σχέση:

$$V(t, \vec{k}, \vec{q}) = \frac{2t}{\sqrt{N}} [u_q \cos k_x + v_q \cos(k_x + q_x)] \quad (9.11)$$

Οι συντελεστές του μετασχηματισμού Bogoliubov δίνονται από τις σχέσεις:

$$u_q = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{L(\vec{q})}{E(\vec{q})} \right)^2}} \right)} \quad (9.12)$$

$$v_q = -\text{sgn} \left(\frac{L(\vec{q})}{E(\vec{q})} \right) \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{L(\vec{q})}{E(\vec{q})} \right)^2}} - 1 \right)} \quad (9.13)$$

όπου είναι

$$E(\vec{q}) = J_1(2\lambda + \cos q_y) \quad (9.14)$$

$$L(\vec{q}) = J_1 \cos q_x(1 + 2\lambda \cos q_y) \quad (9.15)$$

Μέθοδος. Για την πρώτη περίπτωση υπολογίζουμε στη προσέγγιση της NCA το φάσμα του οιονεί σωματιδίου για διάφορες τιμές του λόγου $\lambda = J_2/J_1$. Οι τιμές του λ για τις οποίες κάνουμε τους υπολογισμούς λαμβάνονται και εντός του διαστήματος $0.4 < \lambda < 0.6$. Για τους αριθμητικούς υπολογισμούς χρησιμοποιούμε τη μέθοδο που περιγράφεται στην αναφορά [12], όπου από την αυτοσυνεπή ολοκληρωτική εξίσωση 9.1 υπολογίζουμε την συνάρτηση Green $G(\vec{k}, \omega)$ και κατόπιν με τη βοήθεια της σχέσης 9.2 υπολογίζουμε την φασματική συνάρτηση $A(\vec{k}, \omega)$. Το βάρος φάσματος $Z(\vec{k})$ του οιονεί σωματιδίου μπορεί να υπολογισθεί από τη σχέση:

$$Z(\vec{k}) = \left(1 - \frac{\partial \operatorname{Re}\{\Sigma(\vec{k}, \omega)\}}{\partial \omega}\right)^{-1} \Big|_{\omega=E(\vec{k})}$$

Όπου $E(\vec{k})$ είναι η ενέργεια του οιονεί σωματιδίου. Στην περίπτωσή μας ο υπολογισμός έγινε κατευθείαν από το διάγραμμα της $A(\vec{k}, \omega)$.

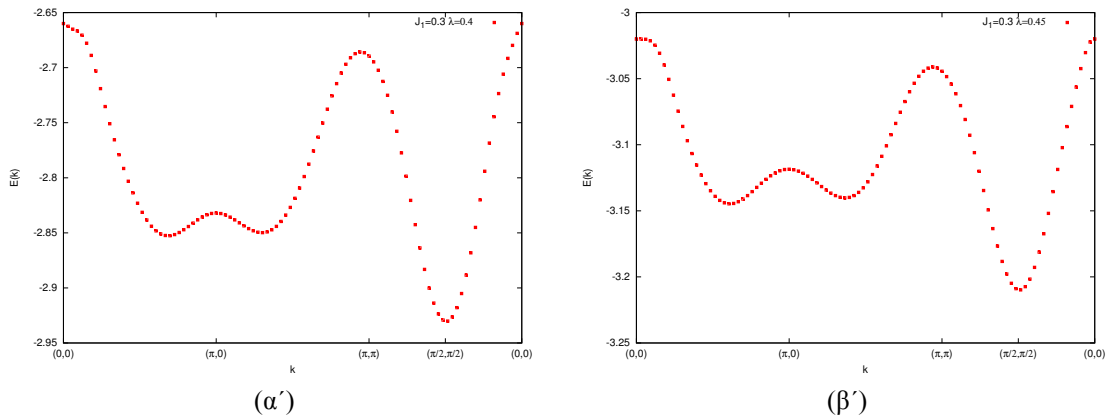
Ακόμη και για τις δύο περιπτώσεις έγιναν αντίστοιχοι υπολογισμοί της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου, $G(\tau)$, με την Επιπέδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo (FHDMC). Οι υπολογισμοί έγιναν χωρίς τον περιορισμό της NCA, δηλ. συμπεριλαμβανομένων όλων των διαγραμμάτων Feynman. Από την $G(\tau)$ με fitting ενός εκθετικού ($G(\tau) \sim Z(\vec{k}) \exp(-E(\vec{k})\tau)$) σε όσο το δυνατόν μεγαλύτερες τιμές του φανταστικού χρόνου τ , υπολογίσθηκαν οι αντίστοιχες τιμές της ενέργειας και του φασματικού βάρους του οιονεί σωματιδίου. Σε όλες τις περιπτώσεις η FHDMC ήταν με τη χρήση της μεθόδου των Wang-Landau [17].

9.2 Αποτελέσματα-Παρατηρήσεις

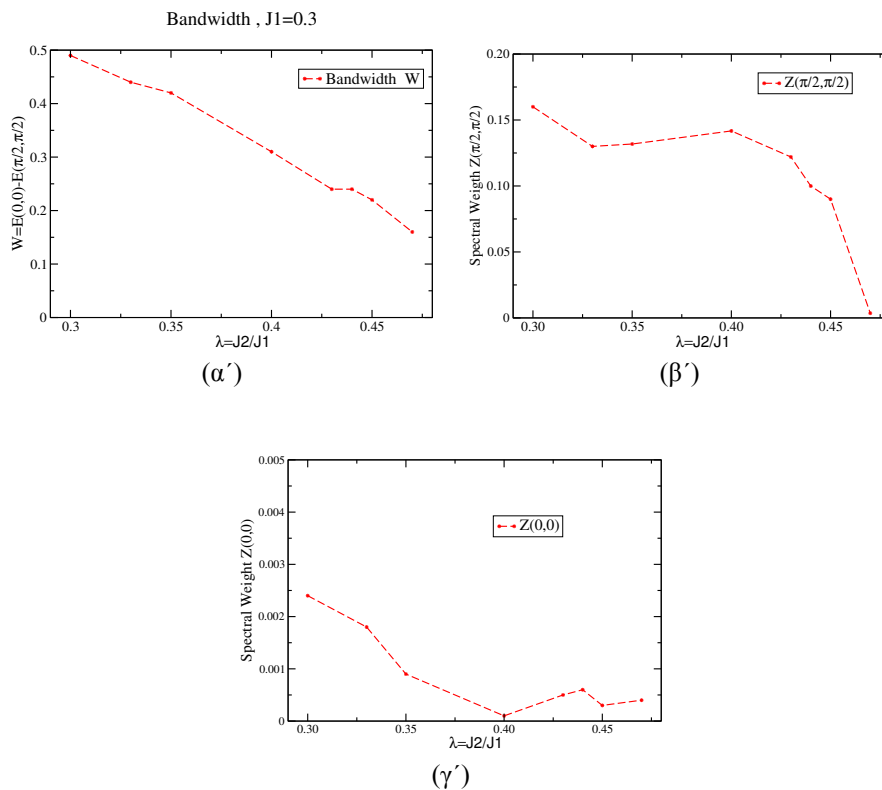
9.2.1 Néel Τάξη.

