

Calculs thermodynamiques et leur uniformité pour le modèle de Hubbard bi-dimensionnel

par

Sébastien Roy

mémoire présenté au Département de Physique en vue
de l'obtention du grade de maître ès sciences (M.Sc.)

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, Septembre 2002

Le 15 septembre 2002
date

le jury a accepté le mémoire de M. Sébastien Roy dans sa version finale.

Composition du jury

Membre : M. André-Marie Tremblay
Département de physique

Membre : M. David Sénéchal
Département de physique

Membre : M. Claude Bourbonnais
Département de physique

Membre et
président-rapporteur : M. Patrick Fournier
Département de physique

Sommaire

Le modèle de Hubbard est le modèle d'électrons corrélés le plus simple qui pourrait expliquer la supraconductivité à haute température critique. Ce modèle n'est toujours pas résolu sauf pour des limites particulières. On cherche à trouver des méthodes permettant de le résoudre, au moins approximativement. Les approches diagrammatiques de la théorie des perturbations nous forcent à faire des choix qui conduisent souvent à des violations de certaines lois de conservation. Dans ce cadre, certaines règles ont été suggérées afin de respecter l'uniformité thermodynamique. Mais la méthode la plus populaire utilisant ces règles ne parvient pas à donner des résultats satisfaisants. On analysera une autre méthode qui n'utilise pas ces règles mais qui parvient tout de même à respecter l'uniformité thermodynamique ainsi qu'à donner des résultats qui sont en accord à quelques pourcents près avec les simulations Monte-Carlo. La courbe de double occupation en fonction de la température comporte un minimum local, manifestation de la localisation. On verra que le calcul de l'entropie ne montre pas que le minimum de double occupation en fonction de la température soit présent pour des considérations entropiques.

Remerciements

Je voudrais d'abord remercier le Professeur André-Marie Tremblay pour m'avoir offert l'opportunité et surtout le privilège de travailler avec lui et d'avoir supervisé ce travail. Il est toujours disponible malgré son horaire particulièrement chargé et est d'une rigueur impeccable. Sa perpétuelle bonne humeur fait en sorte que de travailler avec lui est un plaisir. Je voudrais aussi remercier le Professeur David Sénéchal pour toutes les contributions à ce travail pour le CPT. Je voudrais aussi remercier François Lemay pour m'avoir reflé ses programmes ACDP dont je me suis plus que légèrement inspiré, les fructueuses discussions et pour son amitié. Je voudrais remercier Bumsoo Kyung pour les résultats de FLEX et Steve Allen pour le Monte-Carlo.

J'aimerais remercier Medhi Bozzo-Rey et les autres analystes qui ont travaillé au département depuis mon arrivée. Medhi a sauvé plusieurs de mes calculs au dernier moment avant les pannes de courant. Il a toujours un nouveau gadget linux à suggérer et travaille jour et nuit pour le département.

Je dois aussi remercier ma famille André, Louise, Vincent, Mathieu, Marie-Claude, Mélissa et la petite Daphnée ainsi que ma conjointe Doris et sa famille pour le soutien financier, moral et pour tout les autres extras. Une mention spéciale à mon cousin Benoit qui est toujours prêt à m'écouter lorsque je parle de mon domaine.

Ensuite je voudrais aussi remercier mes amis et mes confrères du département, Alexandre I, Alexandre II, Jacques, Xavier et tout les autres, dans aucun ordre particulier pour les jeudis soirs, les pauses, les fin de semaines et tout le reste.

Je voudrais aussi remercier le fonds québécois de la recherche sur la nature et les technilodies, le CRSNG et l'institut canadien de recherches avancées.

Table des matières

Sommaire	ii
Remerciements	iii
Table des matières	iv
Liste des figures	xi
Introduction	1
1 Le Modèle de Hubbard	10
1.1 Le modèle de Hubbard	10
1.1.1 Commentaire sur le choix des unités	11
1.2 Cas limites du modèle de Hubbard	11
1.2.1 La limite de couplage nul: $U = 0$	12
1.3 Résolution à couplage non-nul	13
1.3.1 Une méthode numérique: le Monte-Carlo Quantique (MCQ)	13
1.3.2 La méthode Autocohérente à Deux Particules (ACDP)	20
1.3.3 Méthode conservative à la Kadanoff-Baym, <i>Fluctuation Exchange</i>	25
1.3.4 Théorie de perturbation interamas (TPI)	26

2	Thermodynamique du modèle de Hubbard et uniformité thermodynamique	31
2.1	Test d'uniformité et les relations de Maxwell	31
2.1.1	Uniformité thermodynamique et lois de conservation de Kadanoff-Baym	32
2.1.2	Potentiels thermodynamiques	33
2.1.3	L'entropie par le potentiel chimique	34
2.1.4	Vers le test d'uniformité, l'entropie par la chaleur spécifique .	36
2.2	Limites des faibles températures et des faibles remplissages	37
2.2.1	L'intégrale de la dérivée du potentiel chimique par rapport à la température	37
2.2.2	L'intégrale de la chaleur spécifique	39
3	Résultats	41
3.1	Autocomparaison ACDP et uniformité thermodynamique	41
3.2	Comparaisons du MCQ avec les autres méthodes	50
3.2.1	Calcul de $n(T, \mu)$ par $\text{Tr} [G(T, \mu)]$ comparé avec le Monte-Carlo Quantique	51
3.2.2	Calcul de $E(T, n)$ par $\text{Tr} [(\epsilon + \Sigma/2)G(T, \mu)]$ comparé avec le Monte-Carlo Quantique	54
3.2.3	Théorie de perturbation interamas et MCQ	71
3.2.4	FLEX, MCQ et ACDP	72
3.3	Localisation induite par la température	74
3.4	Résumé des résultats importants	81
	Conclusion	83

A	Limite $U = 0$, les solutions importantes	87
B	Calculs numériques, intégrations et différentiation	89
B.1	Dérivée numérique	89
B.1.1	Dérivation de quantités déterministes	90
B.1.2	Dérivées numériques et quantités statistiques	90
B.2	Intégrations numériques	91
B.2.1	À propos des erreurs d'intégration et de l'intégrale indéfinie	91
B.2.2	Intégration simple, la méthode du trapèze	92
B.2.3	Intégration Romberg	93
C	Calcul de $\mu(T, n)$ à $n \rightarrow 0$	97
D	Calcul de $S(T = \infty, n)$	99
E	Accélération de convergence dans ACDP	101

Liste des Figures

1	Diagramme de phase générique des supraconducteurs à haute température critique dopés aux trous [23]	6
1.1	Figure illustrant la théorie de perturbation interamas [48]	30
3.1	Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 2$, $\beta = 10$. Les croix désigne le calcul directe du potentiel chimique alors que la ligne pleine provient du calcul numérique de la dérivée de l'énergie libre par rapport au potentiel chimique à température constante. La reproduction des effets de tailles finies suggère d'une part que les calculs numériques sont précis et d'autre part que les effets de tailles finies apparaissent dans l'énergie.	42
3.2	Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 2$, $\beta = 5$ En augmentant la température, la correspondance en est que meilleure.	43
3.3	Résultats de $\mu(T)$ pour $n = 0.5$ et $U = 2$. En traçant la fonction selon la température, on voit bien que les résultats s'améliore à mesure que la température augmente.	45
3.4	Résultats de $\mu(T)$ pour $n = 0.7$ et $U = 2$	46
3.5	Résultats de $\mu(T)$ pour $n = 0.8$ et $U = 2$	47
3.6	Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 4$, $\beta = 6$. La figure illustre que les structures visibles à basse température dans le potentiel chimique provient uniquement d'effet de taille finie. Car plus la taille du réseau discret choisi est grand, plus la courbe est douce.	48

3.7	Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 4$ et $\beta = 2$. En augmentant la valeur de U , la correspondance est moins bonne. Surtout au fur et à mesure que l'on s'approche du demi-remplissage.	49
3.8	Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 4$ et $\beta = 10$. À plus fort couplage, les effets de tailles finies sont plus importants. Ici, lorsque le remplissage dépasse 0.85 environ, on ne respecte plus très bien l'uniformité thermodynamique. Mais on réussit à très bien reproduire des effets de taille finie importants.	50
3.9	Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 6$ et $U = 2$. Le Monte-Carlo est représenté par les carrés noirs. On compare ici $\text{Tr } G$ avec le Monte-Carlo et avec la théorie de perturbation au second ordre (TPSO).	51
3.10	Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 6$ et $U = 4$. À plus fort couplage, les différences sont plus grandes.	52
3.11	Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 4$ et $U = 2$. Plus la température est élevée, plus la correspondance est bonne.	53
3.12	Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 4$ et $U = 4$	54
3.13	Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 6$ et $U = 2$. Les points noirs correspondent toujours au Monte-carlo. Les croix désignent la théorie de perturbation et les lignes pointillés désigne l'ACDP au premier et au second ordre. À une température aussi basse, on voit la nécessité d'aller au second ordre.	55
3.14	Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 6$ et $U = 4$. À plus basse température, le comportement étrange de la courbe ACDP au premier ordre indique l'ouverture du pseudogap.	56
3.15	Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 4$ et $U = 2$	57
3.16	Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 4$ et $U = 4$	57
3.17	Résultats de $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 2$ et $\beta = 4$	58
3.18	Résultats de $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 2$ et $\beta = 6$	59

3.19	Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 4$ et $\beta = 4$	60
3.20	Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 4$ et $\beta = 6$	61
3.21	Pour $U = 2$ et $U = 4$ et $n = 0.5$ selon le nombre de fréquences de Matsubara, on voit des différences dans la double occupation. sur chaque graphique, les courbes de bas en haut on été calculée avec $(2n + 1)\pi T = 80, 160, 320$ et 640 respectivement.	61
3.22	Chaleur spécifique en fonction de la température pour $U = 2$ et $n = 1.0$. Le graphique de gauche présente les résultats pour ACDP et TPSO. On remarque que la théorie de perturbation ne présente pas le pic à basse température. À droite, on trouve les résultats MCQ obtenus par le groupe de R.T. Scalettar [51].	62
3.23	Chaleur spécifique en fonction de la température pour $U = 4$ et $n = 1.0$. Le graphique de gauche présente les résultats pour ACDP et TPSO. On remarque encore une fois que la théorie de perturbation ne présente pas le pic à basse température. À droite, on trouve les résultats MCQ obtenus par le groupe de R.T. Scalettar [51].	62
3.24	Contributions cinétique (K) et potentielle (P) à la chaleur spécifique en fonction de la température pour différentes valeurs de U à demi-remplissage. À gauche ce trouve les résultats ACDP. À droite, on trouve les résultats MCQ obtenus par le groupe de R.T. Scalettar [51]. Il s'agit ici d'un très bon test car à $U = 4$, le comportement des contributions cinétique et potentielle à la chaleur spécifique ne sont pas triviales.	63
3.25	Contributions cinétique à l'énergie totale. On constate le maximum local à basse température qui devrait plutôt être une saturation si on en croit les résultats MCQ de la figure précédente.	64
3.26	Chaleur spécifique pour $U = 4$ et $n = 0.5$. Le bruit dans les données Monte-Carlo est dû à l'imprécision de la dérivée aux différences finies faites avec un grand écart entre chaque point. L'incertitude sur les données Monte-Carlo n'a pas été calculées.	67

3.27 Entropie pour $U = 4$ et $n = 0.5$, calculée par l'intégrale de la chaleur spécifique. Encore une fois, il n'y a pas de barres d'erreurs sur les résultats Monte-Carlo.	68
3.28 Énergie pour $U = 4$ et $n = 0.5$	69
3.29 Énergie pour $U = 4$ et $n = 1.0$	69
3.30 Énergie pour $U = 2$ et $\beta = 6$	70
3.31 Remplissage pour $U = 2$ et $\beta = 6$	70
3.32 Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 2$, $n = 0.7$ ainsi que pour $U = 4$, $n = 1.0$	72
3.33 Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 4$, $\beta = 4$ en fonction du remplissage. La taille du réseau pour FLEX est 6x6 alors que pour le Monte-Carlo elle est de 8x8.	73
3.34 Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ avec $U = 2$ pour divers remplissages. Calculés avec $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{U} \text{Tr} \left[\frac{\Sigma^{(2)}}{2} G^{(2)} \right]$ L'échelle de double occupation (DO) est normalisée par $\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$	75
3.35 Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ avec $U = 4$ pour divers remplissages. Calculés avec $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{U} \text{Tr} \left[\frac{\Sigma^{(2)}}{2} G^{(2)} \right]$ L'échelle de double occupation (DO) est normalisée par $\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$	76
3.36 Diagramme de phase pression-température pour ^3He	77
3.37 Résultat d'entropie pour $U = 0$ et $U = 2$	81
B.1 Deux exemples d'intégrations par trapèzes pour la même fonction. Dans les deux cas, le nombre de points change. Plus le nombre de points est grand, plus le résultat est précis.	92
B.2 Les deux figures ci-haut montrent deux intégrations par rectangles pour la même fonction. Les deux résultats présenteront une borne inférieure et supérieure d'un intervalle qui contient le résultat exact.	93
B.3 L'intégrale par trapèze converge vers une valeur erronée de l'entropie	94

B.4 L'algorithme de Romberg donne la bonne valeur d'entropie 96

Introduction

Malgré les énormes succès précédents de la théorie de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) pour la supraconductivité conventionnelle [1], découvrir le mécanisme de la supraconductivité à haute température critique constitue un problème de taille pour les physiciens. En effet, plusieurs chercheurs se penchent aujourd'hui sur ce problème. Depuis leur découverte en 1986 [2], plusieurs études expérimentales sont parvenues depuis à indiquer aux théoriciens dans quelles directions chercher. Certaines différences entre des propriétés des supraconducteurs conventionnels et des supraconducteurs à haute température critique (SHTC) ont été observées. Ces dernières portent à croire que l'interaction à la source de la SHTC est d'origine magnétique.

Pour décrire cette classe de matériaux, le modèle de Hubbard à deux dimensions représente le modèle le plus simple possédant les caractéristiques électroniques voulues. Il est cependant extrêmement difficile à résoudre. Dans les cas où on croit avoir trouvé une bonne solution, il explique qualitativement assez bien plusieurs des propriétés des supraconducteurs à haute température critique. Il reste cependant beaucoup à faire pour développer et améliorer les méthodes de solution de ce modèle et d'autres modèles semblables qui sont fortement corrélés. Dans ce mémoire, on s'attaquera à l'étude des propriétés thermodynamiques du modèle de Hubbard à l'aide de plusieurs méthodes numériques et analytiques. On comparera ces méthodes par leurs résultats de calculs de quantités thermodynamiques. La présence d'un minimum de double occupation en fonction de la température a déjà été comparée à l'effet Pomeranchuk [3] que l'on retrouve dans l'hélium trois. Il sera vérifié que cette comparaison qualitative ne pourra pas être poussée plus loin, du moins pas du point de vue de l'entropie.

La supraconductivité conventionnelle

C'est en 1911 que Kamerlingh Onnes observe pour la première fois la supraconductivité dans le mercure refroidi avec de l'hélium liquide [4]. Cette observation consistait en fait à tracer une courbe de résistivité en fonction de la température. À une température critique de 4,15 Kelvin, le mercure devient supraconducteur et sa résistivité chute à zéro. Il s'agit là de la première grande caractéristique des supraconducteurs. Cette dernière est observable pour tous les types de supraconducteurs, autant les supraconducteurs conventionnels que ceux à haute température critique.

En 1933, les physiciens Meissner et Ochsenfeld observent les propriétés de diamagnétisme parfait [5]. Ils ont découvert que le champ magnétique est expulsé du supraconducteur. Cela ne peut être expliqué uniquement avec l'existence de la conductivité parfaite, car le supraconducteur n'emprisonne pas de flux magnétique lorsque l'expérience suivante est faite [6]. On applique un champ magnétique alternatif dans l'échantillon à l'état normal, on abaisse la température en dessous de la température critique. Un simple conducteur parfait présenterait aucun changement d'état alors que le supraconducteur expulse le champ magnétique. Maintenant, sans champ magnétique, on abaisse la température en dessous de la température critique et ensuite on applique le champ magnétique. Que ce soit un conducteur parfait ou un supraconducteur, le champ magnétique ne pénètre pas le matériau. Pour le supraconducteur, qu'on applique le champ magnétique avant ou après avoir abaissé la température ne change rien à l'état final. Alors que ce n'est pas le cas pour un conducteur parfait. Cela indique qu'il s'agit d'une propriété supplémentaire à la conductivité infinie. On parle de champ magnétique alternatif car le phénomène important ici est la variation de flux magnétique et non seulement la présence de champ magnétique. Ainsi la résistivité nulle n'est pas suffisante à elle seule pour définir le phénomène de la supraconductivité [7], il faut aussi observer l'effet Meissner. De plus, en appliquant un champ magnétique suffisamment élevé, on parvient à supprimer la supraconductivité.

