

УДК 538.9

РАЗВИТИЕ СПОСОБА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ ГРАФЕНА МЕТОДОМ ГИБРИДНОГО МОНТЕ-КАРЛО

© 2023 г. С. Д. Мостовой^{a, b, *}, О. В. Павловский^{a, b, **}^aМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия^bНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123182 Россия

*E-mail: sd.mostovoy@physics.msu.ru

**E-mail: pavlovsky@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 12.12.2022 г.

После доработки 18.12.2022 г.

Принята к публикации 23.01.2023 г.

В данной работе исследуются способы улучшения решеточной реализации расширенной модели Хаббарда с целью вычисления квантово-механических операторов повышенной сложности. Стандартный способ не позволяет исключить все расходимости в наблюдаемой, что мешает получению устойчивого распределения по конфигурациям в методе Монте-Карло. На конкретных вычислениях демонстрируется положительный эффект от применения двух подходов: введения дополнительных полей Хаббарда и подбора параметризации преобразования Хаббарда–Стратоновича.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, модель Хаббарда, графен, теплоемкость

DOI: 10.56304/S2079562922050608

1. ВВЕДЕНИЕ

Расширенная модель Хаббарда [1] хорошо известна в связи с задачами определения коллективных свойств релятивистских электронов в графене в режиме сильной связи. Типичным направлением исследования являются различные рассмотрения фаз модели и фазовых переходов между ними. Кроме того, можно показать, что кинетическое слагаемое приводит к дисперсионному соотношению, характерному для релятивистских электронов, что также представляет интерес для изучения. К сожалению, возможности аналитических вычислений с учетом электростатического потенциала сильно ограничены, что вызывает необходимость разработки численных методов расчета наблюдаемых и корреляторов. Общепризнанный подход состоит в решеточной аппроксимации статистической суммы, которая может быть выполнена различными способами, отличающимися как технической сложностью, так и ограничениями для применения в условиях реальных компьютерных вычислений. Отдельным вопросом стоит реализация эффективных алгоритмов для моделирования фермионной системы методами МК.

Нужно заметить, что на текущий момент получение качественных результатов требует существенных вычислительных мощностей. С другой стороны, для наблюдаемых, реализуемых через произведение операторов рождения-уничтожения

в количестве не более 4, вложение ресурсов оправдано. Такой вывод делают, исходя из эффективности счета и автокорреляционных свойств получаемых статистических последовательностей. Однако можно показать, что наблюдаемые с более сложной операторной структурой уже не могут быть вычислены при помощи той же стратегии. Основной причиной является усиление степени расходимости в вычисляемых выражениях. В данной работе исследовались различные способы введения полей Хаббарда и разные виды преобразования Хаббарда–Стратоновича [2, 3] с целью получения наиболее статистически корректных результатов для наблюдаемых высокого порядка по операторам рождения-уничтожения (до 8 включительно).

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ

Рассматривается расширенная модель Хаббарда на гексагональной решетке с L узлами вдоль каждого направления с периодическими граничными условиями. Гамильтониан модели задается следующим образом:

$$\hat{H} = -\kappa \sum_{\langle x,y \rangle, \sigma} (\hat{a}_{x,\sigma}^\dagger \hat{a}_{y,\sigma} + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_{x,y} V_{xy} \hat{q}_x \hat{q}_y, \quad (1)$$

где κ — параметр хоппинга, $\langle x,y \rangle$ обозначает соседние узлы, σ — проекция спина (вверх или вниз),

$\hat{q}_x = \hat{a}_{x,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x,\uparrow} + \hat{a}_{x,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{x,\downarrow} - 1$ задает электрический за-