Πραγματοποιήσαμε για ένα πλήθος τιμών του λόγου $\lambda = J_2/J_1$ και του \vec{k} υπολογισμούς στην προσέγγιση NCA, με τον τρόπο που περιγράφεται στην αναφορά [12]. Υπολογίσαμε σε κάθε περίπτωση την ελάχιστη ενέργεια του οιονεί σωματιδίου και το φασματικό βάρος.

Στο σχήμα 9.2 αποτυπώνεται το φάσμα της ενέργειας του οιονεί σωματιδίου για τις τιμές του λόγου των μαγνητικών σταθερών ανταλλαγής $\lambda = 0.40$ και $\lambda = 0.45$. Παρατηρούμε ότι η δομή της σχέσεις διασποράς παραμένει ίδια με αυτή του οιονεί σωματιδίου στο $t - J$ μοντέλο. Η ελάχιστη ενέργεια παρουσιάζεται για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και η μέγιστη στο $\vec{k} = (0, 0)$ και $\vec{k} = (\pi, \pi)$.



Σχήμα 9.2: Η σχέση διασποράς για $J_1 = 0.3$: (α') για $\lambda = 0.4$ και (β') για $\lambda = 0.45$. Οι υπολογισμοί είναι στην προσέγγιση NCA.



Σχήμα 9.3: Μεταβολή σε συνάρτηση με το λ : (α') του εύρους της ενεργειακής ζώνης W , (β') του φασματικού βάρους $Z(\pi/2, \pi/2)$ και (γ') του φασματικού βάρους $Z(0, 0)$.

Τα σχήματα 9.3α', 9.3β' και 9.3γ' αναφέρονται στην εξάρτηση του εύρους της ζώνης της ενέργειας του οιονεί σωματιδίου, του φασματικού βάρους για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και του φασματικού βάρους για $\vec{k} = (0, 0)$ αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι με την αύξηση του λόγου λ το εύρος της ζώνης W , καθώς επίσης και το φασματικό βάρος $Z(\vec{k})$ μειώνονται. Η μείωση του εύρους της ενεργειακής ζώνης του οιονεί σωματιδίου σχετίζεται με τη μείωση του εύρους της ενεργειακής ζώνης του μαγνονίου (δες παρακάτω σχήμα 9.4).

Παρακάτω δίνεται η εξήγηση της μείωσης του φασματικού βάρους. Η θερμοκρασία του συστήματος είναι $T = 0$ και συνεπώς η οπή αλληλεπιδρά με τις διεγέρσεις πολύ κοντά στην ελάχιστη ενέργεια των μαγνονίων δηλ $\omega(\vec{q}) = 0$. Η κυματοσυνάρτηση του συστήματος γράφεται ως ([80]):

$$|\Psi_{\vec{k}}\rangle = a_{\vec{k}}^{(0)} h_{\vec{k}}^{\dagger} |AF\rangle + \sum_{\vec{q}} a_{\vec{k}\vec{q}}^{(1)} h_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}}^{\dagger} |AF\rangle + \dots \quad (9.16)$$

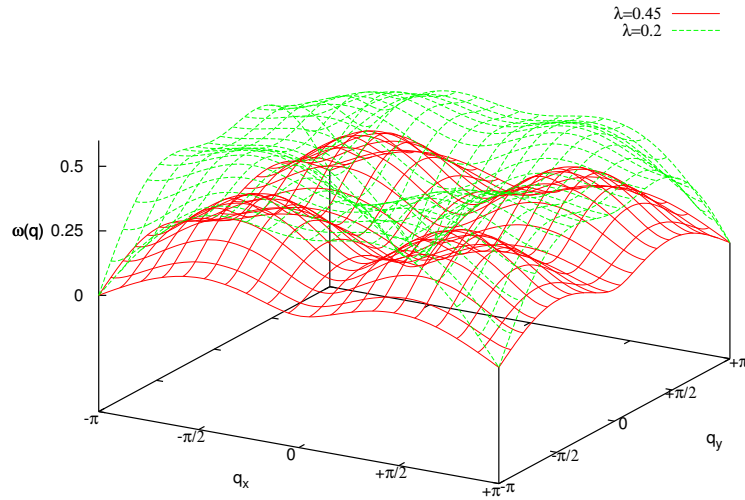
Είναι $a_{\vec{k}}^{(0)}$ το πλάτος πιθανότητας στο σύστημα να έχουμε ένα μόνο οιονεί σωματίδιο χωρίς μαγνόνιο. Είναι $a_{\vec{k}\vec{q}}^{(1)}$ το πλάτος πιθανότητας να έχουμε μία οπή και ένα μαγνόνιο, $a_{\vec{k}\vec{q}\vec{q}'}$ το πλάτος πιθανότητας να έχουμε μία οπή και δύο μαγνόνια κ.ο.κ. Είναι $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ οπότε προκύπτει:

$$\left|a_{\vec{k}}^{(0)}\right|^2 + \sum_{\vec{q}} \left|a_{\vec{k}\vec{q}}^{(1)}\right|^2 + \dots = 1 \quad (9.17)$$

Επομένως το φασματικό βάρος του οιονεί σωματιδίου είναι $Z(\vec{k}) = \left|a_{\vec{k}}^{(0)}\right|^2$. Αν κοντά στο μηδέν της ενέργειας των μαγνονίων η πυκνότητα των καταστάσεων είναι μικρή, τότε θα έχουμε καταστάσεις με λίγα μαγνόνια. Αντίθετα, αν η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων είναι μεγάλη, τότε θα εμφανίζονται καταστάσεις με πολλά μαγνόνια. Από τη σχέση 9.17 προκύπτει ότι στην δεύτερη περίπτωση το $\left|a_{\vec{k}}^{(0)}\right|^2$ θα είναι μικρότερο. Συνεπώς και το φασματικό βάρος στη δεύτερη περίπτωση θα είναι και αυτό μικρότερο από αυτό της πρώτης περίπτωσης.