Par la suite, des mesures de chaleur spécifique [8] et des mesures optiques [9, 10] ont démontré l'existence d'un gap supraconducteur. À peu près en même temps,

Bardeen-Cooper-Schrieffer publiaient la théorie qui porte leur nom, la théorie BCS [1]. Cooper a prouvé qu'une paire d'électrons en interaction attractive au dessus du niveau de Fermi peut générer un état lié. Ces paires sont formées d'électrons occupant des états de spins et de vecteurs d'onde opposés [11]. Il s'agissait maintenant de vérifier l'origine microscopique de cette interaction attractive effective. Or, il avait déjà été indiqué expérimentalement qu'une interaction électron-réseau pouvait être à l'origine du phénomène de la supraconductivité [12]. Cette hypothèse fut confirmée par l'observation de l'effet isotopique [13]. Cooper avait suggéré une interaction due aux phonons et à l'écrantage de Coulomb. La plus grande prédiction de cette théorie était l'existence d'un gap énergétique $E_g = 2\Delta(T)$.

Le paramètre κ qui est le rapport entre la longueur de pénétration et la longueur de cohérence, est plus petit que 1 pour les supraconducteurs conventionnels typiques et n'a pas d'unité. Le physicien Abrikosov a étudié ce qu'il adviendrait de la théorie de Ginzburg-Landau [14] si la longueur de pénétration était beaucoup plus grande que le longueur de corrélation [15]. Il nomma *supraconducteurs de type I* ceux qui ont une valeur de κ plus petite que $1/\sqrt{2}$ et *supraconducteurs de type II* ceux qui ont une valeur de κ plus grande que $1/\sqrt{2}$. Ses résultats lui permirent de conclure que dans le cas des types II, plutôt que d'avoir une transition discontinue entre l'état supraconducteur et l'état normal en champ magnétique, une pénétration continue du flux magnétique apparaîtrait à un certain champ critique H_{c1} jusqu'à un autre champ critique H_{c2} , où le matériau est projeté dans l'état normal. Son étude montra aussi que le flux pénètre par le biais d'un réseau de tubes, des vortex transportant chacun un quanta de flux magnétique. Abrikosov prédit que ces tubes s'arrangeraient selon un réseau triangulaire.

La supraconductivité à haute température critique

En 1986, Bednorz et Müller découvrent un nouveau type de supraconducteur [2]. Brisant tous les records de température critique élevée, cette découverte constitua la première observation des propriétés de supraconductivité à haute température critique. Une toute nouvelle classe de matériaux venait d'être découverte. Comme

pour les supraconducteurs conventionnels, les supraconducteurs à haute température critique sont caractérisés par l'existence de conductivité infinie et de diamagnétisme parfait.

On a observé certaines caractéristiques communes aux supraconducteurs conventionnels et aux supraconducteurs à haute température critique. D'abord, dans les deux cas, il y a présence de paires d'électrons [16, 17] en observant une charge de $2e$. Avec des mesures de spectroscopie par photoémission, par effet tunnel électronique ou d'autres expériences, il est possible de détecter la présence d'un gap supraconducteur tout comme pour les supraconducteurs conventionnels. Par contre, le gap est plus grand pour les supraconducteurs à haute température critique. De plus, il est anisotrope [18]. On retrouve aussi certaines propriétés associées aux supraconducteurs de type II comme la présence de vortex et l'effet Josephson.

Par contre, bon nombre de propriétés sont entièrement différentes de celles des supraconducteurs conventionnels telles les hautes valeurs de température critique déjà mentionnées. De plus, la symétrie du paramètre d'ordre de ces supraconducteurs est de type d [19]. Ensuite, on note le comportement linéaire de la résistivité en courant continu, la proximité d'une phase antiferromagnétique, les faibles longueurs de corrélations, etc [18]. Une autre différence importante est la nécessité de doper en porteurs le matériau afin de générer un matériau supraconducteur. On verra dans la section suivante comment cela affecte le phénomène de la supraconductivité à haute température critique. Compte tenu des grandes valeurs de température critique de ce genre de matériaux, on rejette la possibilité d'une interaction phononique effective à la BCS, étant donné les échelles d'énergie impliquées. On observe aussi la forte anisotropie pour ces matériaux [20], signalent l'importance des plans de cuivre-oxygène. La présence de plan de cuivre-oxygène dans la plupart des supraconducteurs à haute température critique suggère que c'est dans ces plans que se produit essentiellement le phénomène de supraconductivité.

Toujours à la recherche de la clé de la supraconductivité à haute température critique, les physiciens développent de nouveaux modèles, souvent difficiles à résoudre. On propose ici d'analyser un de ces modèles et plus particulièrement, certaines méthodes de résolutions l'entourant. Il s'agit du modèle de Hubbard.

Le diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique

Certaines propriétés des supraconducteurs à haute température critique peuvent facilement être résumées par leur diagramme de phase que l'on observe expérimentalement [21]. On associe le dopage (en électrons ou en trous) à la concentration en porteurs dans les plans de cuivre-oxygène. La figure 1 présente la forme de ce diagramme pour les matériaux dopés aux trous. L'axe des ordonnées représente la température et l'abscisse correspond au dopage, la concentration en porteurs. Sur cette figure on voit la proximité de la phase antiferromagnétique (AF), la région du pseudogap sous la droite, qu'on peut observer dans la densité d'état mesurée par photoémission (PG) [22], on voit aussi la région associée au *spin glass* (SG) et finalement le dôme supraconducteur (SC).

Le modèle de Hubbard comme candidat

Les résultats expérimentaux accumulés jusqu'à présent sur les supraconducteurs à haute température critique suggèrent que de fortes corrélations d'origine magnétique seraient responsables du mécanisme de la supraconductivité à haute température critique. Le modèle de Hubbard est le modèle théorique le plus simple qui présente une phase antiferromagnétique à basse température et à dopage nul. En utilisant le modèle à deux dimensions, on tient compte de l'existence de plans de cuivre-oxygène. La possibilité de varier le nombre d'électrons tient compte de la concentration en porteurs. On émet l'hypothèse que tous les processus physiques responsables de la supraconductivité à haute température critique sont inclus dans ce modèle et qu'en réussissant à le résoudre, on obtiendrait l'essentiel du phénomène. Par contre, de nombreux processus physiques qui apparaissent dans les matériaux réels ont été négligés. Cela a pour conséquence de rendre les comparaisons quantitatives avec des résultats expérimentaux plutôt difficiles. Par exemple, le volume est constant, ce qui implique que la pression n'est pas définie et qu'il n'y a pas de contributions phononique. De plus, il n'est pas possible de faire directement une étude en champ magnétique. Par

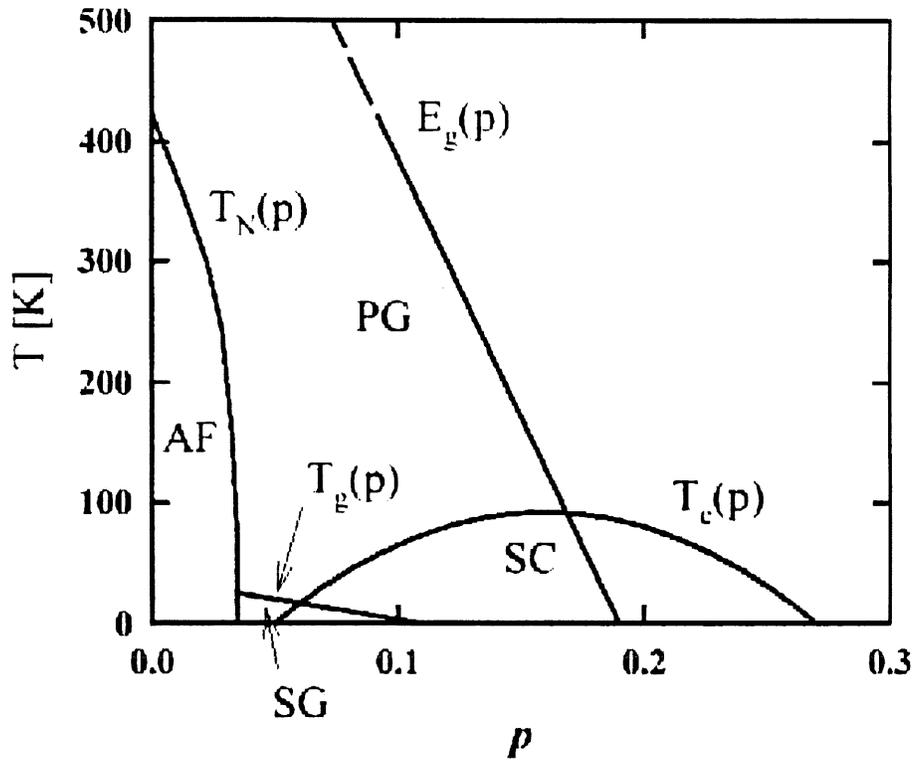


Figure 1: Diagramme de phase générique des supraconducteurs à haute température critique dopés aux trous [23]

contre, il tient compte d'interactions magnétiques.

Le modèle de Hubbard en deux dimensions n'a pas de solution exacte connue. Il nécessite l'utilisation de puissants ordinateurs. En plus, une bonne dose d'approximations reste nécessaire pour réussir à calculer certaines de ses propriétés. C'est pour cette raison que cette étude portera principalement sur deux méthodes de résolution, soit l'approche non-perturbative autocohérente à deux particules (ACDP) et la théorie de perturbation interamas (TPI). On verra que la méthode ACDP réussit à bien reproduire les résultats de simulations Monte-Carlo Quantique. La méthode TPI a l'avantage d'être exacte autrement dans la limite faible couplage que dans la limite fort couplage.

Uniformité thermodynamique et localisation induite par la température dans les systèmes d'électrons en interaction

Dans ce projet, cinq méthodes approximatives de résolution du modèle de Hubbard seront comparées. Cette comparaison faite, l'une de ces méthodes sera choisie pour mettre en évidence certaines structures de la chaleur spécifique à basse température et l'existence d'un minimum de double occupation en fonction de la température pour plusieurs remplissages. Il sera montré que l'analogie entre l'effet Pomeranchuk et le minimum de double occupation évoqué par Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth et Marcelo J. Rozenberg [3] pourra difficilement être poussée plus loin. En effet, l'entropie du métal en comparaison avec l'entropie de l'isolant pour le système étudié ne présente pas les mêmes caractéristiques que l'entropie du solide et l'entropie du liquide pour le cas de l'hélium trois.

Les cinq méthodes en question sont les suivantes. Tout d'abord, on utilise des résultats de simulations Monte-Carlo quantique comme étalon. Bien que cette méthode soit exacte aux erreurs statistiques près, elle a le désavantage de mal fonctionner aux faibles valeurs de dopages et aux basses températures. C'est la raison pour laquelle

on a besoin d'autres méthodes plus approximatives, mais qui n'ont pas ces limitations. Le Monte-Carlo peut être utilisé comme étalon pour vérifier la précision des autres méthodes dans les régimes où le Monte-Carlo est accessible, avant d'étendre ces méthodes à des régions où le Monte-Carlo n'est plus accessible. Ensuite, sera comparée au Monte-Carlo quantique une approche non-perturbative que l'on désigne autocohérente à deux particules (ACDP). Cette méthode utilise certaines règles de sommes importantes, les lois de conservation et le principe d'exclusion de Pauli. Dans le cas particulier de cette méthode, l'uniformité thermodynamique sera vérifiée. Ensuite, on fera la comparaison avec la théorie de perturbation interamas (TPI). Cette méthode consiste à faire des diagonalisations exactes sur des amas de sites. Ensuite, par le biais de la théorie de perturbation en couplage fort, on génère un réseau de taille infinie avec les amas. Puis, on comparera des résultats de double occupation faite avec la méthode de *fluctuation exchange* (FLEX), calculés par le Dr. Bumsoo Kyung. Cette méthode perturbative utilise les lois de Kadanoff-Baym qui assurent l'uniformité thermodynamique. Il sera démontré que la méthode ACDP respecte l'uniformité thermodynamique malgré le fait qu'elle n'utilise pas ces règles. Finalement, on présentera des résultats de la théorie de perturbation au second ordre (TPSO) à faible couplage. La méthode ACDP ayant un domaine de validité s'étendant des couplages nuls ($U = 0$) vers les couplages faibles à intermédiaires, les calculs seront tous faits pour $U \leq 4$. Ceci correspondrait donc aux types de matériaux dopés aux électrons comme le suggère les résultats de calcul de poids spectral [24] et les échelles d'énergie du gap optique [25]. Il est important de noter que la région de paramètres la plus intéressante est celle à basse température et près du demi-remplissage, car c'est dans ces régions que les méthodes approximatives sont mises à plus rude épreuve.

Par des calculs de chaleur spécifique, on verra quels sont les avantages de la méthode ACDP par rapport à la théorie de perturbation au second ordre, surtout à basse température. Des comparaisons avec les résultats Monte-Carlo quantique mettront en évidence la validité de cette approximation. Ensuite, par le biais de la méthode ACDP, une analyse de la chaleur spécifique sera faite. Par la suite, on calculera la double occupation en fonction de la température pour divers remplissages. Ce faisant, on observera une chute radicale de la double occupation à basse température ainsi

que la présence d'un minimum local dans cette courbe. On dira que le système est localisé lorsque la double occupation est nulle. Ainsi, en observant une diminution de la double occupation, on dira que le système se *localise*.

Chapitre 1

Le Modèle de Hubbard

Il existe de nombreux modèles théoriques qui pourraient *a priori* être utiles pour comprendre le ou les mécanismes conduisant à la supraconductivité à haute température critique. Par exemple, le modèle $t-J$, le modèle de Hubbard à une bande, le modèle de Hubbard à trois bandes, etc. Ici, il sera question du modèle de Hubbard à une bande avec saut aux premiers voisins¹ [26]. Malgré les simplifications faites, ce modèle n'est toujours pas résolu en deux dimensions dans la gamme intéressante de paramètres. Dans ce chapitre, le modèle de Hubbard sera présenté. Certains cas limites utiles seront discutés et finalement, les méthodes de résolution choisies seront exposées.

1.1 Le modèle de Hubbard

La forme du hamiltonien de Hubbard est la suivante²:

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \quad (1.1)$$

¹que nous appellerons simplement *modèle de Hubbard* par la suite pour alléger le texte,

²Dans le prochain chapitre, on utilisera la notation \hat{O} pour désigner un opérateur et O pour désigner la valeur moyenne : $\langle \hat{O} \rangle$.

1.2. CAS LIMITES DU MODÈLE DE HUBBARD

où $\langle i, j \rangle$ indique que la somme est faite sur les premiers voisins d'un réseau carré, $c_{i,\sigma}^\dagger$ et $c_{j,\sigma}$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'électrons et finalement, $\hat{n}_{i,\sigma}$ est l'opérateur du nombre d'électrons égal à $c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$. L'opérateur $c_{i,\sigma}^\dagger$ crée un électron de spin σ au site i tandis que l'opérateur $c_{i,\sigma}$ détruit un électron de spin σ au site i . Ces opérateurs fermioniques répondent aux relations d'anticommutation:

$$\{c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma'}^\dagger\} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (1.2)$$

$$\{c_{i,\sigma}^{(\dagger)}, c_{j,\sigma'}^{(\dagger)}\} = 0 \quad (1.3)$$

On appelle communément $t_{i,j}$ l'*intégrale de saut*. On suppose qu'elle est constante et on la choisit égale à $-t$. On peut considérer t comme étant l'élément de matrice pour le taux de transition de l'électron d'un site à l'autre ($i \rightarrow j$) selon la règle d'or de Fermi [27]. Le second terme de l'hamiltonien résulte d'une interaction coulombienne écrantée sur le site i .

1.1.1 Commentaire sur le choix des unités

Les ordres de grandeur d'énergie sont comparés à t et U . Les unités d'énergie et de température sont définies en fonction de t . Tous les résultats numériques présentés au chapitre 3 sont calculés avec la convention suivante: k_B , la constante de Boltzmann, \hbar , la constante de Plank sont normalisées à 1. On choisit t et le pas du réseau a comme étant aussi égaux à 1. La valeur de U varie et sera rappelée pour chaque série de résultats. Avec ce choix d'unité, une unité de t correspond à environ 125 meV ; ce qui équivaut à environ 1300K. Le pseudogap observé par simulation Monte-Carlo à $U = 4$ [28] se situe, à dopage nul, autour de 300 K, ce qui correspond à quelque chose comme $0.2t$ à $0.25t$.