ряд, и $\hat{a}_{x,\sigma}$ представляет оператор уничтожения электрона со спином σ в узле x . V_{xy} обозначает матрицу электростатического взаимодействия электронов с двумя учтенными координационными радиусами (поэтому три параметра V_{00} , V_{01} , V_{02} описывают силу отталкивания двух электронов для разных расстояний между ними). Размерность данной матрицы составляет $N_s \times N_s$, где $N_s = 2L^2$. Как будет явно показано ниже, большое количество парных взаимодействий технически позволяет ввести дополнительные поля Хаббарда, что и является целью данной работы. Более того, оказывается, что дальнейшее взаимодействие стабилизирует экситонный конденсат при численном моделировании. Для большинства вычислений использованы параметры $\kappa = 2.8$, $V_{00} = 3.5$, $V_{01} = 0.8$ и $V_{02} = 0.18$ в единицах κ . Само вычисление выполняется методом квантового Гибридного Монте-Карло, технические основы которого подробно описаны в [1], а процедура дискретизации статсуммы на решетке подробно раскрыта в [2]. Общее число временных слоев достигает $2T$, потому что каждый из T временных слоев разбит на два сомножителя, отдельно для кинетической части гамильтониана и части с взаимодействием. Наша схема вычислений имеет лишь небольшие отличия от источников, упомянутых выше, и приводит к формулам:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\} = \int \mathcal{D}[\zeta, \zeta^*] \mathcal{D}[\phi, \chi] \exp\{-S_{HS} - \zeta^*(MM^\dagger)^{-1}\zeta\}, \quad (2)$$

$$S_{HS} = \frac{\delta^n}{2} \phi \tilde{V}^{-1} \phi + \frac{(\chi - (1 - \alpha)V_{00}\delta^{1-m})^2}{2(1 - \alpha)V_{00}} \delta^n, \quad (3)$$

$$\tilde{V}_{xy} = \alpha V_{00} \delta_{xy} + (1 - \delta_{xy})V_{xy}, \quad (4)$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -E_{T-1}^{(f)} \\ E_0^{(k)} & 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & E_0^{(f)} & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & E_1^{(k)} & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1^{(f)} & 1 & & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$E_t^{(k)} = -\exp\{\kappa\delta \sum_{\substack{x,y, \\ \langle a,b \rangle}} (\delta_{ax}\delta_{by} + \delta_{ay}\delta_{bx})\}, \quad (6)$$

$$E_t^{(f)} = -\text{diagexp}\{-\delta^m (i\phi_{xt} + \chi_{xt})\}, \quad (7)$$

где $E_t^{(f)}$ суть диагональные матрицы размером $N_s \times N_s$ с пространственными индексами x, y , $E_t^{(k)}$ — плотные матрицы $N_s \times N_s$, $\alpha = 0.95$ — пара-

метр смешивания двух (основных) полей Хаббарда ϕ_{xt} и χ_{xt} , $t = 0, T-1$ — параметр временного слоя (общее число временных слоев — в два раза больше). Для подтверждения вида выражения ((3)) следует использовать следующий вид преобразования Хаббарда—Стратоновича, дополнительно параметризованного числом n с целью перераспределения влияния величины δ в фермионной и потенциальной частях (связь двух чисел дается уравнением $2m - n = 1$):

$$\exp\left\{-\frac{1}{2}\hat{q}V\hat{q}\delta\right\} = \int \mathcal{D}[\phi] \exp\left\{-\frac{\delta^n}{2}\phi V^{-1}\phi - i\delta^m\phi\hat{q}\right\}. \quad (8)$$

Мы лишь немного отклонялись от дискретизации [3] в рамках допустимого математического произвола, например, в выборе знаков и транспонировании матрицы (5).

Принципиальное *нововведение* в рамках нашей работы заключается в *линковых* вспомогательных полях, дополняющих основные поля ϕ_{xt} и χ_{xt} , определенные на узлах. Предполагается, что эти дополнительные степени свободы многократно увеличивают размерность конфигурационного пространства, что, во-первых, упрощает работу алгоритма Монте-Карло по генерации последовательности конфигураций системы, а во-вторых, сокращает расходимость в наблюдаемых, состоящих из большого количества операторов рождения-уничтожения. Второе обстоятельство существенно, потому что каждая пара операторов, входящих в исходный вид наблюдаемых, приводит к одному сомножителю в виде пропагатора (элемент обратной фермионной матрицы), а сама фермионная матрица имеет нулевой определитель в частях конфигурационного пространства, играющих роль “границ” между областями, где смена конфигураций методом МК не осложнена. Указанные границы алгоритм не преодолевает, что ограничивает выборку конфигураций.