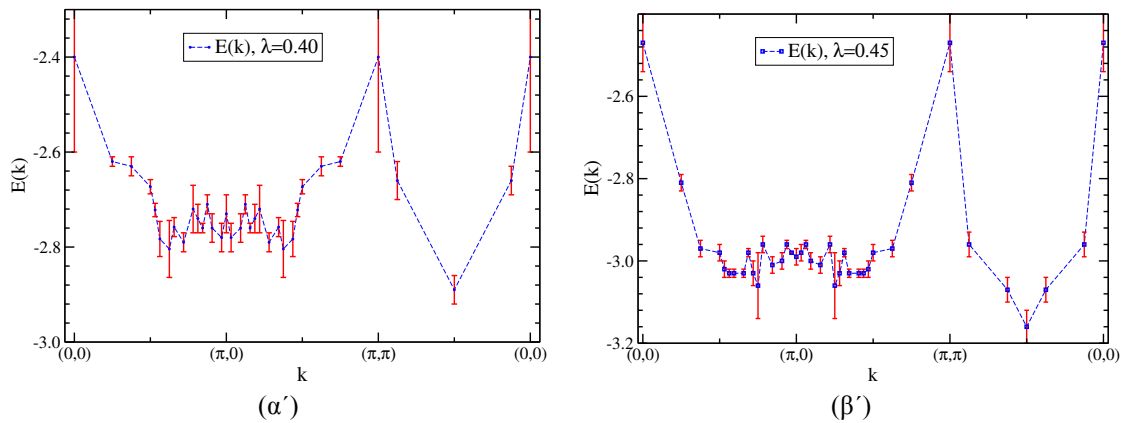
Στο σχήμα 9.4 φαίνεται η εξάρτηση της ενέργειας για δύο διαφορετικές τιμές του λόγου λ . Παρατηρούμε ότι με την αύξηση του λ , το εύρος της ενεργειακής μικραίνει και συνεπώς η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων αυξάνει. Η πυκνότητα των καταστάσεων αυξάνει και κοντά στην τιμή $\omega(\vec{q}) = 0$ με συνέπεια η οπή να αλληλεπιδρά με περισσότερα μαγνόνια. Συνεπώς το πλάτος πιθανότητας των καταστάσεων με πολλά μαγνόνια αυξάνεται και επομένως από την εξίσωση 9.16 προκύπτει ότι το $\left|a_{\vec{k}}^{(0)}\right|^2$ μικραίνει. Άρα το φασματικό βάρος $Z(\vec{k})$ μικραίνει.

Συνήθως κοντά στην περιοχή που αλλάζει η φάση γίνεται μια τροποποίηση της θεωρίας των κυμάτων spins [81–83], όμως τα αποτελέσματα δεν τροποποιούνται όπως έχουν δείξει οι συγγραφείς της αναφοράς [71]. Συνεπώς μπορούμε να εφαρμόσουμε την NCA θεωρώντας την τάξη του κρυστάλλου να επεκτείνεται σε όλη την έκταση του.



Σχήμα 9.4: Η ενέργεια των μαγνόνιων για στο $J_1 - J_2$ μοντέλο στην Νέελ τάξη.

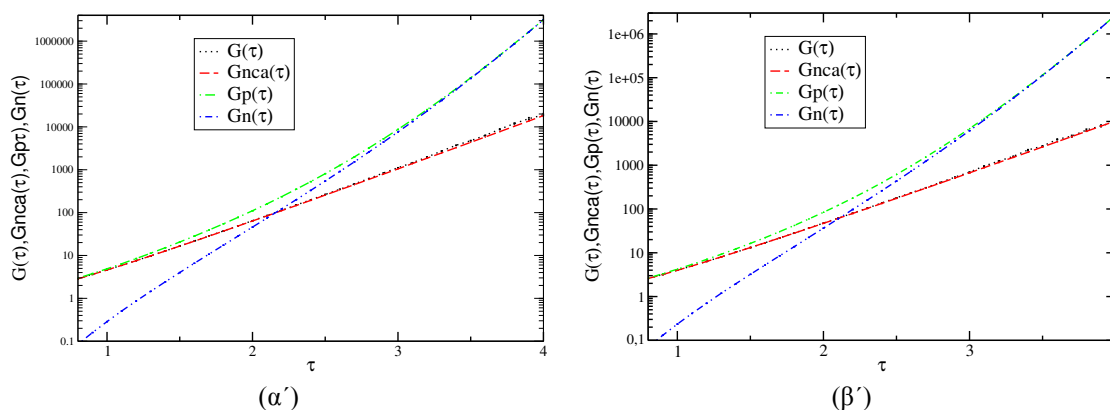
Πλήρης Σειρά Διαγραμμάτων – Υπολογισμοί με χρήση της FHDMC



Σχήμα 9.5: Η σχέση διασποράς για $J_1 = 0.3$: (α') για $\lambda = 0.4$ και (β') για $\lambda = 0.45$. Οι υπολογισμοί περιέχουν όλα τα διαγράμματα Feynman.

Υπολογίσαμε με τη βοήθεια της FHDMC την συνάρτηση Green φανταστικού για διάφορες τιμές του \vec{k} , συμπεριλαμβάνοντας το συνολικό πλήθος των διαγραμμάτων Feynman. Με fitting ενός εκθετικού (δηλ. $G(\tau, \vec{k}) \sim Z(\vec{k}) \exp\{-E(\vec{k})\tau\}$), σε όσο το δυνατόν μεγαλύτερους χρόνους, υπολογίζουμε την ελάχιστη ενέργεια του οιονεί σωματιδίου. Στα σχήμα 9.5α' και 9.5β' παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για το ενεργειακό φάσμα του οιονεί σωματιδίου για $\lambda = 0.40$

και $\lambda = 0.45$ αντίστοιχα. Στα σχήματα σχεδιάζονται και το αντίστοιχο αποτέλεσμα της NCA. Έχουμε πάλι το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου και για αυτό χρειάστηκε να υπολογίσουμε την θετική συνεισφορά στη $G(\tau)$, την $G_p(\tau)$ και αντίστοιχα την αρνητική συνεισφορά $G_n(\tau)$ όπως περιγράφονται στο προηγούμενο κεφάλαιο.