1.2 Cas limites du modèle de Hubbard

Il existe certains cas limites pour lesquels le modèle de Hubbard à une bande est soluble. Par exemple, en dimension infinie avec la méthode du champ moyen dynamique

1.2. CAS LIMITES DU MODÈLE DE HUBBARD

[3] ou encore en une dimension avec l'ansatz de Bethe [29, 30]. On s'intéresse ici au modèle de Hubbard en deux dimensions. Les limites $t = 0$ et $U = 0$ sont solubles. Le cas de la limite $U = 0$ sera fort utile pour les discussions à venir, c'est pourquoi cette limite sera plus explicitement exposée.

1.2.1 La limite de couplage nul: $U = 0$

La limite du modèle de Hubbard à deux dimensions où $U = 0$ est très importante ici, car c'est dans cette limite qu'il est possible de vérifier la précision des calculs numériques (Annexe B). Malheureusement, il n'est pas toujours simple de calculer analytiquement les quantités thermodynamiques d'intérêt avec les méthodes de résolution choisies. Pour cette raison, les calculs thermodynamiques sont effectués numériquement. Étant donné que plusieurs des résultats présentés au chapitre 3 proviennent d'intégrations ou de dérivations numériques, il importe d'avoir une idée de la précision de ces opérations. Puisque les quantités d'intérêt pour cette étude ont des solutions analytiques exactes pour $U = 0$, des comparaisons entre ces solutions et les résultats numériques à $U = 0$ donnent une estimation des erreurs numériques.

L'hamiltonien prend la forme suivante:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \quad (1.4)$$

qui est diagonal dans l'espace réciproque:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (1.5)$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t (\cos(k_x) + \cos(k_y))$, la relation de dispersion. À partir de cet hamiltonien, on peut calculer toutes les quantités physiques pertinentes ici (Annexe A). On appelle communément ce cas limite la *limite de bande*.

1.3 Résolution à couplage non-nul

La résolution exacte du modèle de Hubbard à deux dimensions nécessite des outils de calcul inaccessibles. Ainsi, pour résoudre cet hamiltonien, il faut faire appel à des méthodes de résolution approximatives. Lors de cette étude, trois types de méthodes de résolution ont été utilisés. Cette section les présente.

1.3.1 Une méthode numérique: le Monte-Carlo Quantique (MCQ)

Plusieurs approches Monte-Carlo existent pour les systèmes quantiques. Celle qui a été utilisée ici est basée sur l'algorithme de Blankenbecler, Scalapino et Sugar (BSS) [31]. On traitera des concepts importants qui ont permis d'utiliser cette méthode pour la résolution du modèle de Hubbard ainsi que certains problèmes liés à cette dernière. On exposera aussi les paramètres pour lesquels il est possible d'explorer les solutions à ce problème. Cette méthode donne des résultats exacts aux erreurs statistiques près, mais est limitée à des réseaux de taille finie et des températures relativement élevées.

Décomposition de Trotter

L'algorithme BSS calcule la moyenne thermodynamique des observables d'intérêt. En mécanique statistique quantique, la valeur moyenne d'une observable prend la forme suivante:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \hat{O} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{n})}}{\text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{n})}} \quad (1.6)$$

où \hat{H} est l'hamiltonien de Hubbard défini précédemment, \hat{n} est l'opérateur du nombre de particules³, μ le potentiel chimique et β est l'inverse de la température.

³Habituellement, on utilise une lettre majuscule pour désigner le nombre de particules dans un tel contexte. Mais ici on choisit la lettre minuscule pour distinguer du nombre de sites désigné par la lettre N .

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

Maintenant, pour effectuer la décomposition de Trotter, on effectue la correspondance suivante: $\hat{H} - \mu\hat{n} = \hat{K} + \hat{V} = \hat{H}'$ ainsi que $e^{-\beta\hat{H}'} = e^{i\hat{H}t}$. La dernière conduit à l'expression *nombre de tranches de temps imaginaires* N_τ par analogie avec l'opérateur d'évolution. Sachant que $[\hat{K}, \hat{V}] \neq 0$, on utilise la décomposition de Trotter-Suzuki [32, 33, 34]:

$$e^{-\beta(\hat{K}+\hat{V})} = \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{\Delta\tau(\hat{K}_l+\hat{V}_l)} \approx \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau\hat{K}_l} e^{-\Delta\tau\hat{V}_l} + O(\Delta\tau^2)N_\tau \quad (1.7)$$

où $N_\tau\Delta\tau = \beta$. Il est important de remarquer que cette forme de décomposition de Trotter-Suzuki n'est pas la seule possible. L'erreur $O(\Delta\tau^2)N_\tau$, devient une erreur d'ordre $(\Delta\tau)^2$ dans l'opération de trace [35] et peut être aussi contrôlée en faisant une régression $\Delta\tau \rightarrow 0$ ou en choisissant $\Delta\tau$ suffisamment petit pour que cette erreur systématique soit plus petite ou du même ordre de grandeur que l'erreur statistique [35]. Plus $\Delta\tau$ est petit, plus les temps de calculs sont longs. Si la température est trop faible pour une valeur de $\Delta\tau$ constante, les temps de calculs deviennent impossibles.

Transformation de Hubbard-Stratonovitch: Découplage des interactions

Le but de cette opération est de rendre l'hamiltonien effectif \hat{H}' quadratique en opérateurs de fermions. Cela a pour conséquence d'introduire dans le problème autant de variables classiques qu'il y a de sites dans le réseau espace-temps⁴. L'avantage d'avoir un hamiltonien quadratique est la possibilité de faire la trace sur les opérateurs fermioniques.

Il a été défini plus tôt que $\hat{H}' = \hat{K} + \hat{V}$. Maintenant voici les définitions de \hat{K} et \hat{V} respectivement:

$$\hat{K}_{i,j,l} \equiv -t_{i,j}c_{i,l,\sigma}^\dagger c_{j,l,\sigma} \quad (1.8)$$

$$\hat{V}_{i,l} \equiv U\hat{n}_{i,l,\downarrow}\hat{n}_{i,l,\uparrow} - \mu(\hat{n}_{i,l,\downarrow} + \hat{n}_{i,l,\uparrow}) \quad (1.9)$$

⁴ NN_τ variables ou sites dans le réseau espace-temps ; N sites dans l'espace réel fois N_τ tranches de temps.

1.3. RÉOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

où $t_{i,j}$ vaut t si i et j sont des sites voisins et vaut 0 autrement⁵. La somme étant effectuée sur tous les sites plutôt que sur les liens, il n'y a qu'un terme dans la somme plutôt que deux. Étant donné les propriétés de commutation de l'opérateur nombre, il est possible de réécrire un membre de l'équation (1.7) de la façon suivante:

$$e^{-\Delta\tau \sum_i \hat{V}_{i,l}} = \prod_{i=1}^N e^{-\Delta\tau \hat{V}_{i,l}} \quad (1.10)$$

sans approximation. On peut reformuler chacun des termes de l'équation précédente ainsi:

$$e^{-\Delta\tau \hat{V}_{i,l}} = e^{-\Delta\tau [U(\hat{n}_{i,l,\uparrow}-1/2)(\hat{n}_{i,l,\downarrow}-1/2) - (\mu-U/2)(\hat{n}_{i,l,\uparrow} + \hat{n}_{i,l,\downarrow}) - U/4]} \quad (1.11)$$

Alors on obtient l'hamiltonien quadratique en utilisant la relation:

$$e^{-\Delta\tau [U(\hat{n}_{i,l,\uparrow}-1/2)(\hat{n}_{i,l,\downarrow}-1/2)]} = e^{-\Delta\tau U/4} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} P(x) e^{x(\hat{n}_{i,l,\uparrow} - \hat{n}_{i,l,\downarrow})} dx \quad (1.12)$$

qui est satisfaite si on choisit la fonction $P(x)$ avec les critères suivants:

$$1 = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} P(x) dx \quad (1.13)$$

$$e^{\frac{\Delta\tau U}{2}} = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} P(x) \cosh(x) dx \quad (1.14)$$

Pour la transformation de Hubbard-Stratonovitch, le choix s'arrête généralement sur $\Lambda = \infty$ et $P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\tau U}} e^{-x^2/2\Delta\tau U}$. Dans le contexte des simulations numériques, il est avantageux d'utiliser une variable discrète. La suggestion faite par Hirsch [36] correspond à:

$$P(x) = \frac{1}{2} [\delta(x - \lambda) + \delta(-x - \lambda)] \quad (1.15)$$

⁵ $\sum_{i,j} -t_{i,j} c_{i,l,\sigma}^\dagger c_{j,l,\sigma} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i,l,\sigma}^\dagger c_{j,l,\sigma} + c_{j,l,\sigma}^\dagger c_{i,l,\sigma})$ si $t_{i,j} = t$ lorsque i et j sont voisins et 0 autrement.

1.3. RÉOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

$$\cosh(\lambda) = e^{\frac{\Delta\tau U}{2}} ; \quad (1.16)$$

$$e^{-\Delta\tau \left[U \left(\hat{n}_{i,l,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i,l,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \right]} = e^{-\Delta\tau \frac{U}{4}} \frac{1}{2} \sum_{x_{i,l}=\pm 1} e^{\lambda x_{i,l} (\hat{n}_{i,l,\uparrow} - \hat{n}_{i,l,\downarrow})} \quad (1.17)$$

Ces transformations sont exactes dans la mesure où un nombre infini d'itérations Monte-Carlo sont faites. Le champ $x_{i,l}$ est couplé au spin du fermion sur le site i au temps imaginaire l selon l'axe z . C'est ce que l'on nomme les *champs de Hubbard-Stratonovitch*. Ils peuvent correspondre à des bosons fictifs à l'origine de l'interaction de Hubbard [37].

Trace sur les fermions

Une fois la transformation de Hubbard-Stratonovitch effectuée, on peut évaluer la fonction de partition:

$$Z \equiv \sum_{\{x_{i,l}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} \text{Tr} \left[\prod_{l=1}^{N_\tau} e^{\sum_{i,j} \Delta\tau c_{i,l,\sigma}^\dagger K_{i,j} c_{j,l,\sigma}} e^{\sum_{i,j} c_{i,l,\sigma}^\dagger (V_{i,j})_l^\sigma c_{j,l,\sigma}} \right] \quad (1.18)$$

$$K_{i,j} = -t \text{ si } i \text{ et } j \text{ sont premiers voisins et } 0 \text{ autrement} \quad (1.19)$$

$$(V_{i,j})_l^\sigma = \delta_{i,j} \left[\sigma \lambda x_{i,l} + \Delta\tau \left(\mu - \frac{U}{2} \right) \right] \quad (1.20)$$

On peut évaluer la trace avec des méthodes hamiltoniennes [38] en choisissant la bonne base. On a finalement:

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} \det [\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma \mathbf{B}_{N_\tau-1}^\sigma \cdots \mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma] \quad (1.21)$$

où \mathbf{I} est la matrice identité et les matrices \mathbf{B}_l^σ de taille $N \times N$ sont:

$$\mathbf{B}_l^\sigma = e^{-\Delta\tau K} e^{V_l^\sigma} \quad (1.22)$$

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

Pour calculer la valeur moyenne d'une observable (1.6) avec les méthodes développées dans les sections précédentes, il faut utiliser l'équation suivante:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \hat{O} \prod_{\sigma=\pm 1} \prod_l^{N_\tau} D_l^\sigma (\{x_{i,l}\})}{\sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_{\sigma=\pm 1} \prod_l^{N_\tau} D_l^\sigma (\{x_{i,l}\})} \quad (1.23)$$

$$= \frac{\sum_{\{x_{i,l}\}} \langle \hat{O} \rangle_{\{x\}}^0 \pi (\{x_{i,l}\})}{\sum_{\{x_{i,l}\}} \pi (\{x_{i,l}\})} \quad (1.24)$$

$$\langle \hat{O} \rangle_{\{x\}}^0 = \frac{\text{Tr} \hat{O} \prod_{\sigma=\pm 1} \prod_l^{N_\tau} D_l^\sigma (\{x_{i,l}\})}{\text{Tr} \prod_{\sigma=\pm 1} \prod_l^{N_\tau} D_l^\sigma (\{x_{i,l}\})} \quad (1.25)$$

et

$$\pi (\{x_{i,l}\}) = \prod_{\sigma=\pm 1} \det [\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma \mathbf{B}_{N_\tau-1}^\sigma \cdots \mathbf{B}_1^\sigma] \quad (1.26)$$

$$D_l^\sigma = e^{\Delta\tau \sum_{i,j} c_{i,l,\sigma}^\dagger K_{i,j} c_{j,l,\sigma}} \sum_{\hat{n}_{i,l,\sigma}} e^{\lambda \sigma x_{i,l} + \Delta\tau \left(\mu - \frac{U}{2} \right)} \quad (1.27)$$

Avec ces informations, on peut calculer toutes les observables d'intérêts.

Échantillonnage Monte-Carlo

Le réseau espace-temps comporte 2^{NN_τ} configurations possibles du champ de Hubbard-Stratonovitch. Les temps requis pour calculer l'équation (1.24) numériquement sont exponentiellement longs. Donc, ils deviennent rapidement inaccessibles. C'est ici qu'intervient la méthode Monte-Carlo. La méthode utilisée est une variation de l'algorithme de Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller et Teller. Cet algorithme calcule la somme sur les champs de Hubbard-Stratonovitch avec une marche aléatoire dans l'espace des champs $\{x_{i,l}\}$. On s'assure de cette façon de calculer les contributions qui ont le plus grand poids statistique. La quantité

$$\prod_{\sigma=\pm 1} \det [\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma \mathbf{B}_{N_\tau-1}^\sigma \cdots \mathbf{B}_1^\sigma] \quad (1.28)$$

1.3. RÉOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

est analogue à un poids de Boltzmann dans le calcul de (1.21) et sert à déterminer le poids statistique de chaque configuration. Dans les méthodes Monte-Carlo classiques, le poids de Boltzmann est toujours positif. Alors qu'ici, comme poids de Boltzmann $P(\{x_{i,l}\})$, on utilisera la valeur absolue de (1.28). On considérera le signe de (1.28) en l'incluant dans l'observable:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\{x_{MC}\}} \langle \hat{O} \rangle_{\{x\}}^0 s(\{x_{i,l}\})}{\sum_{\{x_{MC}\}} s(\{x_{i,l}\})} \quad (1.29)$$

$$s(\{x_{i,l}\}) = 1 \times \text{sgn} \left(\prod_{\sigma=\pm 1} \det [\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma \mathbf{B}_{N_\tau-1}^\sigma \cdots \mathbf{B}_1^\sigma] \right) \quad (1.30)$$

Lorsque $s(\{x_{i,l}\})$ oscille fréquemment entre +1 et -1, le calcul devient moins précis. Ce *problème de signe* apparaît surtout dans certains domaines de paramètres, notamment pour de grandes valeurs de U et pour les petites valeurs de dopage. Bien qu'il dépende de la transformation Hubbard-Stratonovitch utilisée, aucune n'a été trouvée pour laquelle il est possible d'éliminer ce problème [39].

En pratique, les calculs sont faits de la façon suivante. D'abord, on initialise les valeurs des champs de Hubbard-Stratonovitch. Lors de l'initialisation, on génère une configuration aléatoire des champs de Hubbard-Stratonovitch. Ensuite, on fait le balayage dans le réseau espace-temps de la même façon que lors du calcul, à l'exception qu'on ne conserve pas de résultats pour le moyennage statistique. Cette étape permet la *thermalisation*. Par la suite, on commence les calculs. On évalue la fonction de Green pour chaque site i, j, l ;

$$G^\sigma(l, l)_{ij} = \left[\frac{1}{1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau}^\sigma \cdots B_{N_1}^\sigma} \right]_{i,j} \quad (1.31)$$

Pour chaque site i, j, l , on détermine selon une certaine probabilité la possibilité de changer une valeur de champ $x_{i,l} \rightarrow -x_{i,l}$ ⁶. Si le changement est accepté, on recalcule la fonction de Green. Ensuite, on passe au site suivant. Il est possible d'extrapoler la fonction de Green pour une tranche de temps supplémentaire avec la *formule d'enroulement*:

⁶On se rappelle que dans la situation étudiée, $x_{i,l} = \pm 1$

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

$$G^\sigma(l+1, l+1)_{ij} = \left(B_l^\sigma G^\sigma(l, l) B_l^{\sigma^{-1}} \right)_{ij} \quad (1.32)$$

mais cette façon de calculer, bien que plus rapide, est moins stable numériquement. Pour stabiliser les calculs, on évalue avec (1.31) la fonction de Green après un certain nombre de tranches de temps. L'étape suivante consiste à calculer les observables et à calculer la valeur moyenne Monte-Carlo et l'erreur statistique (ou erreur Monte-Carlo). L'erreur Monte-Carlo sur la moyenne de L mesures est:

$$\Delta O = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (O_i - \langle \hat{O} \rangle)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.33)$$

Les paramètres

Lorsqu'on fait des simulations Monte-Carlo pour le modèle de Hubbard, il existe un certain nombre de paramètres sur lesquels on peut jouer pour ajuster la précision ou choisir la région de paramètres physiques que l'on veut explorer. Le nombre de mesures, le réchauffement, $\Delta\tau$, par exemple permettent de choisir la précision, tandis que la température, le potentiel chimique et l'interaction U permettent de choisir la région physique à explorer.