Покажем явно, как именно предлагается вводить в модель линковые поля. Для простоты продолаем это в отношении первого координационного радиуса с параметром взаимодействия V_{01} . Следует выделить полный квадрат для произведения операторов в несовпадающих точках (это возможно благодаря свойству коммутации $[\hat{q}_x, \hat{q}_y] = 0$):

$$\begin{aligned} & \frac{V_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{2} \sum_{x \neq y} \hat{q}_x \hat{q}_y + \frac{V_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \\ & + \frac{V_{01}}{4} \sum_{x \neq y} ((\hat{q}_x + \hat{q}_y)^2 - \hat{q}_x^2 - \hat{q}_y^2) = \end{aligned}$$

$$= \frac{V_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 - 3 \frac{V_{01}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{4} \sum_{x \neq y} (\hat{q}_x + \hat{q}_y)^2$$

$$= \frac{1}{2} \sum_x V'_{00} \hat{q}_x^2 + \frac{V_{01}}{4} \sum_{x \neq y} (\hat{q}_x + \hat{q}_y)^2,$$

где $V'_{00} = V_{00} - 3V_{01}$ свидетельствует о модификации узловой части. В рамках рассмотрения [2] узловое поле будет разделено на две составляющие Φ_{xt} и χ_{xt} следующим образом:

$$\alpha \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{q}_x^2 - (1 - \alpha) \frac{V'_{00}}{2} \sum_x \hat{s}_x^2 + (1 - \alpha) V'_{00} \sum_x \hat{s}_x,$$

где $\hat{s}_x = \hat{a}_{x,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x,\uparrow} - \hat{a}_{x,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{x,\downarrow} + 1$ представляет плотность спина. Само преобразование Хаббарда–Стратоновича для операторов $\hat{q}_x^2$ и $\hat{s}_x^2$ обсуждается в той же работе, поэтому мы опишем лишь преобразование линковой части:

$$\exp \left\{ -\delta \frac{V_{01}}{4} \sum_x (\hat{q}_x + \hat{q}_{x+\mu})^2 \right\} =$$

$$= \int \mathcal{D}[\xi^{(\mu)}] \exp \left\{ -\frac{\xi^{(\mu)2}}{V} \delta^n - i \delta^m \sum_x \xi_x^{(\mu)} (\hat{q}_x + \hat{q}_{x+\mu}) \right\},$$

где $\mu = 1, 2, 3$ и $\xi^{(\mu)}$ представляет собой вектор, составленный из $\xi_x^{(\mu)}$. Можно доказать, что поля ξ дают следующий вклад в фермионную матрицу:

$$E_t^{(1)} = -\text{diag} \times$$

$$\times \exp \left\{ -\delta^m \left(\chi_{xt} + i \left(\Phi_{xt} + \sum_{\mu} \xi_{xt}^{(\mu)} + \sum_{\mu} \xi_{x-\mu,t}^{(\mu)} \right) \right) \right\}, \quad (9)$$

где символ $x - \mu$ обозначает узел в направлении, противоположном направлению μ (т.е., $y = x - \mu$ означает, что $y + \mu$ есть x). Очевидно, что учет второго координационного радиуса изменяет величину взаимодействия следующим образом:

$V'_{00} = V_{00} - 3V_{01} - 6V_{02}$ и добавляет поля $\psi_{xt}^{(\mu)}$, $\mu = \overline{1, 6}$ в полном соответствии с (9).