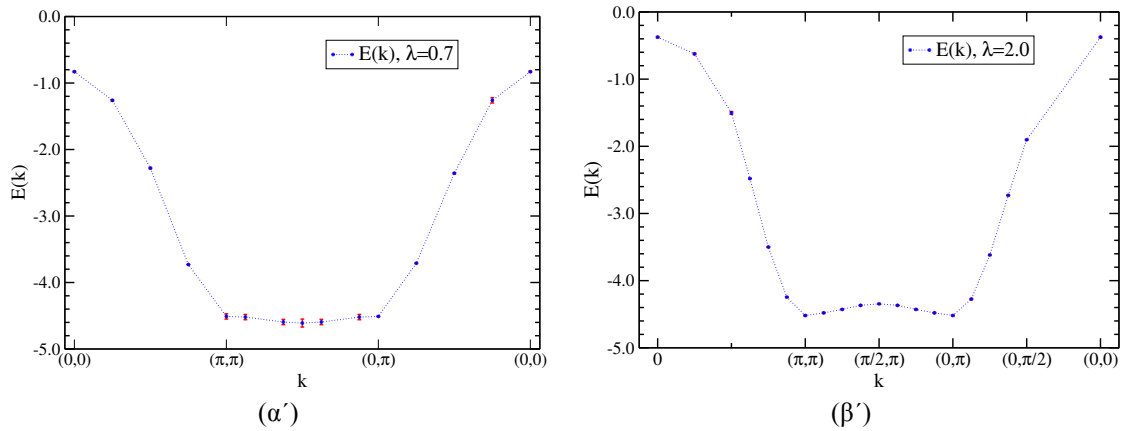
Σχήμα 9.6: Για $J_1 = 0.3$ και $\lambda = 0.4$ η μορφή των $G_p(\tau)$, $G_n(\tau)$, $G(\tau)$ και $G_{nca}(\tau)$: (α') για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και (β') για $\vec{k} = (\pi, 0)$.

Επίσης υπολογίσαμε, για $\lambda = 0.40$ και αντίστοιχα για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και $\vec{k} = (\pi, 0)$ με εφαρμογή της FHDC, την συνάρτηση Green φανταστικού χρόνου $G_{nca}(\tau)$ που προκύπτει με την NCA, δηλ. με τον περιορισμό στο χώρο των μή τεμνόμενων διαγραμμμάτων, για άπειρο πλέγμα. Στο σχήμα 9.6α' και 9.6β' σχεδιάζουμε τις συναρτήσεις $G_p(\tau)$, $G_n(\tau)$, $G(\tau)$ και $G_{nca}(\tau)$, από όπου προκύπτουν άμεσα συμπεράσματα για το βαθμού ακρίβειας της προσέγγισης NCA.

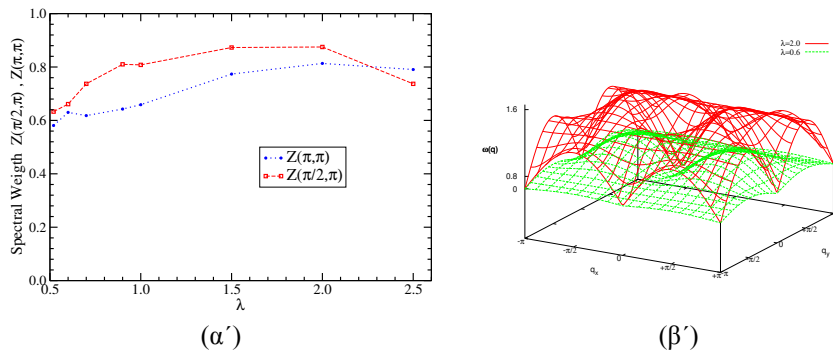
9.2.2 Columnar Τάξη

Όμοια όπως με την περίπτωση της Néel τάξης, υπολογίσαμε με τη βοήθεια της FHDMC την συνάρτηση Green φανταστικού για διάφορες τιμές του \vec{k} , συμπεριλαμβάνοντας το συνολικό πλήθος των διαγραμμμάτων Feynman. Πάλι με fitting ενός εκθετικού (δηλ. $G(\tau, \vec{k}) \sim Z(\vec{k}) \exp\{-E(\vec{k})\tau\}$), σε όσο το δυνατόν μεγαλύτερους χρόνους, υπολογίζουμε την ελάχιστη ενέργεια του οιονεί σωματιδίου.

Στα σχήμα 9.7α' και 9.7β' παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για το ενεργειακό φάσμα του οιονεί σωματιδίου για $\lambda = 0.7$ και $\lambda = 2.0$ αντίστοιχα. Και στην περίπτωση αυτή, επειδή εμφανίζεται το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου εφαρμόζουμε την FHDMC όπως πριν, υπολογίζοντας την θετική και την αρνητική συνεισφορά στη $G(\tau)$.



Σχήμα 9.7: Η σχέση διασποράς για $J_1 = 0.4$: (α') για $\lambda = 0.7$ και (β') για $\lambda = 2.0$. Οι υπολογισμοί συμπεριλαμβάνουν όλα τα διαγράμματα Feynman.



Σχήμα 9.8: Μεταβολή σε συνάρτηση με το λ : (α') του φασματικού βάρους $Z(\pi, \pi)$ και $Z(\pi/2, \pi)$ (β') της σχέσης διασποράς του μαγνονίου για τις τιμές $\lambda = 0.6$ και $\lambda = 2.0$.

Η εξάρτηση του φασματικού βάρους $Z(\pi, \pi)$ και $Z(\pi/2, \pi)$ από τον λόγο των σταθερών ανταλλαγής λ αποτυπώνεται στο σχήμα 9.8α'. Οι τιμές του $Z(0, 0)$ είναι της τάξεως του $\sim 10^{-3}$ με συνέπεια οι αντίστοιχες τιμές της ενέργειας του οιονεί σωματιδίου που προσδιορίστηκαν κοντά σε αυτή την περιοχή του \vec{k} , να έχουν μεγαλύτερο σφάλμα σε σχέση με τις υπόλοιπες τιμές \vec{k} . Επίσης στο σχήμα 9.8β' παρατηρούμε ότι σε αντίθεση με ό,τι συμβαίνει στην Néel τάξη, το εύρος της ζώνης του μαγνονίου αυξάνεται με την αύξηση του λόγου λ οπότε με τους ίδιους συλλογισμούς που αναπτύχθηκαν πριν συμπεραίνουμε την αύξηση του φασματικού βάρους $Z(\vec{k})$ η οποία παρατηρείται στο σχήμα 9.8α'.