En premier lieu, les paramètres de précision sont abordés. Le nombre de mesures correspond en fait au nombre d'itérations Monte-Carlo. Plus ce nombre d'itérations est grand, plus l'erreur statistique est petite et plus le résultat est exact. Ensuite, $\Delta\tau$ est le paramètre provenant de la décomposition de Trotter. Il va être choisi suffisamment petit pour que l'erreur systématique résultante soit plus petite ou de l'ordre de l'erreur statistique. Ou encore, le même calcul sera refait en faisant varier $\Delta\tau$ pour extrapoler vers $\Delta\tau \rightarrow 0$. Ce choix correspond à celui du nombre de tranches de temps. En choisissant un paramètre du programme, multiple du nombre de tranches de temps, on choisit à quel intervalle de temps on calcule la fonction de Green avec (1.31). Le réchauffement correspond à un nombre d'itérations d'initialisation, qui assure que la configuration initiale des champs de Hubbard-Stratonovitch est thermalisée, c'est-à-dire est typique pour la température et le remplissage dont il est

1.3. RÉOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

question. Il y a aussi les problèmes de *collement*. Ces problèmes correspondent au fait que, pour certains paramètres physiques⁷, la simulation risque de n'explorer qu'un sous-ensemble des $2^{N N_\tau}$ configurations possibles du champ de Hubbard-Stratonovitch. En faisant plusieurs simulations différentes qu'on moyenne par la suite, on évite en partie ce problème. Il est aussi possible de diminuer le *collement* en faisant des mises à jour particulières des champs de Hubbard-Stratonovitch [40].

Les paramètres physiques sur lesquels l'utilisateur a le contrôle⁸ sont la température, le potentiel chimique, la valeur de l'interaction, la valeur de l'intégrale de saut selon la direction⁹, la taille du réseau¹⁰, le nombre de vecteurs d'onde. L'intérêt ici a été de cartographier la fonction $E(T, \mu(n), U)$ pour de faibles valeurs d'interaction, $U \leq 4$, dans le but de valider l'approche autocohérente à deux particules et la méthode de théorie de perturbation interamas.

1.3.2 La méthode Autocohérente à Deux Particules (ACDP)

Cette méthode [41] est construite selon les lois de conservation, le principe d'exclusion de Pauli et certaines règles de somme. Elle respecte notamment le théorème de Mermin-Wagner. Cette méthode est limitée à des couplages faibles à intermédiaires (typiquement $U \leq 4$) et à température finie. Elle permet de faire des calculs pour des réseaux de n'importe quelle taille. Dans cette étude, pour fins de comparaison avec les résultats Monte-Carlo Quantique, on s'est limité aux réseaux de taille finie.

Fonction de Green à une particule et self-énergie

On définit la fonction de Green ainsi:

$$G_\sigma(1, 2) = G_\sigma(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) \equiv -\langle T_\tau c_{1,\sigma}(\tau_1) c_{2,\sigma}^\dagger(\tau_2) \rangle \quad (1.34)$$

⁷Notamment à U élevé.

⁸Les variables indépendantes.

⁹Ce qui peut permettre d'établir une anisotropie.

¹⁰Et incidemment la dimensionnalité, 1D ou 2D, si on choisit la taille 1 dans l'une des deux directions x ou y .

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

où T_τ est l'opérateur d'ordre chronologique et τ le temps imaginaire. La transformée de Fourier-Matsubara est:

$$G_\sigma(\mathbf{k}; ik_n) = \sum_{\mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} \int_0^\beta d\tau_1 e^{ik_n\tau_1} G_\sigma(\mathbf{r}_1, \tau_1; 0, 0) \quad (1.35)$$

$$G_\sigma(\mathbf{r}_1, \tau_1) = \frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} e^{-ik_n\tau_1} G_\sigma(ik_n, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} \quad (1.36)$$

La self-énergie obéit à l'équation de Dyson:

$$G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)} \quad (1.37)$$

Susceptibilité de spin et de charge

On exprime ici les opérateurs densité et spin en termes des opérateurs de nombre:

$$\hat{\rho}_i(\tau) \equiv \hat{n}_{i,\uparrow}(\tau) + \hat{n}_{i,\downarrow}(\tau) \quad (1.38)$$

$$\hat{S}_i^z \equiv \hat{n}_{i,\uparrow}(\tau) - \hat{n}_{i,\downarrow}(\tau) \quad (1.39)$$

L'évolution temporelle dans ce contexte s'effectue en temps imaginaire selon la représentation d'Heisenberg. Les susceptibilités de charge et de spin peuvent se calculer à partir de perturbations appliquées en temps imaginaire. La réponse linéaire d'un spin en présence d'un champ extérieur selon z :

$$e^{-\beta\hat{H}} \rightarrow e^{-\beta\hat{H}} T_\tau \exp \left[\int d\tau \hat{S}_i^z(\tau') \phi_i^S(\tau') \right] \quad (1.40)$$

conduit à

$$\chi_{sp}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau_i - \tau_j) = \frac{\delta \langle \hat{S}_j^z(\tau_j) \rangle}{\delta \phi_i^S(\tau_i)} = \langle T_\tau \hat{S}_i^z(\tau_i) \hat{S}_j^z(\tau_j) \rangle \quad (1.41)$$

De même pour la susceptibilité de charge:

1.3. RÉOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

$$\chi_{ch}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau_i - \tau_j) = \frac{\delta \langle \hat{\rho}_j(\tau_j) \rangle}{\delta \phi_i^{\rho}(\tau_i)} = \langle T_{\tau} \hat{\rho}_i^z(\tau_i) \hat{\rho}_j^z(\tau_j) \rangle - n^2 \quad (1.42)$$

où $n \equiv \langle \hat{\rho}_i \rangle$ correspond au remplissage précédemment défini et où les dérivées sont des dérivées fonctionnelles. Ces fonctions décomposées en fréquences de Matsubara requièrent des sommes seulement sur les fréquences de Matsubara paires. La limite des hautes fréquences de ces quantités possède un terme dominant en $\frac{1}{q_n^2}$ ce qui implique qu'il n'y a pas de discontinuité dans ces fonctions pour $\tau \rightarrow 0$ contrairement aux propriétés à une particule.

L'approche non-perturbative

On réduit le problème à celui de deux fonctions de corrélation à deux particules, soit la double occupation $\langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle$ et $\langle \hat{n}_{\uparrow}^2 \rangle = \langle \hat{n}_{\downarrow}^2 \rangle = \langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle = \frac{n}{2}$. Cette dernière est déterminée par le principe d'exclusion de Pauli. Mais il faut déterminer la valeur de la double occupation.

Le principe d'exclusion de Pauli¹¹ précédemment cité implique les identités suivantes:

$$\langle (\hat{n}_{i,\uparrow} \pm \hat{n}_{i,\downarrow})^2 \rangle = n \pm 2 \langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle \quad (1.43)$$

qui correspondent en fait à $\langle \hat{\rho}_i^2 \rangle$ et $\langle \hat{S}_z^2 \rangle$ respectivement. Les susceptibilités (1.41) et (1.42) doivent correspondre aux équations (1.43) lorsque $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$ et que $\tau = 0$. On y puise alors des règles de somme pour les susceptibilités:

$$\chi_{sp}(1, 1^+) = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{iq_n} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = 2 \langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\uparrow} \rangle - 2 \langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle = n - 2 \langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle \quad (1.44)$$

$$\chi_{ch}(1, 1^+) = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{iq_n} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = 2 \langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\uparrow} \rangle + 2 \langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle - n^2 = n + 2 \langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle - n^2 \quad (1.45)$$

Par invariance sous translation, on abandonne l'indice i . De ces équations et de la

¹¹En d'autres termes, les relations d'anti-commutation.

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

résolution de l'analogue de l'équation de Bethe-Salpeter dans le canal particule-trou, on trouve les équations suivantes:

$$n + 2\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle - n^2 = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{1}{2} U_{ch} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (1.46)$$

$$n - 2\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (1.47)$$

Avec la relation:

$$U_{sp} = \frac{\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle}{\langle \hat{n}_\uparrow \rangle \langle \hat{n}_\downarrow \rangle} U \quad (1.48)$$

on obtient un système d'équations autocohérentes impliquant la double occupation, une quantité à deux particules. La valeur de U_{ch} est déterminée avec l'équation (1.46). Cette approximation s'apparente à celle suggérée par Singwi *et al.* [42, 43]. Il s'agit ici en fait d'une généralisation de l'approximation par champ local. De plus, il n'intervient directement aucune quantité à une particule. Cette méthode, comme il a été montré, intègre le principe d'exclusion de Pauli, ce qui implique que cette méthode le respectera. De plus, elle respecte le théorème de Mermin-Wagner en deux dimensions [41].

Puisque les valeurs que peuvent prendre la double occupation sont bornées entre 0 et $n^2/4$, cela impose des contraintes sur la règle de somme de l'équation (1.44). Près d'une transition de phase magnétique, la composante de fréquence de matsubara nulle pour la susceptibilité de spin prend la forme suivante:

$$\chi_{sp}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, 0) \sim \frac{1}{q^2 + \xi^{-2}} \quad (1.49)$$

où ξ est la longueur de corrélation. Près du maximum, la susceptibilité est de l'ordre de ξ^2 pour les fréquences nulles, alors que les autres composantes sont de l'ordre de $1/(2\pi T)^2$. Ces dernières contributions étant beaucoup petites que celle à fréquence nulle, la seule façon pour que:

$$T \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \xi^{-2}} \quad (1.50)$$

demeure finie en deux dimensions ($d = 2$), c'est d'avoir une valeur de $\xi < \infty$. C'est ce qu'on entend par théorème de Mermin-Wagner, la longueur de corrélation en deux dimension doit demeurer finie.

Lois de conservation de Kadanoff-Baym

Dans le cas des méthodes diagrammatiques, il existe deux façons d'obtenir la thermodynamique d'un modèle. La première est de calculer le potentiel grand canonique $\Omega(T, \mu, U) = -k_B T \ln Z$ et de déduire les autres quantités telles que l'énergie et la double occupation avec les relations thermodynamiques habituelles. La seconde consiste à calculer la fonction de Green à une particule et de calculer les autres quantités à partir de cette dernière. Le potentiel grand canonique et la fonction de Green peuvent être exprimés chacun par une série de diagrammes [44]. Si on néglige des contributions, dans quelle mesure les énergies, par exemple, calculées avec le potentiel grand canonique d'une part et avec la fonction de Green d'autre part correspondront-elle ?

Gordon Baym et P. Kadanoff ont suggéré [45, 46] une technique pour respecter cette condition ainsi que certaines lois de conservations. Par contre, certaines quantités importantes comme la double occupation proviennent de deux sources diagrammatiques différentes selon qu'on les calcule avec $\Omega(T, \mu, U)$ ou avec les fonctions de réponses. Ces deux calculs ne donneront possiblement pas les mêmes résultats. De plus, le principe d'exclusion de Pauli n'est pas respecté en général ; $\langle \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\uparrow} \rangle \neq \langle \hat{n}_{i,\uparrow} \rangle$. Et finalement, l'approche de Baym et Kadanoff offre une infinité de théories qui satisfont l'uniformité thermodynamique¹² et ne donnent ainsi aucun indice sur le choix des contributions à sommer.

Pour la méthode autocohérente à deux particules, une méthode non-perturbative, il n'est pas garanti qu'une quantité thermodynamique, comme $\mu(T, n)$ par exemple, donne le même résultat si on calcule cette fonction à partir de $n(T, \mu) = \text{Tr}G$ ou à

¹²Voir chapitre 2 pour une définition d'*uniformité thermodynamique*.

1.3. RÉOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

partir de $E(T, n) = \text{Tr} \left(\epsilon + \frac{\Sigma}{2} \right) G$ [41]. Ceci constitue un désavantage considérable par rapport aux méthodes qui respectent les règles suggérées par Kadanoff et Baym. C'est ce qu'on propose de vérifier dans cette étude. En même temps, il sera vérifié laquelle des deux méthodes correspond le mieux avec les résultats MCQ, ce qui permettra une certaine discrimination des quantités erronées ou une mesure de la précision de l'approximation.

1.3.3 Méthode conservative à la Kadanoff-Baym, *Fluctuation Exchange*

Cette méthode a été suggérée par Bickers et Scalapino en 1989 [47]. Il s'agit de calculer la self-énergie dans les canaux particule-trou et particule-particule à partir de trois classes de diagrammes. On choisit les diagrammes de telle sorte que les fluctuations de charge, de spin et de paires sont présent en compte.

La self-énergie a la forme suivante:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}(ik_n, \mathbf{k}) = & \frac{1}{N} \sum_{iq_n, \mathbf{q}} (G(i(k_n - q_n), \mathbf{k} - \mathbf{q})V^{(2)}(iq_n, \mathbf{q}) + G(i(k_n - q_n), \mathbf{k} - \mathbf{q})V^{(pt)}(iq_n, \mathbf{q}) \\ & + G(-i(k_n - q_n), -(\mathbf{k} - \mathbf{q}))V^{(pp)}(iq_n, \mathbf{q})) \end{aligned} \quad (1.51)$$

où:

$$V^{(2)}(iq_n, \mathbf{q}) = U^2 \chi_{p-t}(iq_n, \mathbf{q}) \quad (1.52)$$

$$\begin{aligned} V^{(pt)}(iq_n, \mathbf{q}) = & \frac{1}{2} U^2 \chi_{pt}(iq_n, \mathbf{q}) \left[\frac{1}{1 + U \chi_{pt}(iq_n, \mathbf{q})} - 1 \right] \\ & + \frac{3}{2} U^2 \chi_{pt}(iq_n, \mathbf{q}) \left[\frac{1}{1 - U \chi_{pt}(iq_n, \mathbf{q})} - 1 \right] \end{aligned} \quad (1.53)$$

$$V^{(pp)}(iq_n, \mathbf{q}) = -U^2 \chi_{pp}(iq_n, \mathbf{q}) \left[\frac{1}{1 + U \chi_{pp}(iq_n, \mathbf{q})} - 1 \right] \quad (1.54)$$

et finalement:

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

$$\chi_{pt}(iq_n, \mathbf{q}) = -\frac{\beta}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} G(i(k_n + q_n), \mathbf{k} + \mathbf{q}) G(ik_n, \mathbf{k}) \quad (1.55)$$

$$\chi_{pp}(iq_n, \mathbf{q}) = -\frac{\beta}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} G(i(k_n + q_n), \mathbf{k} + \mathbf{q}) G(-ik_n, -\mathbf{k}) \quad (1.56)$$

Les résultats présentés dans le chapitre 3 ont été calculés par Bumsoo Kyung. Seuls des résultats de double occupation seront présentés.

1.3.4 Théorie de perturbation interamas (TPI)

Cette méthode [48] consiste à effectuer des diagonalisations exactes sur de petits réseaux, nommés amas. Ensuite, par le biais de la théorie des perturbations en couplage fort ($U \gg t$), on génère un réseau de taille infinie avec des amas, tel qu'illustré à la figure 1.1. Cette méthode a l'avantage d'être exacte à $t/U = 0$ ainsi qu'à $U/t = 0$. C'est une méthode qui permet de faire des calculs à partir des températures nulles.