Итак, мы продемонстрировали, как размерность конфигурационного пространства модели может быть увеличена до 5 или 11. В работе мы предпринимаем попытку сравнить результаты вычислений в двух данных ситуациях, а также подобрать такое значение параметра n , чтобы качество вычислений некоторой наблюдаемой (тепловой емкости) оказывалось наилучшим.

3. ПРОВЕРКА КОРРЕКТНОСТИ РАБОТЫ

Использование всего лишь двух полей в [2] для вычисления $\langle \hat{q}^2 \rangle$ оказывается возможным, потому что размерность пространства, равная 2 (имеет место для двух полей), достаточна для сокраще-

ния расходимостей в произведении четырех операторов рождения-уничтожения. Поскольку выражение для энергии (1) также содержит не более четырех операторов, становится понятно, что $\mathcal{E} = \langle \hat{H} \rangle$ может рассматриваться как “хорошая” наблюдаемая и использована для проверки корректности введения линковых полей $\xi_{xt}^{(\mu)}$ и $\psi_{xt}^{(\mu)}$. Вычисления при низких температурах затруднены в силу длинной термализации и долгих автокорреляций. Впрочем, можно предположить, что введение дополнительных полей добавляет степени свободы системе, что благоприятно скажется на смене конфигураций, сделав их более хаотическими и независимыми друг от друга. Ниже будет показано, что это действительно происходит.

Само кодирование приведенных выше выражений вызвало определенные трудности. Прежде всего, нужно было определиться с математической методикой обработки матриц. Для этой цели был выбран пакет Eigen [4]. В программе был реализован собственный солвер для решения СЛАУ с фермионной матрицей частного вида (5). Наконец, пересчет значений полей в методе молекулярной динамики был реализован вручную линейным обходом по элементам массива в силу соответствующей структуры выражений действия и производных от него. Разумеется, первым шагом следовало убедиться в работоспособности написанного программного кода, что было осуществлено стандартным методом — построением зависимости ошибки дискретизации гамильтониана (1) от числа шагов молекулярной динамики (см. рис. 1). Для этой цели проводится серия запусков при возрастающих значениях числа шагов N_τ при фиксированном $\tau = N_\tau \Delta t$. Цель — добиться оценки сохранения гамильтониана в непрерывном пределе. График имеет вид, свидетельствующий в пользу правильного решения уравнений эволюции МК.

Значения изменяющихся полей при последовательной генерации конфигураций можно увидеть на рис. 2. Следует отметить, что время достижения области стабилизации значений полей и величины действия (2) существенно уменьшается при переходе от 2 полей к 5 и от 5 к 11. Таким образом, по всей видимости, технический выигрыш в самой термализации достигается за счет уменьшения числа шагов, необходимых для получения “типичных” значений полей при заданных параметрах модели. Еще одним фактором служит распределение флуктуаций между полями одного типа (согласно их математическому введению).

Следующим, уже более физическим, тестом является прямое вычисление средней энергии равновесного электронного состояния путем усреднения гамильтониана (1). Результаты приведены на рис. 3. Можно видеть, что различные независимые вычисления в точности воспроизводят