9.3 Συμπεράσματα

9.3.1 Néel Τάξη.

Για την περίπτωση της Néel τάξης παρατηρούμε ότι η σχέση διασποράς του οιονεί σωματιδίου έχει την ίδια μορφή με αυτή του αντισιδηρομαγνητικό δισδιάστατου πλέγματος με αλληλεπίδραση μεταξύ μόνο πρώτων γειτόνων. Η ελάχιστη ενέργεια παρατηρείται για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ και η μέγιστη για $\vec{k} = (0, 0)$ και $\vec{k} = (\pi, \pi)$. Επίσης με την αύξηση του λόγου $\lambda = J_2/J_1$, το εύρος της ζώνης διασποράς του μαγνονίου μειώνεται ακολουθούμενο από μείωση του εύρους της ζώνης διασποράς του οιονεί σωματιδίου και του φασματικού βάρους $Z(\vec{k})$. Πλησιάζοντας προς το λ την τιμή 0.5 η πτώση της τιμής του $Z(\vec{k})$ γίνεται απότομη. Τα αποτελέσματα με την FHDMC, όπου συμπεριλαμβάνεται στους υπολογισμούς το σύνολο των διαγραμμμάτων Feynman, για τη σχέση διασποράς του οιονεί σωματιδίου συγκλίνουν με αυτά της NCA.

9.3.2 Columnar Τάξη

Για την columnar τάξη παρατηρούμε ότι το ελάχιστο της ενέργειας του οιονεί σωματιδίου για την τιμή $\lambda = 0.7$ είναι στο $\vec{k} = (\pi/2, \pi)$, ενώ για την τιμή $\lambda = 2.0$ στο $\vec{k} = (\pi, \pi)$ και $\vec{k} = (0, \pi)$. Το μέγιστο κάθε φορά παρατηρείται στο $\vec{k} = (0, 0)$. Επίσης με την αύξηση του λόγου $\lambda = J_2/J_1$, το εύρος της ζώνης διασποράς του μαγνονίου αυξάνεται ακολουθούμενο από αύξηση του εύρους της ζώνης διασποράς του οιονεί σωματιδίου και του φασματικού βάρους $Z(\vec{k})$. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα με αυτά της NCA [71] η μορφή της σχέσης διασποράς είναι ίδια για τις χαμηλές τιμές της ενέργειας, όπου τα ελάχιστα παρουσιάζονται για τα ίδια \vec{k} . Όμως για τις μεγάλες τιμές της ενέργειας υπάρχει διαφοροποίηση και ως προς τη θέση του μεγίστου, το οποίο παρατηρείται για $\vec{k} = (0, 0)$ αντί για $\vec{k} = (\pi/2, \pi/2)$ της NCA.



10 Συμπεράσματα-Προοπτικές

Η μέθοδος διαγραμματική Monte Carlo (DMC) είναι μια μέθοδος κβαντικού Monte Carlo όπου ο δειγματικός χώρος είναι τα διαγράμματα Feynman μιας πλήρους σειράς αθροίσματος από αυτά. Συνδυάζοντας την παραπάνω μέθοδο με τις τεχνικές Επίπεδου Ιστογράμματος (flat histogram) δημιουργήσαμε την μέθοδο Επίπεδου Ιστογράμματος Διαγραμματική Monte Carlo (FHDMC). Κατά τον υπολογισμό του ιστογράμματος της συνάρτησης Green φανταστικού χρόνου $G(\tau)$ με την διαγραμματική Monte Carlo, έχουμε διάδοση του στατιστικού λάθους της πρώτης τιμής του ιστογράμματος, η οποία είναι πολύ μεγάλη, σε όλο το ιστόγραμμα. Με την FHDMC το λάθος αυτό περιορίζεται δραστικά καθιστώντας τα αποτελέσματα του ιστογράμματος εξαιρετικά ποιοτικότερα. Οι μέχρι τώρα μέθοδοι DMC (standard-DMC) για την θεραπεία του συγκεκριμένου προβλήματος χρησιμοποιούν οδηγήτριες συναρτήσεις. Οι οδηγήτριες συναρτήσεις απαιτούν μια a priori γνώση της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς της $G(\tau)$, η οποία σε σύνθετα προβλήματα είναι αρκετά δύσκολο έως αδύνατον να προσδιορισθεί σωστά. Αντίθετα η FHDMC εφαρμόζεται κατευθείαν χωρίς την ανάγκη οποιασδήποτε a priori γνώσης για την $G(\tau)$.

Το ιστόγραμμα της $G(\tau)$ που υπολογίζεται με εφαρμογή των μεθόδων κβαντικού Monte Carlo, είναι τα δεδομένα μιας μεθόδου αναλυτικής συνέχισης (αντιστροφής) η οποία δίνει ως αποτέλεσμα την φασματική συνάρτηση $A(\omega)$ του συστήματος. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα της αντιστροφής από δεδομένα για την $G(\tau)$ που προέκυψαν από εφαρμογή της FHDMC με αυτά από την DMC χωρίς οδηγήτρια συνάρτηση, παρατηρούμε ότι της FHDMC είναι εξαιρετικά καλύτερα, επειδή το σχετικό λάθος του ιστογράμματος της $G(\tau)$ είναι πολύ μικρότερο. Σε αντίστοιχη σύγκριση της FHDMC με την standard-DMC τα αποτελέσματα από την πρώτη φαίνεται να είναι καλύτερα και αυτό διότι το σχετικό λάθος του ιστογράμματος της standard-DMC

αυξάνεται εκθετικά με την αύξηση του χρόνου με συνέπεια την αναγωγή της πληροφορίας για μεγάλους χρόνους (χαμηλές ενέργειες). Από την άλλη μεριά το σχετικό λάθος της $G(\tau)$ για την FHDMC είναι ομοιόμορφο σε όλη την έκταση του τ . Συνεπώς τα αποτελέσματα από την FHDMC είναι στατιστικά καλύτερα και αυτό κατοπτρίζεται στα αποτελέσματα της αντιστροφής. Από τα αποτελέσματα που προκύπτουν με την αντιστροφή συμπεραίνουμε τα παρακάτω: Αν το default μοντέλο της μεθόδου είναι η σωστή λύση αυτό αναπαράγεται. Στην περίπτωση που το default μοντέλο περιέχει επιμέρους a priori γνώση τότε με την αντιστροφή αυτή αναδεικνύεται στον ακριβή βαθμό. Τέλος, αν το default μοντέλο δεν περιέχει καθόλου πληροφορία (επίπεδη κατανομή) τότε κατά κανόνα προκύπτουν τα δύο μέγιστα χαμηλότερης ενέργειας της πραγματικής φασματικής συνάρτησης του συστήματος. Γενικά, όσο πιο κοντά στη σωστή μορφή της φασματικής συνάρτησης είναι το default μοντέλο, τόσο ακριβέστερα αναδεικνύεται αυτό.