D'abord, on divise le réseau en amas composés de $L \times M = N$ sites. L et M n'ont pas besoin d'être égaux. Par l'entremise de diagonalisations exactes dans l'amas, on calcule la fonction de Green à une particule $G(z)_{ij}$ avec des conditions aux limites ouvertes. En considérant l'intégrale de saut t_0 qui lie les sous-réseaux de manière perturbative, on obtient la fonction de Green $G^\sigma(\mathbf{k}, \omega)$. Ainsi, les effets à courte portée sont traités exactement alors que les effets à longue portée sont traités par l'intermédiaire de la théorie de perturbation ; cela constitue un avantage considérable comparativement à d'autres méthodes.

On exprime l'hamiltonien par deux termes:

$$H = \sum_{\mathbf{R}} H_{\mathbf{R}}^0 + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \sigma} V^{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} c_{\mathbf{R}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}', \sigma} \quad (1.57)$$

où \mathbf{R} indique la position de l'amas, $V^{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}$ correspond à l'intégrale de saut interamas et les indices a et b indique la position du site dans l'amas \mathbf{R} et \mathbf{R}' respectivement. Dans le cas où on utilise un amas composé d'un seul site, H_0 sera constitué de l'hamiltonien

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

atomique. Dans la situation présente, les $H_{\mathbf{R}}^0$ sont l'hamiltonien de hubbard cité plus haut pour l'amas \mathbf{R} .

En appliquant la théorie de perturbations en couplage fort aux amas de bases. pour lesquels les diagonalisations exactes ont été calculées, on obtient la fonction de Green:

$$\hat{\mathcal{G}}(\omega) = \frac{\hat{G}(\omega)}{1 - \hat{V}\hat{G}(\omega)} \quad (1.58)$$

où $\hat{\mathcal{G}}$, \hat{G} et \hat{V} représentent les matrices $\mathcal{G}_{a,b}^{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\omega)$, $\delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}G_{a,b}(\omega)$ et $V_{a,b}^{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ respectivement. Par invariance sous translation du super-réseau, il est possible d'exprimer la fonction de Green \mathcal{G} et le terme V en fonction des vecteurs de la zone de Brillouin \mathbf{Q} du super-réseau plutôt que par l'indice d'amas. Ainsi on exprime la fonction de Green:

$$\mathcal{G}_{a,b}(\mathbf{Q}, \omega) = \left(\frac{\hat{G}(\omega)}{1 - \hat{V}(\mathbf{Q})\hat{G}(\omega)} \right)_{a,b} \quad (1.59)$$

où:

$$\hat{V}(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{R}} V_{a,b}^{0,\mathbf{R}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \quad (1.60)$$

Cette fonction de Green est exprimée dans les deux espaces à la fois, soit l'espace réel dans l'amas et l'espace réciproque dans le réseau d'amas. L'application de la théorie de perturbations aux amas brise l'invariance sous translation. De sorte qu'il faut exprimer la fonction de Green dans l'espace réciproque à partir de deux vecteurs d'ondes:

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \frac{1}{L} \sum_{s=1}^L \sum_{a,b=1}^L \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}_s) \mathcal{G}_{a,b}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_b} \quad (1.61)$$

où \mathbf{q}_s appartient au super-réseau réciproque et à la zone de Brillouin du réseau initial. Ensuite, on pose que le terme $\mathbf{q}_s = 0$ représente la fonction de Green pour avoir l'invariance sous translation:

1.3. RÉOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{L} \sum_{a,b=1}^L \mathcal{G}_{a,b}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \quad (1.62)$$

Il est possible de calculer l'énergie et la double occupation à partir de la fonction de Green à un électron:

$$E(T=0, n) = -i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} (\omega + \epsilon_{\mathbf{k}}) G_{\uparrow}(\omega + i0^+ \text{sign}(\omega - \mu)) \quad (1.63)$$

La fonction de Green retardée est dans ce cas $G_{\uparrow}^R(\omega) = G_{\uparrow}(\omega + i0^+)$ et on suppose que $G_{\uparrow} = G_{\downarrow}$. Si on exprime la fonction de Green avec sa représentation spectrale:

$$G(\mathbf{k}, z) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{z - \omega - \mu} \quad (1.64)$$

il est possible d'intégrer dans le plan complexe supérieur et de trouver une expression pour l'énergie qui dépend du poids spectral:

$$E = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} (\omega + \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) A(\mathbf{k}, \omega) \quad (1.65)$$

Avec la définition de la fonction de Green causale:

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, t) = -i \langle \Omega | T c_{\mathbf{k},\sigma}(0) c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}(t) | \Omega \rangle, \quad (1.66)$$

il est possible d'exprimer l'énergie cinétique:

$$\begin{aligned} E_{\text{cin}} &= 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \epsilon_{\mathbf{k}} \langle \Omega | c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\uparrow} | \Omega \rangle \\ E_{\text{cin}} &= 2i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \epsilon_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega 0^+} G_{\uparrow}(\omega + i0^+ \text{sign}(\omega - \mu)) \\ &= 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \epsilon_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega) \end{aligned} \quad (1.67)$$

$$(1.68)$$

Il est aisé ensuite de déduire la valeur de la double occupation en soustrayant l'énergie cinétique de l'énergie totale:

1.3. RÉSOLUTION À COUPLAGE NON-NUL

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{E_{\text{pot}}}{U} = \frac{1}{U} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} (\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) A(\mathbf{k}, \omega) \quad (1.69)$$

Il ne reste plus qu'à déterminer le potentiel chimique. Dans les calculs, de façon analogue à la méthode ACDP, on fixe le remplissage et on en déduit le potentiel chimique. Pour la théorie de perturbation interamas, on utilise la formule:

$$n = 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\mu} \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega - \mu) \quad (1.70)$$

En utilisant le poids spectral calculé avec la TPI, on peut évaluer les intégrales précédentes et ainsi calculer l'énergie totale et la double occupation.

Les équations précédentes sont celles pour $T = 0$, on peut aisément généraliser aux températures finies:

$$E = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} (\omega + \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) A(\mathbf{k}, \omega) n(\omega) \quad (1.71)$$

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{U} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} (\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) A(\mathbf{k}, \omega) n(\omega) \quad (1.72)$$

$$n = 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\mu} \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega - \mu) n(\omega) \quad (1.73)$$

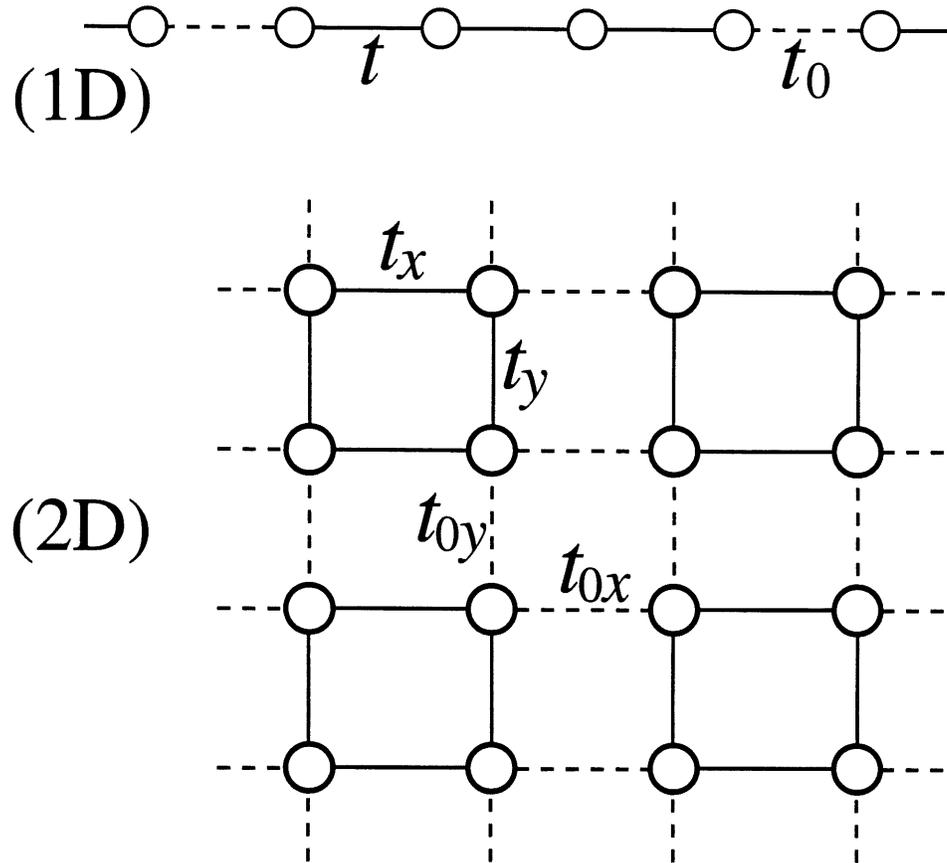


Figure 1.1: Figure illustrant la théorie de perturbation interamas [48]

Chapitre 2

Thermodynamique du modèle de Hubbard et uniformité thermodynamique

L'étude thermodynamique du modèle de Hubbard est pertinente à plusieurs niveaux. D'abord elle permet un rapprochement avec des résultats expérimentaux, comme la chaleur spécifique par exemple. Ensuite, elle peut conduire à une meilleure compréhension de la physique de ce système. Il faut cependant vérifier l'uniformité thermodynamique et la précision de chacune des méthodes de calcul approximatif utilisées. Ainsi la première section montrera comment vérifier l'uniformité thermodynamique. La seconde section exposera les problèmes rencontrés lors des calculs de diverses quantités thermodynamiques pour chacune des méthodes étudiées.

2.1 Test d'uniformité et les relations de Maxwell

Pour établir les relations de Maxwell nécessaires à l'analyse thermodynamique, il faut d'abord identifier les variables du problème. Dans le contexte du modèle de Hubbard, le volume est constant et on ne s'intéresse pas ici à la pression. Ensuite, le champ magnétique sera considéré nul dans cette étude. Ainsi, on identifie l'énergie E , la

2.1. TEST D'UNIFORMITÉ ET LES RELATIONS DE MAXWELL

$n(T, \mu) = \text{Tr} [G(T, \mu)]$	$E = \text{Tr} \left[\left(\epsilon + \frac{\Sigma}{2} \right) G(T, n) \right]$
$S(T, n) = - \int_0^n \left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} dn'$	$S(T, n) = \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right) dT'$
$E(T, n) - TS(T, n) = \int_0^n \mu(T, n') dn'$	$\mu(T, n) = - \left(\frac{\partial (E(T, n) - TS(T, n))}{\partial n} \right)_T$

Tableau 2.1: Tableau illustrant les deux approches indépendantes pour ACDP pour la thermodynamique. Si les calculs des quantités de droite donnent les mêmes résultats que pour celles de gauche, il y a uniformité thermodynamique

température T , le potentiel chimique μ , le remplissage (ou la densité) n ¹ et finalement l'entropie S comme variables thermodynamiques. Pour obtenir la thermodynamique du système, il faut choisir deux variables indépendantes et calculer les trois autres.

2.1.1 Uniformité thermodynamique et lois de conservation de Kadanoff-Baym

Le test d'uniformité permettra de vérifier l'uniformité thermodynamique:

Définition: Uniformité thermodynamique

Il y a uniformité thermodynamique si toutes les manières indépendantes possibles de calculer une même quantité thermodynamique donnent le même résultat.

Dans le cas des méthodes diagrammatiques, le problème se pose de la façon suivante. On peut calculer, disons, $n(T, \mu)$ directement à l'aide d'une somme infinie de diagrammes. On peut aussi arriver au même résultat par une autre route. On peut calculer $\Omega(T, \mu)$ avec une autre série de diagrammes, puis calculer $n(T, \mu)$ en dérivant $\Omega(T, \mu)$. Le résultat de ces deux calculs ne sera identique que si les deux séries infinies de diagrammes sont choisies de telle sorte que l'uniformité thermodynamique soit respectée. Baym et Kadanoff ont démontré comment parvenir à ce résultat [45, 46].

L'approche ACDP n'utilise pas les règles suggérées par Baym et Kadanoff. Ainsi,

¹Pour distinguer du nombre de sites N le remplissage sera désigné par $n = 1 - \delta$, où δ représente le dopage aux trous.

2.1. TEST D'UNIFORMITÉ ET LES RELATIONS DE MAXWELL

l'uniformité thermodynamique devra être vérifiée (tableau 2.1). La correspondance entre les diverses fonctions thermodynamiques calculées par les deux chemins qui seront identifiés donnera une évaluation de l'exactitude de la méthode.

2.1.2 Potentiels thermodynamiques

En utilisant la relation thermodynamique suivante:

$$dE = TdS + \mu dn, \quad (2.1)$$

on remarque que si les deux variables choisies étaient l'entropie et le remplissage, on pourrait obtenir facilement toute l'information sur la thermodynamique en calculant $E(S, n)$. On trouverait T et μ de la façon suivante:

$$\left(\frac{\partial E(S, n)}{\partial S} \right)_n = T; \quad \left(\frac{\partial E(S, n)}{\partial n} \right)_S = \mu \quad (2.2)$$

Dans ce cas, toutes les variables thermodynamiques, E, S, μ, T, n sont connues. Cependant, lorsqu'on calcule E avec les méthodes de résolution considérées dans ce projet, c'est plutôt $E(T, n)$ ou $E(T, \mu)$ qu'on obtient. Autrement dit, les deux variables indépendantes seront T et n , ou T et μ . Si on choisit T et μ comme variables indépendantes, le potentiel thermodynamique nécessaire pour retrouver toutes les quantités thermodynamiques n'est pas l'énergie mais plutôt le potentiel grand canonique:

$$d\Omega(T, \mu) = d(E - TS - \mu n) = -SdT - nd\mu \quad (2.3)$$

On exprime ainsi le potentiel grand canonique à l'aide de la mécanique statistique:

$$\Omega(T, \mu) = -k_B T \ln \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{n})} \right] \quad (2.4)$$

qui permet bel et bien de vérifier que:

$$n = - \left(\frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_T = \langle \hat{n} \rangle \quad (2.5)$$

Ainsi que:

$$E = \Omega - TS + \mu n; \quad (2.6)$$

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial T} \right)_\mu \quad (2.7)$$

Avec une approche diagrammatique, $\Omega(T, \mu)$ est le résultat d'une somme infinie de diagrammes. Aussitôt cette somme faite, il ne resterait plus qu'à calculer toutes les autres quantités avec les équations (2.5)-(2.7) pour avoir résolu toute la thermodynamique. Par contre, il n'est pas toujours possible de calculer $\Omega(T, \mu)$. C'est plutôt l'énergie et le potentiel chimique qu'on obtient par les méthodes présentes. Plus exactement, il est possible de calculer:

$$\mu(T, n) \text{ et } E(T, n) \text{ pour les méthodes analytiques} \quad (2.8)$$

$$n(T, \mu) \text{ et } E(T, \mu) \text{ pour le Monte-Carlo Quantique} \quad (2.9)$$

Des cinq paramètres, le seul qui demeure inconnu est l'entropie. Les sections suivantes montrent comment obtenir cette quantité.

2.1.3 L'entropie par le potentiel chimique

Si on choisit T et n comme variables indépendantes, on calcule $E(T, n)$ et $\mu(T, n)$. Voici comment on peut obtenir l'entropie. Il est d'abord utile d'identifier les conditions initiales suivantes:

$$S(T = 0, n) = 0 \quad \forall n \quad (2.10)$$

De plus, trivialement, l'énergie s'annule lorsqu'il n'y a plus de particules, autrement dit, pour $n = 0$. Ce qui nous conduit aussi à:

2.1. TEST D'UNIFORMITÉ ET LES RELATIONS DE MAXWELL

$$E(T, n = 0) - TS(T, n = 0) = 0 \quad (2.11)$$

Sachant que:

$$d(E - TS) = -SdT + \mu dn \quad (2.12)$$

avec (2.11) on trouve:

$$E(T, n) - TS(T, n) \equiv F(T, n) \quad (2.13)$$

qui est l'énergie libre d'Helmholtz. En utilisant (2.12), on trouve aussi la relation de Maxwell suivante:

$$\left(\frac{\partial^2 F(T, n)}{\partial T \partial n} \right)_{T, n} = \left(\frac{\partial^2 F(T, n)}{\partial n \partial T} \right)_{n, T} = - \left(\frac{\partial S(T, n)}{\partial n} \right)_T = \left(\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T} \right)_n \quad (2.14)$$

En utilisant encore une fois la condition (2.11), on trouve une première façon de calculer l'entropie:

$$S(T, n) = - \int_0^n \left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} dn' \quad (2.15)$$

Comme on peut le remarquer, ce calcul de l'entropie est indépendant du calcul de l'énergie mais dépend directement du calcul du potentiel chimique. Dans le cas des calculs impliquant un choix de T et μ comme variables indépendantes, un développement analogue fait avec (2.3) conduit à la relation de Maxwell:

$$\left(\frac{\partial S(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_T = \left(\frac{\partial n(T, \mu)}{\partial T} \right)_\mu \quad (2.16)$$

et, utilisant $S(T, \mu = -\infty) = 0$, au calcul d'entropie:

$$S(T, \mu) = \int_{-\infty}^{\mu} \left(\frac{\partial n(T, \mu')}{\partial T} \right)_{\mu'} d\mu' \quad (2.17)$$

Il est donc possible de calculer l'entropie. Qui plus est, ce calcul dépend uniquement de $n(T, \mu)$ (ou $\mu(T, n)$) et ne dépend pas explicitement de l'énergie.