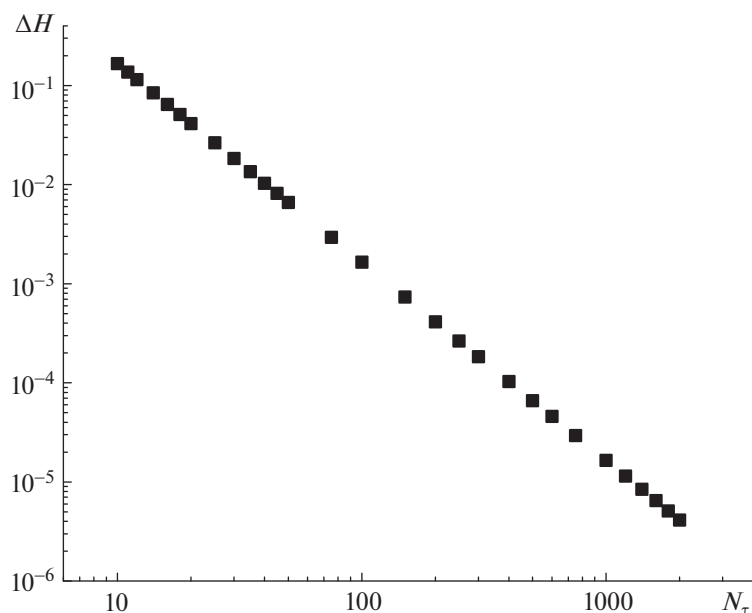


Рис. 1. График зависимости изменения гамильтониана $\Delta H = H_f - H_i$ при решении молекулярной динамики в N_τ шагов от числа шагов в дважды логарифмическом масштабе. Поскольку по своей идее молекулярная динамика описывает эволюцию консервативной системы, отклонение разности от нуля свидетельствует об ошибке дискретизации, которая, как видно из графика, падает с уменьшением “элементарного” шага интегрирования.

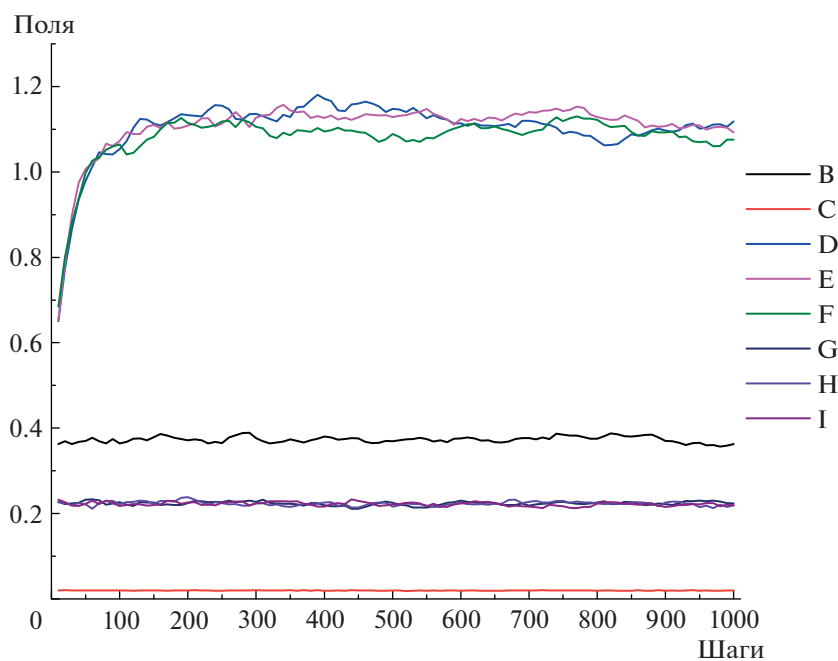


Рис. 2. Термализационный процесс для 11 полей при $\beta = (0.2\kappa)^{-1}$.

друг друга, что, впрочем, не является удивительным в силу сказанного выше о достаточности двух полей для обработки наблюдаемой с произведением четырех операторов. Данный график является подтверждением адекватной работы написанной программы.

4. ВЫЧИСЛЕНИЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ

Актуальной наблюдаемой с точки зрения поиска новых методов и способов углубленных вычислений в фермионных системах методом Гибридного МК является теплоемкость. Следует сказать, что исследователь, как правило, имеет какие-