Σε περίπτωση που στον υπολογισμό της $G(\tau)$ υπάρχει το πρόβλημα του φερμιονικού πρόσημου (the Fermion-sign problem), τότε η FHDMC έχει την ικανότητα να υπολογίσει την $G(\tau)$ για μεγαλύτερους χρόνους από ότι οι άλλες μέθοδοι κβαντικού Monte Carlo με πάλι σχεδόν ομοιόμορφο σχετικό σφάλμα για όλη την έκταση του φανταστικού χρόνου τ . Αυτό διαπιστώνεται από την εφαρμογή της FHDMC για τον υπολογισμό της $G(\tau)$ του μοντέλου $t - J$ στη γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin, λαμβάνοντας υπόψη όλα τα διαγράμματα Feynman της σειράς. Με την αντιστροφή στην περίπτωση αυτή παράγεται η σωστή μορφή της φασματικής συνάρτησης όταν το default μοντέλο είναι η αντίστοιχη λύση της non-crossing approximation (NCA). Επίσης το απλό fitting με ένα εκθετικό σε μεγάλους χρόνους έχει συστηματικό λάθος λόγω του μη αρκετά μεγάλου χρόνου ώστε να προσεγγίζει την ασυμπτωτική της συμπεριφορά η $G(\tau)$.

Από τα αποτελέσματα που προκύπτουν για την $G(\tau)$ από την εφαρμογή της FHDMC στο μοντέλο $t - J_1 - J_2$ στη γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin, με fitting ενός εκθετικού σε μεγάλες τιμές του φανταστικού χρόνου προσδιορίστηκαν η ελάχιστη ενέργεια και το αντίστοιχο φασματικό βάρος του οιονεί σωματιδίου για διάφορες τιμές του \vec{k} . Διαπιστώθηκε ότι για την Néel τάξη τα αποτελέσματα συγκλίνουν με αυτά της NCA. Αντίστοιχη σύγκριση για την columnar τάξη έδειξε ότι η μορφή της σχέσης διασποράς για τα οιονεί σωματίδια για τις χαμηλές τιμές της ενέργειας είναι ίδια με αυτή που προκύπτει από την NCA, όμως τα αποτελέσματα είναι διαφορετικά για τις θέσεις της χαμηλής ενέργειας και το εύρος της σχέσης διασποράς.

Γενικά μπορούμε να πούμε ότι η FHDMC μπορεί να εφαρμοστεί σε όλες τις περιπτώσεις που εφαρμόζεται η DMC αποτελώντας ένα ισχυρό και εύχρηστο εργαλείο για τους υπολογισμούς των αντίστοιχων συναρτήσεων συσχέτισης όπως η $G(\tau)$. Δίνει την δυνατότητα μελέτης της κίνησης μιας οπής, χωρίς προσεγγίσεις, για διάφορες παραλλαγές του $t - J$ μοντέλου στην γραμμική προσέγγιση των κυμάτων spin .



Βιβλιογραφία

- [1] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands”, in Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, Vol. 276, 1365 (The Royal Society, 1963), pp. 238–257.
- [2] K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, “Kinetic exchange interaction in a narrow S-band”, [Journal of Physics C: Solid State Physics](#) **10**, L271 (1977).
- [3] C. Gros, R. Joynt, and T. M. Rice, “Antiferromagnetic correlations in almost-localized Fermi liquids”, [Phys. Rev. B](#) **36**, 381–393 (1987).
- [4] A. B. Harris and R. V. Lange, “Single-Particle Excitations in Narrow Energy Bands”, [Phys. Rev.](#) **157**, 295–314 (1967).
- [5] C. L. Kane, P. A. Lee, and N. Read, “Motion of a single hole in a quantum antiferromagnet”, [Phys. Rev. B](#) **39**, 6880–6897 (1989).
- [6] B. Ammon, H. G. Evertz, N. Kawashima, M. Troyer, and B. Frischmuth, “Quantum Monte Carlo loop algorithm for the $t - J$ model”, [Phys. Rev. B](#) **58**, 4304–4319 (1998).
- [7] M. Boninsegni, “Monte Carlo study of the energy dispersion curve of a mobile hole in a quantum antiferromagnet”, [Physics Letters A](#) **188**, 330–336 (1994).
- [8] M. Brunner, F. F. Assaad, and A. Muramatsu, “Single-hole dynamics in the $t - J$ model on a square lattice”, [Phys. Rev. B](#) **62**, 15480–15492 (2000).
- [9] M. Brunner and A. Muramatsu, “Quantum Monte Carlo simulations of infinitely strongly correlated fermions”, [Phys. Rev. B](#) **58**, R10100–R10103 (1998).
- [10] E. Dagotto, “Correlated electrons in high-temperature superconductors”, [Rev. Mod. Phys.](#) **66**, 763–840 (1994).

- [11] R. Preuss, W. Hanke, and W. von der Linden, “Quasiparticle Dispersion of the 2D Hubbard Model: From an Insulator to a Metal”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1344–1347 (1995).
- [12] Z. Liu and E. Manousakis, “Dynamical properties of a hole in a Heisenberg antiferromagnet”, *Phys. Rev. B* **45**, 2425–2437 (1992).
- [13] N. Prokof’ev and B. Svistunov, “Fermi-polaron problem: Diagrammatic Monte Carlo method for divergent sign-alternating series”, *Phys. Rev. B* **77**, 020408 (2008).
- [14] N. V. Prokof’ev and B. V. Svistunov, “Polaron Problem by Diagrammatic Quantum Monte Carlo”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2514–2517 (1998).
- [15] B. A. Berg and T. Neuhaus, “Multicanonical algorithms for first order phase transitions”, *Physics Letters B* **267**, 249–253 (1991).
- [16] P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna, and H. J. Herrmann, “Broad Histogram Method”, *Brazilian Journal of Physics* **26**, 677 (1996).
- [17] F. Wang and D. P. Landau, “Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050–2053 (2001).
- [18] K. S. D. Beach, “Identifying the maximum entropy method as a special limit of stochastic analytic continuation”, eprint arXiv:cond-mat/0403055 (2004).
- [19] S. Fuchs, T. Pruschke, and M. Jarrell, “Analytic continuation of quantum Monte Carlo data by stochastic analytical inference”, *Phys. Rev. E* **81**, 056701 (2010).
- [20] M. Jarrell and J. E. Gubernatis, “Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data”, *Physics Reports* **269**, 133–195 (1996).
- [21] E. N. Economou, *Green’s Functions in Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
- [22] A. Fetter and J. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Physics* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [23] G. D. Mahan, *Many-particle physics* (Springer Science & Business Media, 2000).
- [24] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in Many-Body Physics* (McGraw-Hill, New York, 1976).
- [25] J. W. Negele and H. Orland, *Quantum many-particle systems* (Addison-Wesley, 1988).
- [26] W. E. Parry, *Many-body problem* (Oxford UP, Oxford, 1973).
- [27] G. Rickayzen, *Green’s Functions and Condensed Matter* (Academic Press, London, 1980).
- [28] A. W. Sandvik, “Stochastic method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data”, *Phys. Rev. B* **57**, 10287–10290 (1998).