2.1.4 Vers le test d'uniformité, l'entropie par la chaleur spécifique

Dans le cas de la méthode ACPD, il existe deux manières indépendantes de calculer l'entropie. Il y a celle déjà trouvée à l'équation (2.15). Aussi, avec l'équation (2.1) et la condition initiale (2.10), on trouve:

$$S(T, n) = \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT' \quad (2.18)$$

qui, de façon complémentaire à (2.15), utilise seulement l'énergie et ne dépend pas explicitement de μ . Vérifier l'uniformité thermodynamique de la méthode ACPD revient, entre autres, à vérifier si (2.15) et (2.18) donnent des résultats identiques.

Il existe au moins deux façons de vérifier l'uniformité thermodynamique. On pourrait vérifier le respect des relations de Maxwell ou encore faire une comparaison directe du calcul de quantités thermodynamiques. La première approche semble plus naturelle que la seconde, mais elle entraîne deux problèmes en pratique. D'une part, ces relations ne sont vérifiées qu'en un point à la fois. D'autre part, les différences entre les deux résultats obtenus ne donnent aucune idée de l'erreur sur les quantités thermodynamiques intermédiaires. Soit la relation de Maxwell suivante:

$$\left(\frac{\partial N}{\partial \beta} \right)_\mu - \frac{\mu}{\beta} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_\beta = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial E}{\partial \mu} \right)_\beta \quad (2.19)$$

Si cette relation de Maxwell est respectée à 1%, cela ne permet pas de connaître l'erreur sur l'entropie ou la chaleur spécifique. C'est pourquoi les comparaisons seront faites directement avec les quantités calculées. On choisira l'énergie en fonction du remplissage et de la température ainsi que le remplissage en fonction du potentiel chimique et de la température, pour des raisons pratiques (plutôt que l'entropie et la chaleur spécifique). L'entropie étant une fonction relativement douce, les différences semblent moins apparentes. Le Monte-Carlo se prête mal au calcul de la chaleur spécifique et donc conséquemment au calcul de l'entropie, car les résultats d'énergie sont entachés d'erreur statistique. Si les deux valeurs d'énergie pour effectuer la dérivée sont prises trop près l'une de l'autre, les erreurs statistiques ont une plus grande influence sur les résultats. Si les deux valeurs d'énergie sont prises trop loin,

2.2. LIMITES DES FAIBLES TEMPÉRATURES ET DES FAIBLES REMPLISSAGES

l'approximation devient trop grossière. De plus, l'énergie et le potentiel chimique en fonction du remplissage et de la température sont des quantités calculées directement, ce qui limite les erreurs numériques.

2.2 Limites des faibles températures et des faibles remplissages

Les simulations MCQ ne permettent pas des calculs à de trop faibles températures. D'une part, pour des températures inférieures à 0.1 t typiquement, les temps de calcul sont extrêmement longs, étant donné qu'il faut considérer des systèmes de grande taille pour limiter les effets de tailles finies. D'autre part, à faible remplissage, la dérivée $\left(\frac{\partial\mu(T, n)}{\partial T}\right)_n$ diverge vers $-\infty$. Il faut donc trouver des moyens d'extraire l'entropie qui est calculée de la façon suivante:

$$S(T, n) = \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'}\right) dT' \text{ ou } S(T, n) = - \int_0^n \left(\frac{\partial\mu(T, n')}{\partial T}\right)'_n dn' \quad (2.20)$$

malgré le fait que les bornes inférieures des deux intégrales soient difficilement accessibles.

2.2.1 L'intégrale de la dérivée du potentiel chimique par rapport à la température

Pour obtenir l'entropie avec le potentiel chimique, il faut intégrer la fonction suivante:

$$S(T, n) = - \int_0^n \left(\frac{\partial\mu(T, n')}{\partial T}\right)'_{n'} dn' \quad (2.21)$$

En principe, bien que l'on puisse calculer $\left(\frac{\partial\mu(T, n)}{\partial T}\right)_n$ à un remplissage aussi petit que possible, la valeur $n = 0$ est impossible à atteindre. Il faut donc calculer cette intégrale à l'aide d'une intégrale impropre. Dans ce cas, on calcule plutôt:

2.2. LIMITES DES FAIBLES TEMPÉRATURES ET DES FAIBLES REMPLISSAGES

$$S(T, n) = - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{\epsilon}^n \left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} dn' \quad (2.22)$$

L'équation qui nous permet de calculer le remplissage est la suivante:

$$n = 2 \frac{T}{N} \sum_{l, k_x, k_y} \frac{1}{ik_l - (\epsilon(k_x, k_y) - \mu) - \Sigma_l} \quad (2.23)$$

Quand, avec cette équation, on calcule numériquement $\left(\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T} \right)_n$, on constate qu'à $n \rightarrow 0$, $\left(\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T} \right)_n \rightarrow -\infty$. En faisant l'approximation que $\left(\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T} \right)_n$ pour $U > 0$ est égale à $\left(\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T} \right)_n$ pour $U = 0$, il est possible d'obtenir une forme analytique pour cette singularité. En effet, pour $n \rightarrow 0$ on s'attend à retrouver la limite $U = 0$ car la valeur de $n > 0$ la plus petite est celle n'impliquant qu'un seul électron², donc un remplissage de $n = 1/N$. Avec un seul électron, il ne peut y avoir de terme d'énergie potentielle, donc on retrouve le cas $U = 0$. Ainsi pour calculer l'entropie pour tout U avec l'équation (2.22) on utilise l'astuce suivante:

$$\begin{aligned} S(T, n) &= - \int_0^n \left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} dn' \\ &= - \int_{\zeta}^n \left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} dn' - \int_0^{\zeta} \left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} dn' \end{aligned} \quad (2.24)$$

Or, on sait que $\left(\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T} \right)_n = \ln(n) - \ln(f(T)) - \frac{T}{f(T)} \frac{\partial f(T)}{\partial T}$ pour $n < \zeta$, tel que $\zeta \rightarrow 0$ (voir annexe C) ; $f(T) \equiv \frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-\beta \epsilon(k_x, k_y)}$. Ainsi:

²Il faut tout de même garder en tête que le nombre de particules n'est pas fixé mais bien fixé en moyenne car on se situe dans l'ensemble grand canonique.

2.2. LIMITES DES FAIBLES TEMPÉRATURES ET DES FAIBLES REMPLISSAGES

$$\begin{aligned}
 S(T, n) &= - \int_{\zeta}^n \left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} dn' - \int_0^{\zeta} \ln(n') dn' - \zeta \left[\ln(f(T)) + \frac{T}{f(T)} \frac{\partial f(T)}{\partial T} \right] \\
 &\quad + \int_0^n \ln(n') dn' - \int_0^n \ln(n') dn' \\
 &= - \int_{\zeta}^n \left[\left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} - \ln(n') \right] dn' - n \ln(n) + n \\
 &\quad - \zeta \left[\ln(f(T)) + \frac{T}{f(T)} \frac{\partial f(T)}{\partial T} \right] \tag{2.25}
 \end{aligned}$$

Le dernier terme de l'équation (2.25) pourrait causer problème à température nulle, mais aucun calcul n'est fait à de trop basses températures. Il existe donc une façon simple de calculer l'entropie avec l'équation (2.22) sans avoir à calculer $\left(\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T} \right)_n$ à $n = 0$.

2.2.2 L'intégrale de la chaleur spécifique

Pour obtenir l'entropie à l'aide de la chaleur spécifique, il faut résoudre l'intégrale suivante:

$$S(T, n) = \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT' \tag{2.26}$$

Or, autant avec les méthodes MCQ qu'avec la méthode ACDP, il est impossible de calculer l'énergie de 0 à T . Il est plutôt possible de le faire à partir d'une valeur finie jusqu'à une valeur arbitrairement grande ($T \rightarrow \infty$) de T . Conséquemment, il semble impossible de calculer l'entropie. Habituellement, on néglige les contributions à température nulle [49, 50]. Il est par contre possible de calculer analytiquement et exactement la valeur de $S(T = \infty, n)$ (annexe D). Ce qui permet donc de déduire la valeur de $S(T, n)$ de la façon suivante:

$$\begin{aligned}
 S(\infty, n) &= \int_0^{\infty} \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT' = 2 \ln \left(\frac{2}{2-n} \right) - n \ln \left(\frac{n}{2-n} \right) \\
 &= \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT' + \int_T^{\infty} \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT' \tag{2.27}
 \end{aligned}$$

2.2. LIMITES DES FAIBLES TEMPÉRATURES ET DES FAIBLES REMPLISSAGES

$$S(T, n) = \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT = 2 \ln \left(\frac{2}{2-n} \right) - n \ln \left(\frac{n}{2-n} \right) - \int_T^\infty \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT' \quad (2.28)$$

Ainsi, en calculant l'intégrale du membre de droite de T à ∞ de l'équation (2.28), connaissant la valeur de l'entropie à l'infini, on peut déduire la valeur de $S(T, n)$ pour n'importe quelle valeur de température accessible.

Chapitre 3

Résultats

Dans ce chapitre seront exposés les résultats obtenus dans le cadre de ce projet. D'abord, on présente les résultats d'autocomparaison de la méthode ACDP. Ensuite, on présente les résultats obtenus avec les deux méthodes analytiques et avec le MCQ. On présente aussi des comparaisons avec des résultats de théorie de perturbation au second ordre en couplage faible (TPSO) ainsi qu'avec des résultats obtenus par la méthode de *Fluctuation Exchange* (FLEX). Et finalement, étant donné les succès de la méthode ACDP, une analyse du comportement de l'entropie et de la double occupation à faible couplage est faite.

3.1 Autocomparaison ACDP et uniformité thermodynamique

Lorsque l'on tente de résoudre un problème à N-corps, on se retrouve face à certains choix. Dans le cas des méthodes diagrammatiques, un mauvais choix de diagrammes peut conduire au non-respect de certaines lois de conservation. En d'autres termes, il se peut que le calcul de mêmes quantités par deux méthodes différentes ne donne pas le même résultat. Kadanoff et Baym ont suggéré une façon de choisir ces diagrammes de manière à s'assurer de respecter l'uniformité thermodynamique. Comme la méthode

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

ACDP n'est pas une méthode diagrammatique, on ne peut pas suivre ces règles. *A priori* cela représente un grand désavantage. Il s'agit de vérifier maintenant si ce désavantage entraîne des conséquences désastreuses.

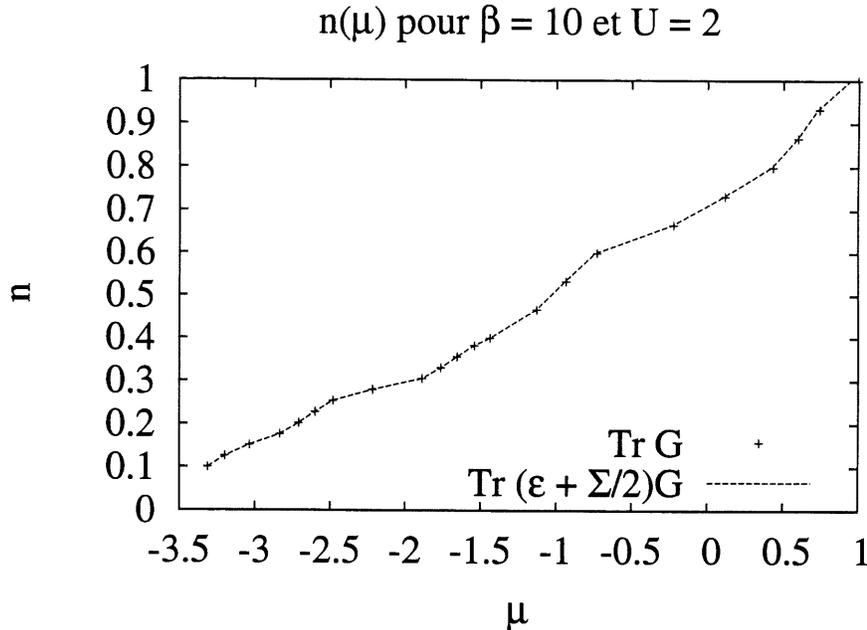


Figure 3.1: Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 2$, $\beta = 10$. Les croix désigne le calcul directe du potentiel chimique alors que la ligne pleine provient du calcul numérique de la dérivée de l'énergie libre par rapport au potentiel chimique à température constante. La reproduction des effets de tailles finies suggère d'une part que les calculs numériques sont précis et d'autre part que les effets de tailles finies apparaissent dans l'énergie.

Autrement dit, le but de cette comparaison est de vérifier l'uniformité thermodynamique pour la méthode ACDP. Puisque la fonction $\mu(T, n)$ est obtenue par une méthode différente de celle utilisée pour $E(T, n)$, on s'attend à ce que chaque fonction thermodynamique calculée avec l'une des méthodes ne corresponde pas avec l'autre. En comparant avec les résultats MCQ, on peut discriminer la meilleure méthode des deux. De plus, la différence entre ces dernières nous donne une évaluation de la précision de la méthode ACDP.

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

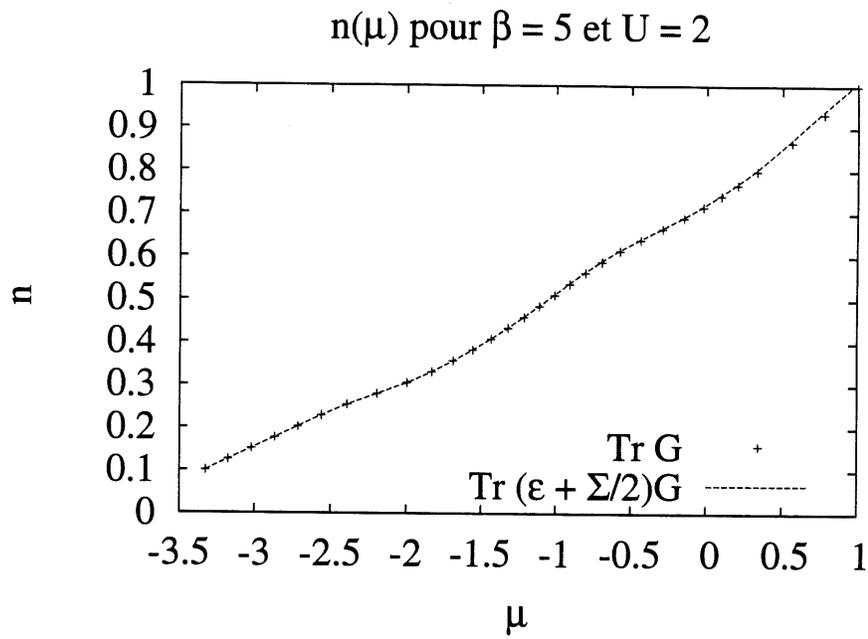


Figure 3.2: Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 2$, $\beta = 5$ En augmentant la température, la correspondance en est que meilleure.

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

Lorsque les comparaisons sont faites, c'est toujours pour des quantités fonctions d'un des deux paramètres indépendants. Soit la quantité est calculée en fonction de la température, soit elle est calculée en fonction du remplissage. En pratique, il est plus simple de calculer en fonction de n (ou μ) à T (ou β) constant. Tous les calculs faits avec ces méthodes utilisent des réseaux carrés de tailles finies de 8 par 8. Cela facilite les comparaisons avec les résultats Monte-Carlo.

Nous avons ici des résultats de comparaisons (voir tableau 2.1) entre $n(\mu)$ calculés avec $\text{Tr}(\epsilon + \Sigma/2)G$ et $\text{Tr}G$ pour $U = 2$ et plusieurs valeurs de températures aux figures 3.1 et 3.2. Pour faire ce calcul, on utilise l'équation 2.18 pour calculer l'entropie avec $\text{Tr}(\epsilon + \Sigma/2)G$. Ensuite, on calcule l'énergie $E(T, n)$ et finalement, on trouve $n(\mu)$ avec:

$$n(\mu) = - \left(\frac{\partial F(T, n)}{\partial \mu} \right)_T \quad (3.1)$$

Dans le cas de $\text{Tr}G(T, \mu)$, $n(\mu)$ est calculée directement.