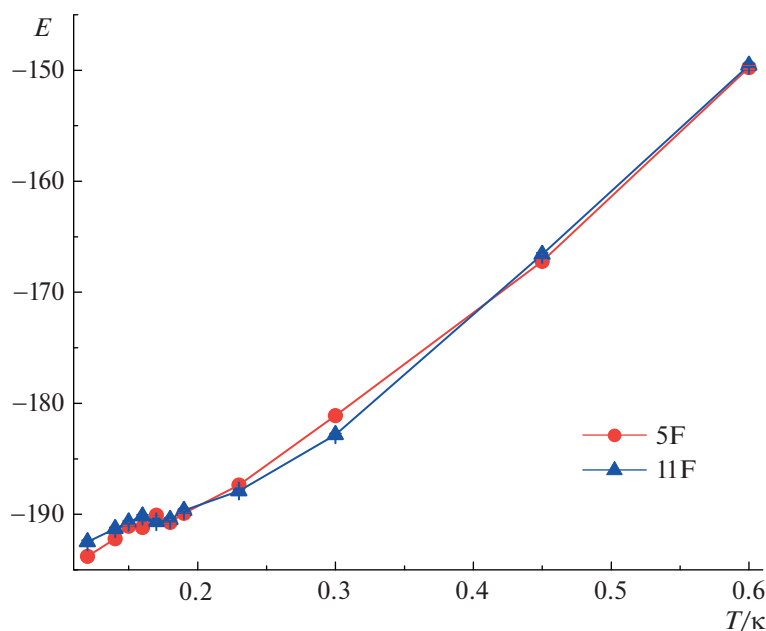


Рис. 3. Сравнение результатов вычисления температурной зависимости $\langle \hat{H} \rangle$ в пространствах с разной размерностью. Здесь $T = \beta^{-1}$.

то априорные ожидания от поведения данной величины. Например, высокотемпературный предел теплоемкости классической системы хорошо известен, поскольку следует из теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы. В пределе сверхнизких температур теплоемкость, вообще говоря, стремится к нулю, оставаясь положительной величиной, что также позволяет строить определенные предположения о предпочтительном виде результата. С технической точки зрения данная величина представляет интерес в силу повышенных требований к качеству вычислений т.н. дисперсионным способом:

$$C = \beta^2 (\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2). \quad (10)$$

Легко видеть, что среди большого числа слагаемых в выражении для квадрата гамильтониана максимальное число перемножаемых операторов составляет 8. В целях компенсации расходимостей, возникающих из произведения столь большого числа пропагаторов, предлагается вводить дополнительные поля. Кроме того, система компьютерной алгебры позволяет получить явный вид из 168 слагаемых в виде комбинаций обратных элементов фермионной матрицы. Сложение такого числа сильно флуктуирующих чисел конечной точности также многократно затрудняет получение достоверного ответа. Для борьбы с этим ограничением предлагается так подобрать число n в преобразовании Хаббарда–Стратоновича, чтобы характерные величины полей меньше сказывались на погрешности вычислений.

Рассмотрим результаты, полученные для 5 полей (см. рис. 4). Следует признать, что при уменьшении температуры погрешность вычислений существенно возрастает, что, как показало дополнительное исследование, связано с наличием потенциальных барьеров в конфигурационном пространстве, которые процесс МК вынужден преодолевать для качественного выбора подмножества конфигураций, на которых будут вычислены наблюдаемые. Величина этих барьеров растет при низких температурах, а сами “долины” становятся все более извилистыми. Следовательно, процесс начинает застревать в метастабильных состояниях, искажающих истинную связь между средними в разности (10). Это выражается в заниженных значениях теплоемкости, вычисленные значения которой могут даже становиться меньше нуля. Изменение конфигураций в результате шага молекулярной динамики, как показывает анализ, зависит от характерной амплитуды полей Хаббарда, что может быть проконтролировано путем задания разумного значения n . Выражение (8) показывает, что комбинация n и m перераспределяет относительные вклады в действие от потенциального и фермионного слагаемых, что определяет равновесные значения полей. Приведенный рисунок вполне иллюстрирует практический эффект от подбора параметризации преобразования: уменьшение n от -1 до -4 позволяет получать все лучшие значения теплоемкости для проблемного диапазона температур β^{-1} от 0.15 К до 0.3 К . Кривые $n = -3$ и $n = -4$ приближаются к ожидаемой