- [29] O. F. Syljuåsen, “Using the average spectrum method to extract dynamics from quantum Monte Carlo simulations”, *Phys. Rev. B* **78**, 174429 (2008).
- [30] Y. A. Izyumov, “Hubbard model of strong correlations”, *Physics-Uspekhi* **38**, 385 (1995).
- [31] P. W. Anderson, “New Approach to the Theory of Superexchange Interactions”, *Phys. Rev.* **115**, 2–13 (1959).
- [32] P. W. Anderson, “The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity”, *science* **235**, 1196–1198 (1987).
- [33] X. H. Chen, T. Wu, G. Wu, R. H. Liu, H. Chen, and D. F. Fang, “Superconductivity at 43 K in $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ ”, *Nature* **453**, 761–762 (2008).
- [34] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, “Iron-Based Layered Superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05 - 0.12$) with $T_c = 26$ K”, *Journal of the American Chemical Society* **130**, 3296–3297 (2008).
- [35] Z. A. Ren, J. Yang, W. Lu, W. Yi, G. C. Che, X. L. Dong, L. L. Sun, and Z. X. Zhao, “Superconductivity at 52 K in iron based F doped layered quaternary compound $\text{Pr}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ”, *Materials Research Innovations* **12**, 105–106 (2008).
- [36] Z.-A. Ren, W. Lu, J. Yang, W. Yi, X.-L. Shen, Zheng-Cai, G.-C. Che, X.-L. Dong, L.-L. Sun, F. Zhou, and Z.-X. Zhao, “Superconductivity at 55 K in Iron-Based F-Doped Layered Quaternary Compound $\text{Sm}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ”, *Chinese Physics Letters* **25**, 2215 (2008).
- [37] L. Shan, Y. Wang, X. Zhu, G. Mu, L. Fang, C. Ren, and H.-H. Wen, “Point-contact spectroscopy of iron-based layered superconductor $\text{LaO}_{0.9}\text{F}_{0.1-\delta}\text{FeAs}$ ”, *EPL (Europhysics Letters)* **83**, 57004 (2008).
- [38] H.-H. Wen, G. Mu, L. Fang, H. Yang, and X. Zhu, “Superconductivity at 25 K in hole-doped $(\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{OFeAs}$ ”, *EPL (Europhysics Letters)* **82**, 17009 (2008).
- [39] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism* (Springer Science & Business Media, 1994).
- [40] M. G. Cottam and D. J. Lockwood, *Light scattering in magnetic solids* (Wiley New York (NY) et al., 1986).
- [41] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism, Vol. II: Thermodynamics and statistical mechanics*, Vol. 55 (Springer, 1985).
- [42] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism, Vol. I* (1981).
- [43] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism: Magnetic Properties of Materials*, 3rd ed. (Springer-Verlag, 2007).

- [44] N. Prokof'ev and B. Svistunov, "Bold Diagrammatic Monte Carlo Technique: When the Sign Problem Is Welcome", *Phys. Rev. Lett.* **99**, 250201 (2007).
- [45] E. Burovski, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer, "Critical Temperature and Thermodynamics of Attractive Fermions at Unitarity", *Phys. Rev. Lett.* **96**, 160402 (2006).
- [46] K.-Y. Yang, E. Kozik, X. Wang, and M. Troyer, "Diagrammatic quantum Monte Carlo solution of the two-dimensional cooperon-fermion model", *Phys. Rev. B* **83**, 214516 (2011).
- [47] E. Kozik, K. Van Houcke, E. Gull, L. Pollet, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer, "Diagrammatic Monte Carlo for correlated fermions", *EPL (Europhysics Letters)* **90**, 10004 (2010).
- [48] L. Pollet, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, "Incorporating dynamic mean-field theory into diagrammatic Monte Carlo", *Phys. Rev. B* **83**, 161103 (2011).
- [49] K. Van Houcke, F. Werner, E. Kozik, N. Prokof'ev, B. Svistunov, M. J. H. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk, A. Schirotzek, and M. W. Zwierlein, "Feynman diagrams versus Fermi-gas Feynman emulator", *Nat Phys* **8**, 366–370 (2012).
- [50] E. A. Burovski, A. S. Mishchenko, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, "Diagrammatic Quantum Monte Carlo for Two-Body Problems: Applied to Excitons", *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186402 (2001).
- [51] S. A. Kulagin, N. Prokof'ev, O. A. Starykh, B. Svistunov, and C. N. Varney, "Bold Diagrammatic Monte Carlo Method Applied to Fermionized Frustrated Spins", *Phys. Rev. Lett.* **110**, 070601 (2013).
- [52] M. Troyer, S. Wessel, and F. Alet, "Flat Histogram Methods for Quantum Systems: Algorithms to Overcome Tunneling Problems and Calculate the Free Energy", *Phys. Rev. Lett.* **90**, 120201 (2003).
- [53] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, "Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models", *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349–404 (2011).
- [54] R. P. Feynman, "Slow electrons in a polar crystal", *Physical Review* **97**, 660 (1955).
- [55] H. Fröhlich, H. Pelzer, and S. Zienau, "XX. Properties of slow electrons in polar materials", *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **41**, 221–242 (1950).
- [56] D. M. Ceperley, "Path integrals in the theory of condensed helium", *Rev. Mod. Phys.* **67**, 279–355 (1995).