Comme on peut le constater, la correspondance entre les deux calculs est plutôt remarquable¹. On note que plus le remplissage est faible, plus la correspondance est bonne, car la méthode ACDP devient exacte pour de faibles remplissages. Dans le pire des cas, on observe une différence d'environ 2 ou 3% pour $U = 2$ au demi-remplissage entre les deux méthodes. Cette erreur diminue lorsque la température augmente. C'est ce que montrent les trois graphiques des figures 3.4 - 3.5.

En observant le graphique de la figure 3.1, on voit même qu'il est possible de voir les effets de taille finie dans l'énergie. En effet, les brisures dans la courbe sont dues à de tels effets comme on peut le constater sur la figure 3.6. Le calcul du potentiel chimique à l'aide de l'énergie reproduit parfaitement ces effets, même à des températures aussi faibles que $\frac{1}{10}t$.

Les figures 3.7 - 3.8 montrent qu'à plus fort couplage, l'uniformité thermodynamique est moins bien respectée, avec des erreurs plutôt de l'ordre de 5 à 7 %. Ces résultats accentuent aussi le fait que le désaccord est plus grand près du demi remplissage, et

¹Le terme de Hartree-Fock n'est pas absorbé dans le potentiel chimique sur ces graphiques de sortes qu'à $n = 1$, $\mu = \frac{U}{2}$.

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

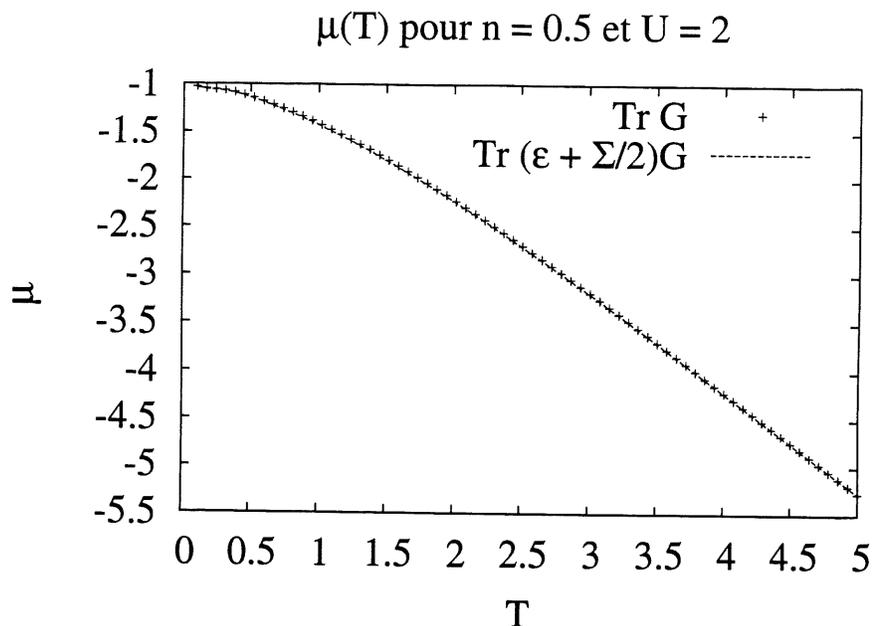


Figure 3.3: Résultats de $\mu(T)$ pour $n = 0.5$ et $U = 2$. En traçant la fonction selon la température, on voit bien que les résultats s'améliorent à mesure que la température augmente.

que pour des remplissages suffisamment faibles, la méthode fonctionne toujours bien. Mais on observe tout de même une belle correspondance dans les effets de tailles finies.

Il faut bien faire attention lorsqu'on évalue l'erreur relative. Puisque cette erreur est calculée par la différence des valeurs de potentiel chimique plutôt que par les différences de remplissage, les erreurs relatives semblent grandes. En effet, la région où l'uniformité thermodynamique est la moins bien respectée est la région où le potentiel chimique a des valeurs approchant le zéro. Donc, pour une erreur absolue plus ou moins constante, l'erreur relative est plus grande autour de $\mu = 0$. Si on calcule l'erreur par une différence approximative des remplissages, on trouve plutôt environ 1% dans le pire des cas pour $U = 2$ et 4% pour $U = 4$.

Une source d'erreur possible provient du calcul de l'entropie à l'infini. Si on se

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

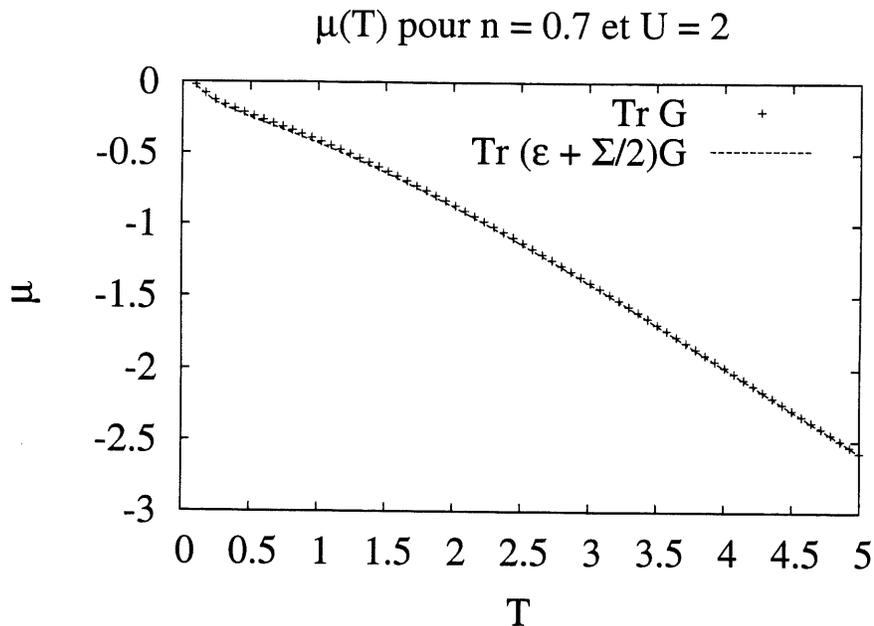


Figure 3.4: Résultats de $\mu(T)$ pour $n = 0.7$ et $U = 2$.

souvent bien (voir chapitre 2), la méthode ACDP ne permet pas de calculer la chaleur spécifique à température nulle avec une précision suffisante. Ainsi en ne choisissant pas une température suffisamment élevée pour intégrer la chaleur spécifique, il se peut qu'on oublie des contributions à haute température. La température choisie pour faire les calculs d'entropie est de $1000t$. À cette température, la chaleur spécifique est de l'ordre de 10^{-6} , 10^{-7} , et avant d'intégrer, on multiplie par β . Donc on ne s'inquiète pas de ce côté-là, puisque les contributions qui sont négligées sont plus petites que les erreurs sur la dérivée ou les erreurs occasionnées par la décomposition en fréquences de Matsubara.

On cherche ici à vérifier la précision de la méthode ACDP. À quel point respecte-t-elle l'uniformité thermodynamique ? La plus grande partie de ce travail a eu pour but d'éliminer toutes les sources possibles d'erreurs numériques. Pour ce faire, les mêmes calculs ont été effectués à $U = 0$. Les paramètres numériques d'intégration et de dérivation ² ont été ajustés à $U = 0$ de manière à obtenir un respect de l'uniformité

²Principalement le nombre d'itération Romberg et le facteur de tolérance pour l'intégration et

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

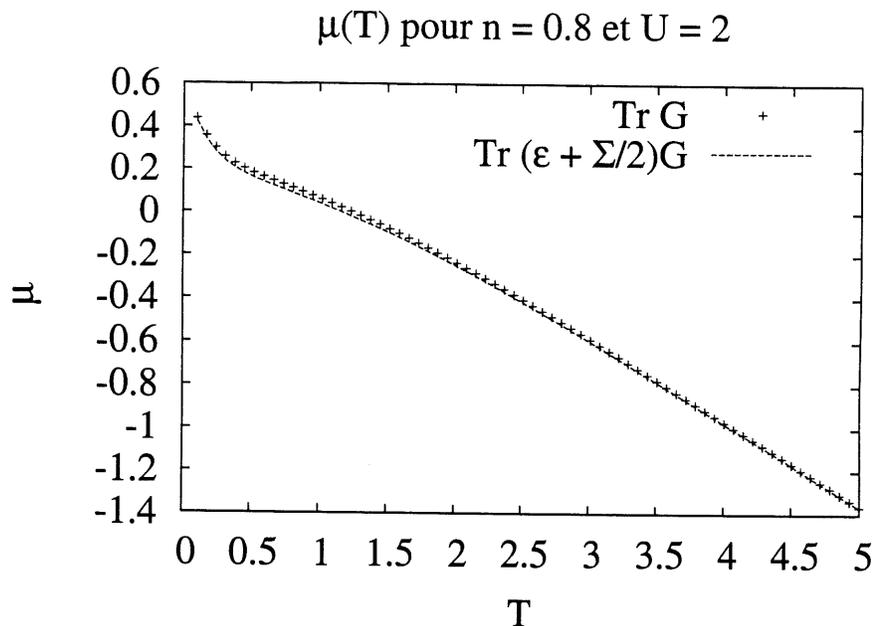


Figure 3.5: Résultats de $\mu(T)$ pour $n = 0.8$ et $U = 2$.

thermodynamique trivialement vérifiée dans ce cas particulier avec une erreur $\ll 1\%$. Cela constitue donc une borne inférieure d'erreur pour les résultats présentés. En principe, en changeant la valeur de U , on devrait avoir les mêmes erreurs numériques. Malheureusement, ce faisant, on introduit la décomposition en fréquences de Matsubara. Comme on le verra plus tard, ce paramètre peut influencer les résultats significativement, sachant que pour le nombre de fréquences de Matsubara choisi ³, les résultats n'ont pas convergé (figure 3.21). Un nombre de fréquences de Matsubara trop petit limite l'intervalle sur lequel on peut effectuer la dérivée. L'algorithme de Romberg étant itératif jusqu'à convergence, il se peut que le pas d'intégration, avant extrapolation, soit plus petit que l'intervalle sur laquelle on dérive. Le calcul fait est le suivant:

l'intervalle du dénominateur pour la dérivée.

³ $(2n + 1)\pi T = 640$

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

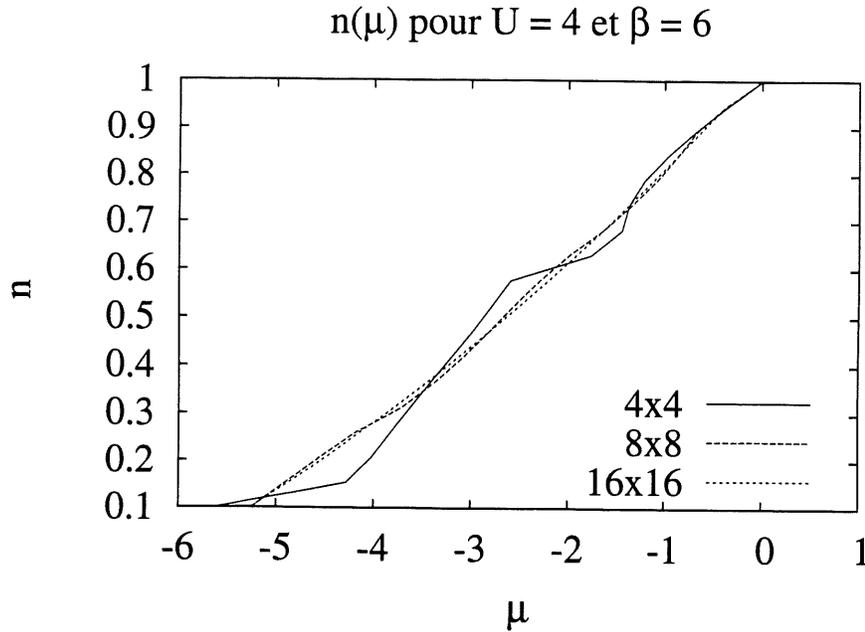


Figure 3.6: Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 4$, $\beta = 6$. La figure illustre que les structures visibles à basse température dans le potentiel chimique provient uniquement d'effet de taille finie. Car plus la taille du réseau discret choisi est grand, plus la courbe est douce.

$$\begin{aligned} \mu(T, n) &= \left(\frac{\partial F(T, n)}{\partial n} \right)_T \\ &= \frac{\partial}{\partial n} \left(E(T, n) - T \left[S(\infty, n) - \int_T^{1000t} \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E(T, n)}{\partial T} \right)_n \right] \right)_T \end{aligned} \quad (3.2)$$

La région la plus difficile à intégrer se trouve autour de $T \sim t$. Dans ce cas, l'intervalle d'intégration est environ $1000/2^{k+1}$, où k est le nombre d'itérations Romberg. Le maximum choisit dans les programmes⁴ est de 20. C'est à dire un nombre maximal de points de 2097152, ce qui représente un intervalle minimal de $4.7 \cdot 10^{-4}$. Avec une itération de moins, on se retrouve à environ $0.9 \cdot 10^{-3}$. Les dérivées étaient effectuées avec un intervalle de 10^{-4} . En éliminant cette source possible de problèmes, on attribue les différences près du demi-remplissage au nombre de fréquences de Mat-

⁴Jamais rencontrés en pratique.

3.1. AUTOCOMPARAISON ACDP ET UNIFORMITÉ THERMODYNAMIQUE

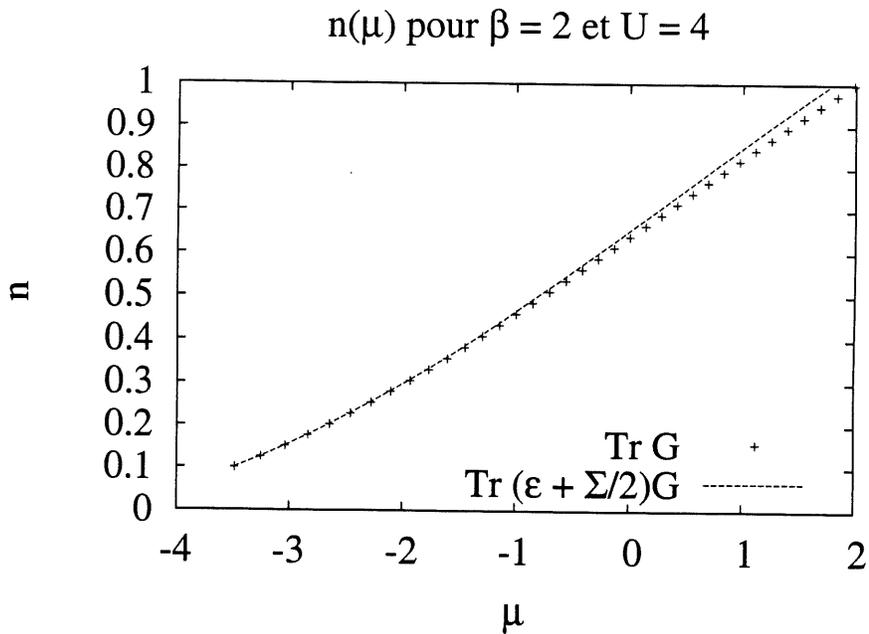


Figure 3.7: Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 4$ et $\beta = 2$. En augmentant la valeur de U , la correspondance est moins bonne. Surtout au fur et à mesure que l'on s'approche du demi-remplissage.

subara trop faible en étant optimiste ou à la méthode elle-même en étant pessimiste. Une démonstration analytique lèverait l'ambiguïté. Par contre, l'étude en fonction du nombre de fréquences de Matsubara suggère qu'une augmentation de ce nombre on pour effet d'améliorer les choses, ce qui suggère aussi fortement qu'avec un nombre de fréquences toujours de plus en plus grand, la méthode sera de plus en plus précise, jusqu'au respect complet de l'uniformité thermodynamique. Il serait aussi possible de calculer l'énergie avec $\text{Tr}G(T, \mu)$ mais cela requiert de plus grand temps de calculs. Puisqu'en principe le nombre de fréquences de Matsubara devrait être infini, on peut considérer ce problème comme étant d'origine numérique qui a des répercussions sur la précision de la dérivée et de l'intégrale.