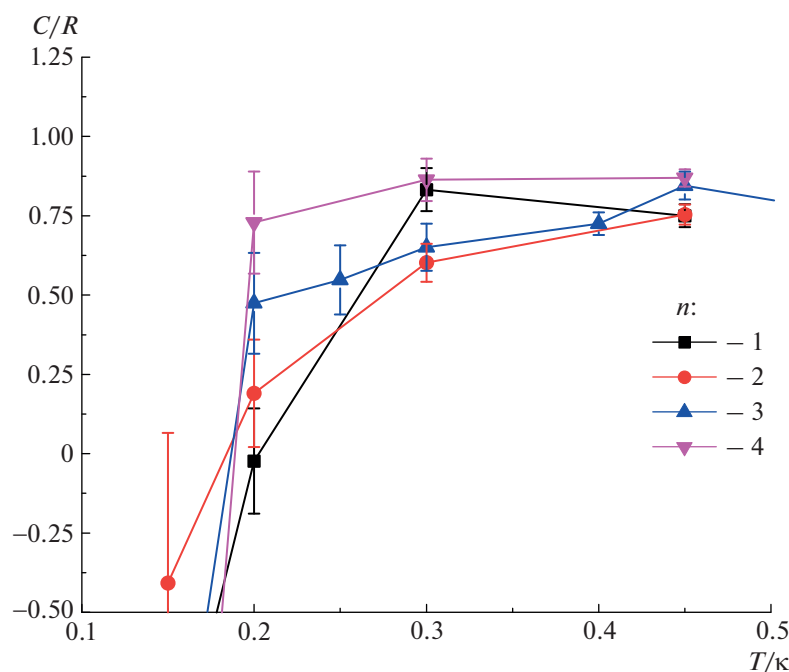


Рис. 4. Сравнение результатов вычисления температурной зависимости теплоемкости в случае 5 полей для разных значений n . Здесь $T = \beta^{-1}$.

окрестности единицы для удельной теплоемкости (ожидание основано на теореме о равнораспределении для двумерного классического газа).

В работе были получены графики теплоемкости для всех четырех выборов n . Здесь мы приведем пример обсуждения для $n = -3$, соответствующий график изображен на рис. 5. Зависимость теплоемкости от температуры представляет собой гладкую кривую, которая достигает насыщения, начиная с температуры $\beta^{-1} = 0.325\text{к}$. Участок вокруг $\beta^{-1} = 0.45\text{к}$ обращает на себя внимание для большинства вычислений и, возможно, связан с фазовыми эффектами. Погрешности вычислений в области $\beta^{-1} < 0.25\text{к}$ достаточно быстро возрастают, а сама кривая резко падает вниз. Хотя может показаться, что вычисление при низких температурах лишено смысла, линейная экстраполяция точек области между 0.2к и 0.275к к абсолютному нулю дает нулевую теплоемкость в пределах погрешности. Это может быть проинтерпретировано так, что поведение вычисленной кривой не противоречит линейной зависимости $C(T)$, ожидаемой для теоретической аппроксимации первого порядка. Продвинуться дальше в вычислениях предлагается за счет ввода 11 полей.

Действительно, вычисления, выполненные для 11 полей, демонстрируют более гладкое и устойчивое поведение, а дисперсия энергии может быть получена с меньшей статистической ошибкой. Из недостатков данного подхода можно указать за-

метное увеличение времени расчета. Однако, мы предполагаем, что попытки улучшить результаты для меньшего числа полей потребуют статистики, превосходящей необходимую для 11 полей, что сделает этот подход еще более требовательным к вычислительным ресурсам.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе делается попытка выполнить вычисления тепловых наблюдаемых для системы фермионов в режиме сильной связи на решетке в случае, когда наблюдаемые выражаются через большое число операторов рождения-уничтожения, что создает существенные технические трудности. Предлагается два вида технических усовершенствований: введение дополнительных (линковых) полей и изменение вида преобразования Хаббарда–Стратоновича. Каждый из способов позволяет улучшить поведение алгоритма Монте-Карло при “обходе” конфигурационного пространства, а значит, влияет на апостериорную статистику. В работе демонстрируются примеры положительного эффекта от применяемой методики: удается продвинуться в область более низких температур, статистический шум метода МК частично стабилизируется.