- [57] F. Wang and D. P. Landau, “Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram”, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
- [58] Z. Liu and E. Manousakis, “Spectral function of a hole in the $t - J$ model”, *Phys. Rev. B* **44**, 2414–2417 (1991).
- [59] V. Cataudella, G. De Filippis, A. S. Mishchenko, and N. Nagaosa, “Temperature Dependence of the Angle Resolved Photoemission Spectra in the Undoped Cuprates: Self-Consistent Approach to the $t - J$ Holstein Model”, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 226402 (2007).
- [60] A. S. Mishchenko and N. Nagaosa, “Numerical study of the isotope effect in underdoped high-temperature superconductors: Calculation of the angle-resolved photoemission spectra”, *Phys. Rev. B* **73**, 092502 (2006).
- [61] A. S. Mishchenko and N. Nagaosa, “Electron-Phonon Coupling and a Polaron in the $t - J$ Model: From the Weak to the Strong Coupling Regime”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036402 (2004).
- [62] A. S. Mishchenko, N. V. Prokof’ev, and B. V. Svistunov, “Single-hole spectral function and spin-charge separation in the $t - J$ model”, *Phys. Rev. B* **64**, 033101 (2001).
- [63] E. Manousakis, “The spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides”, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1–62 (1991).
- [64] W. F. Brinkman and T. M. Rice, “Single-Particle Excitations in Magnetic Insulators”, *Phys. Rev. B* **2**, 1324–1338 (1970).
- [65] E. Dagotto and J. Riera, “Indications of $d_x^2 - y^2$ superconductivity in the two dimensional $t - J$ model”, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 682–685 (1993).
- [66] S. A. Trugman, “Spectral function of a hole in a Hubbard antiferromagnet”, *Phys. Rev. B* **41**, 892–895 (1990).
- [67] E. Manousakis, “String excitations of a hole in a quantum antiferromagnet and photoelectron spectroscopy”, *Phys. Rev. B* **75**, 035106 (2007).
- [68] A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, “Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473–541 (2003).
- [69] J. Graf, G.-H. Gweon, K. McElroy, S. Y. Zhou, C. Jozwiak, E. Rotenberg, A. Bill, T. Sasagawa, H. Eisaki, S. Uchida, H. Takagi, D.-H. Lee, and A. Lanzara, “Universal High Energy Anomaly in the Angle-Resolved Photoemission Spectra of High Temperature Superconductors: Possible Evidence of Spinon and Holon Branches”, *Physical Review Letters* **98**, 067004, 067004 (2007).

- [70] F. Ronning, K. M. Shen, N. P. Armitage, A. Damascelli, D. H. Lu, Z.-X. Shen, L. L. Miller, and C. Kim, “Anomalous high-energy dispersion in angle-resolved photoemission spectra from the insulating cuprate $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ ”, *Phys. Rev. B* **71**, 094518 (2005).
- [71] I. J. Hamad, A. E. Trumper, A. E. Feiguin, and L. O. Manuel, “Spin polaron in the $J_1 - J_2$ Heisenberg model”, *Phys. Rev. B* **77**, 014410 (2008).
- [72] L. Capriotti and S. Sorella, “Spontaneous Plaquette Dimerization in the $J_1 - J_2$ Heisenberg Model”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3173–3176 (2000).
- [73] P. Chandra and B. Doucot, “Possible spin-liquid state at large S for the frustrated square Heisenberg lattice”, *Phys. Rev. B* **38**, 9335–9338 (1988).
- [74] H. Schulz, T. Ziman, and D. Poilblanc, “Magnetic order and disorder in the frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet in two dimensions”, *Journal de Physique I* **6**, 675–703 (1996).
- [75] S. Sorella, “Green Function Monte Carlo with Stochastic Reconfiguration”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4558–4561 (1998).
- [76] A. E. Trumper, L. O. Manuel, C. J. Gazza, and H. A. Ceccatto, “Schwinger-Boson Approach to Quantum Spin Systems: Gaussian Fluctuations in the “Natural” Gauge”, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2216–2219 (1997).
- [77] L. Capriotti, F. Becca, A. Parola, and S. Sorella, “Suppression of dimer correlations in the two-dimensional $J_1 - J_2$ Heisenberg model: An exact diagonalization study”, *Phys. Rev. B* **67**, 212402 (2003).
- [78] V. N. Kotov, J. Oitmaa, O. Sushkov, and Z. Weihong, “Spontaneous dimer order, excitation spectrum and quantum-phase transitions in the $J_1 - J_2$ Heisenberg model”, *Philosophical Magazine Part B* **80**, 1483–1498 (2000).
- [79] H. J. Schulz and T. A. L. Ziman, “Finite-Size Scaling for the Two-Dimensional Frustrated Quantum Heisenberg Antiferromagnet”, *EPL (Europhysics Letters)* **18**, 355 (1992).
- [80] G. F. Reiter, “Self-consistent wave function for magnetic polarons in the $t - J$ model”, *Phys. Rev. B* **49**, 1536–1539 (1994).
- [81] M. Takahashi, “Modified spin-wave theory of a square-lattice antiferromagnet”, *Phys. Rev. B* **40**, 2494–2501 (1989).
- [82] M. Takahashi, “Few-dimensional Heisenberg ferromagnets at low temperature”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 168–170 (1987).
- [83] J. H. Xu and C. S. Ting, “Phase diagram of the frustrated square Heisenberg lattice based upon a modified spin-wave theory”, *Phys. Rev. B* **42**, 6861–6864 (1990).

-
- [84] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction* (Oxford University Press, 2004).
- [85] N. Bulut, D. J. Scalapino, and S. R. White, “Electronic Properties of the Insulating Half-Filled Hubbard Model”, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 748–751 (1994).
- [86] P. Chandra, P. Coleman, and A. I. Larkin, “Ising transition in frustrated Heisenberg models”, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 88–91 (1990).
- [87] N. G. Diamantis and E. Manousakis, “Flat histogram diagrammatic Monte Carlo method: Calculation of the Green’s function in imaginary time”, *Phys. Rev. E* **88**, 043302 (2013).
- [88] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, and H. Hosono, “Iron-based layered superconductor: LaOFeP”, *Journal of the American Chemical Society* **128**, 10012–10013 (2006).
- [89] D. I. Khomskii, *Basic aspects of the quantum theory of solids: order and elementary excitations* (Cambridge University Press, 2010).
- [90] W. von der Linden, “A quantum Monte Carlo approach to many-body physics”, *Physics Reports* **220**, 53–162 (1992).
- [91] A. S. Mishchenko, N. V. Prokof’ev, A. Sakamoto, and B. V. Svistunov, “Diagrammatic quantum Monte Carlo study of the Fröhlich polaron”, *Phys. Rev. B* **62**, 6317–6336 (2000).
- [92] J. Villain, “Spin glass with non-random interactions”, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **10**, 1717 (1977).