В качестве развития исследования предполагается оценить влияние параметра V_{02} (интенсивности электростатического взаимодействия электронов на втором координационном радиусе) на результаты вычислений при 11 полях. Также оста-

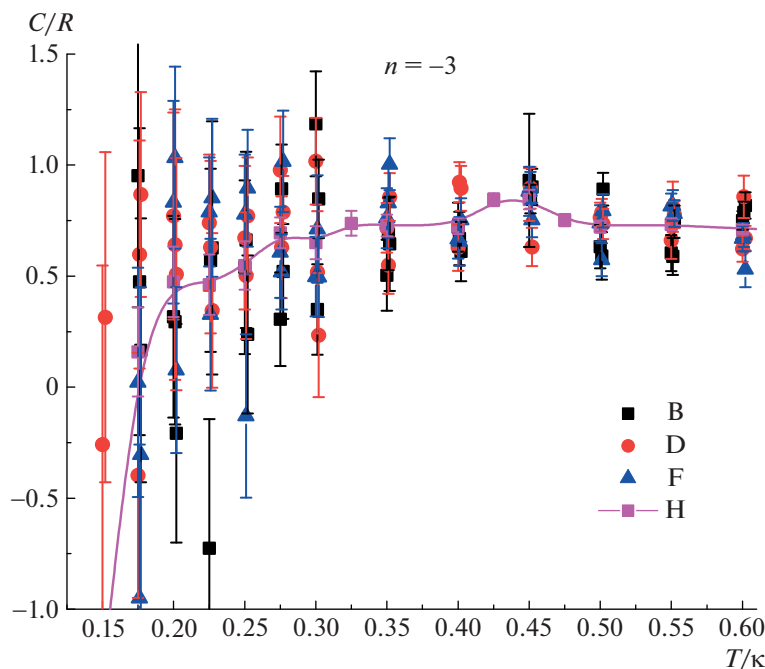


Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости в случае 5 полей для $n = -3$. Здесь $T = \beta^{-1}$.

ется открытым вопрос достижения произвольно низких температур при вычислении наблюдаемых 8 порядка по операторам.

6. БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-21-00237). Вычисления производились на суперкомпьютерном комплексе НИЦ КИ – ИТЭФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Smith D., Smekal L.V. // Phys. Rev. B. 2014. V. 89 (19). P. 195429.
2. Buividovich P., Smith D., Ulybyshev M., Smekal L.V. // Phys. Rev. B. 2018. V. 98 (23). P. 235129.
3. Buividovich P., Smith D., Ulybyshev M., Smekal L.V. // Phys. Rev. B. 2019. V. 99 (20). P. 205434.
4. Guennebaud G. et al. Eigen v3: Template Library for Linear Algebra. 2010.

Development of a Method for Determining the Heat Capacity of Graphene by the Hybrid Monte Carlo Method

S. D. Mostovoy^{1, 2, *} and O. V. Pavlovsky^{1, 2, **}

¹Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

²National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia

*e-mail: sd.mostovoy@physics.msu.ru

**e-mail: pavlovsky@physics.msu.ru

Received December 12, 2022; revised January 18, 2023; accepted January 23, 2023

Abstract—We search for the ways to improve the lattice implementation of the extended Hubbard model in order to compute quantum mechanical operators of increased complexity. The standard method does not allow to eliminate all the divergences in observables, which prevents obtaining a stable distribution over configurations in the Monte Carlo method. In a set of calculations, the positive effect of two approaches is demonstrated: an introduction of additional Hubbard fields and a selection of the Hubbard–Stratonovich transformation’s parametrization.

Keywords: Monte Carlo method, Hubbard model, graphene, heat capacity