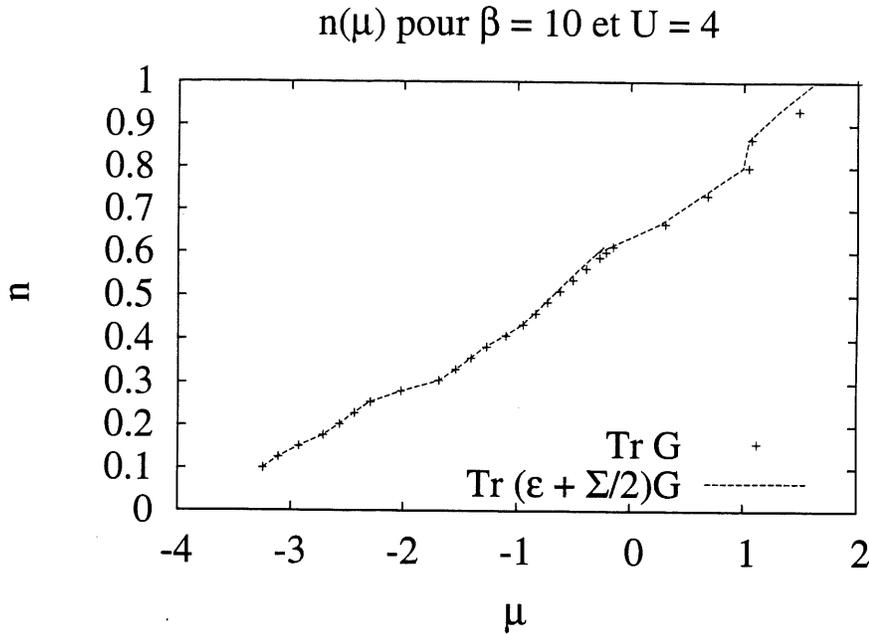


Figure 3.8: Résultats de $n(\mu)$ pour $U = 4$ et $\beta = 10$. À plus fort couplage, les effets de tailles finies sont plus importants. Ici, lorsque le remplissage dépasse 0.85 environ, on ne respecte plus très bien l'uniformité thermodynamique. Mais on réussit à très bien reproduire des effets de taille finie importants.

3.2 Comparaisons du MCQ avec les autres méthodes

Maintenant que l'uniformité thermodynamique est vérifiée, on veut savoir si la méthode ACDP donne les bons résultats. De plus, on se demande laquelle des deux méthodes, $n(T, \mu) = \text{Tr} [G(T, n)]$ ou $E(T, n) = \text{Tr} [(\epsilon + \Sigma/2)G(T, n)]$, se compare le mieux avec les résultats MCQ qui constituent notre référence. Par la même occasion, d'autres méthodes seront comparées à la méthode ACDP et au MCQ. Il sera utile de savoir que dans le cas du Monte-Carlo, les calculs ont été faits avec 29 000 mesures, que les extrapolations pour $\Delta\tau \rightarrow 0$ ont été faites sauf si mentionné et que les erreurs statistiques sont de l'ordre de la taille des points dans la plupart des cas.

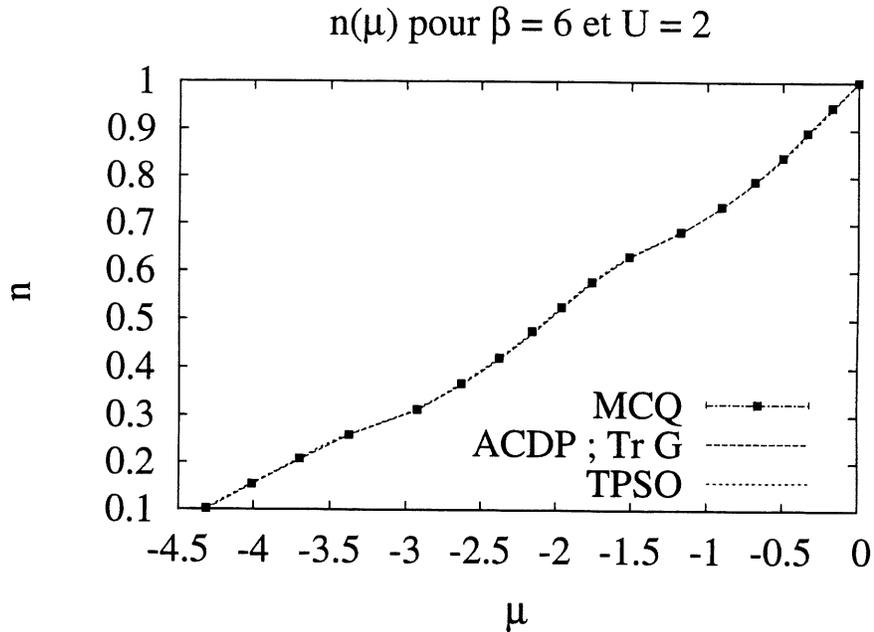


Figure 3.9: Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 6$ et $U = 2$. Le Monte-Carlo est représenté par les carrés noirs. On compare ici Tr G avec le Monte-Carlo et avec la théorie de perturbation au second ordre (TPSO).

3.2.1 Calcul de $n(T, \mu)$ par $\text{Tr}[G(T, \mu)]$ comparé avec le Monte-Carlo Quantique

Dans cette section, on présente les résultats obtenus en comparant le remplissage en fonction du potentiel chimique et de la température pour ACDP avec le MCQ (figures 3.10 - 3.12). On retrouve aussi les résultats pour la théorie de perturbation au second ordre (TPSO).

On constate d'abord que pour $U < 4$, la méthode donne d'excellents résultats. Pour $U = 4$, on observe des différences de plus en plus grandes à mesure qu'on s'approche du demi-remplissage et qu'on abaisse la température, c'est-à-dire les régions qui sont vraiment intéressantes. Cela indique une limite en couplage de la méthode. Malgré tout, même à $U = 4$, la méthode donne de bons résultats et les erreurs sont vraiment minimales. Il semble que le potentiel chimique soit une quantité relativement facile à

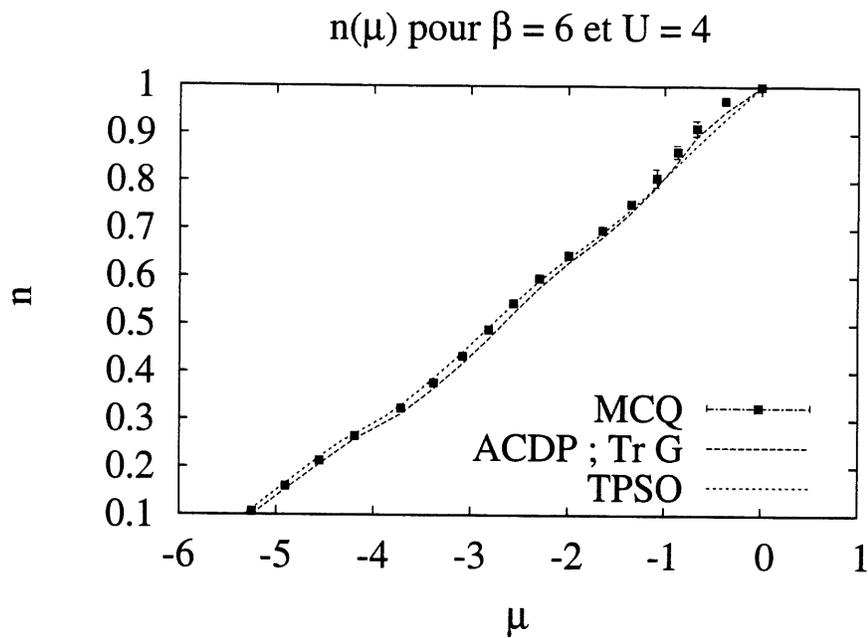


Figure 3.10: Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 6$ et $U = 4$. À plus fort couplage, les différences sont plus grandes.

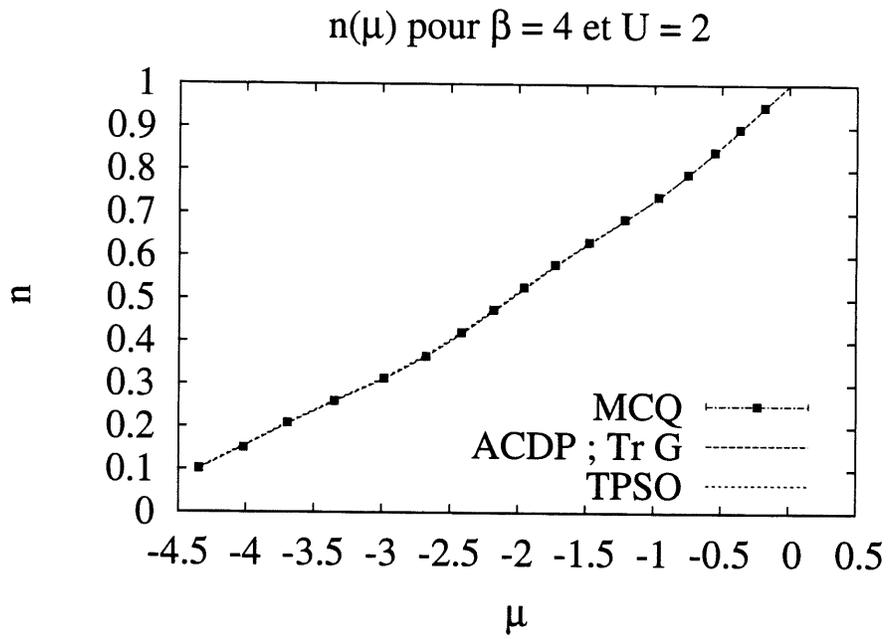


Figure 3.11: Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 4$ et $U = 2$. Plus la température est élevée, plus la correspondance est bonne.

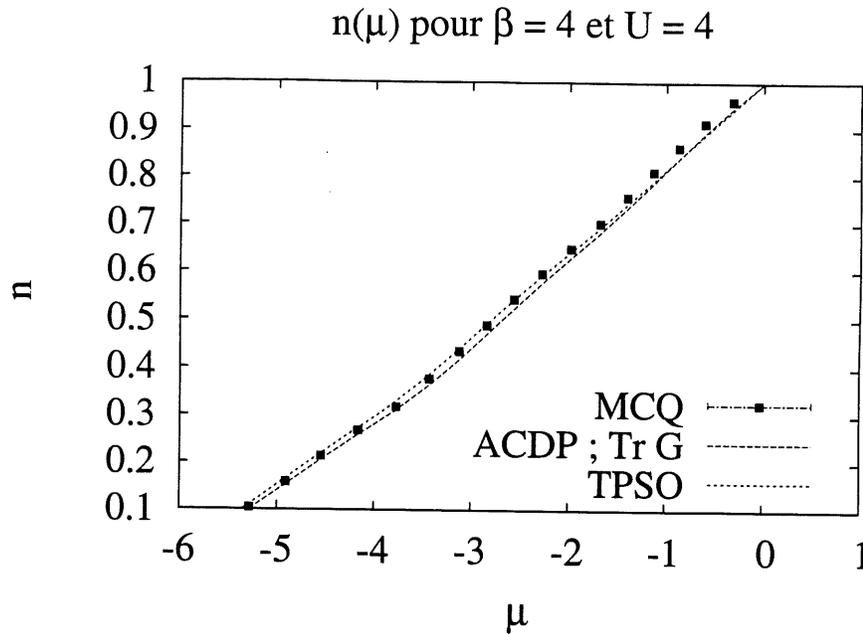


Figure 3.12: Résultats de $n(\mu)$ pour $\beta = 4$ et $U = 4$.

calculer. Il faudrait faire des calculs à plus basse température pour vraiment tester l'efficacité de la méthode, mais c'est au niveau du Monte-Carlo qu'il y a des contraintes dans ce cas. Avec la précision choisie pour le Monte-Carlo, régression en $\Delta\tau$, nombre de mesures, etc, il est difficile d'atteindre des températures plus faibles.

Les courbes de $n(\mu)$ ne suggèrent pas de séparation de phase dans la gammes des paramètres explorés. Se serait le cas si la courbe de $\mu(n)$ ⁵ avait un extremum ou un plateau.

3.2.2 Calcul de $E(T, n)$ par $\text{Tr}[(\epsilon + \Sigma/2)G(T, \mu)]$ comparé avec le Monte-Carlo Quantique

Maintenant, voici les résultats pour l'énergie en fonction du remplissage et de la température. On trouve les résultats aux figures 3.13 - 3.16. Les résultats du premier

⁵En inversant les deux axes sur les graphiques en question.

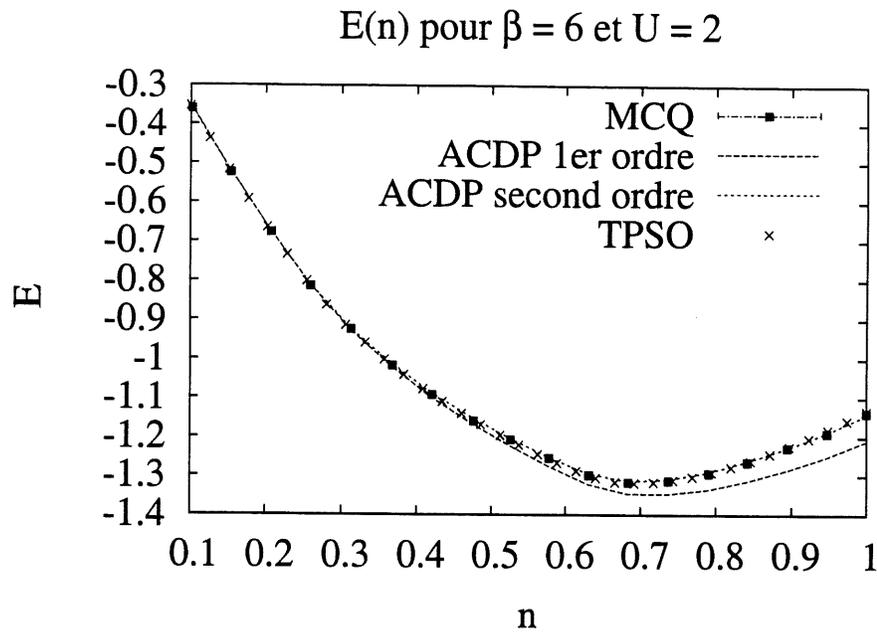


Figure 3.13: Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 6$ et $U = 2$. Les points noirs correspondent toujours au Monte-carlo. Les croix désignent la théorie de perturbation et les lignes pointillés désigne l'ACDP au premier et au second ordre. À une température aussi basse, on voit la nécessité d'aller au second ordre.

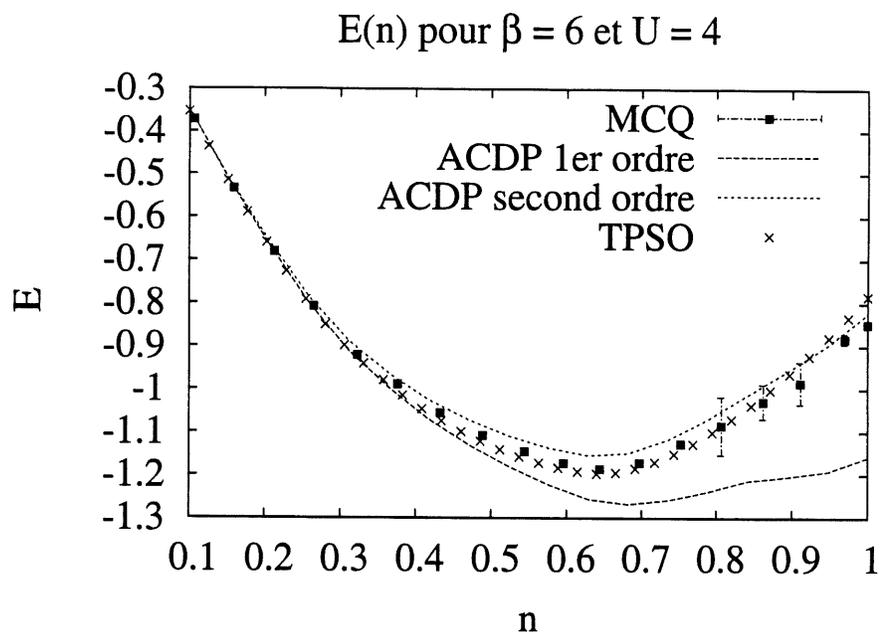


Figure 3.14: Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 6$ et $U = 4$. À plus basse température, le comportement étrange de la courbe ACDP au premier ordre indique l'ouverture du pseudogap.

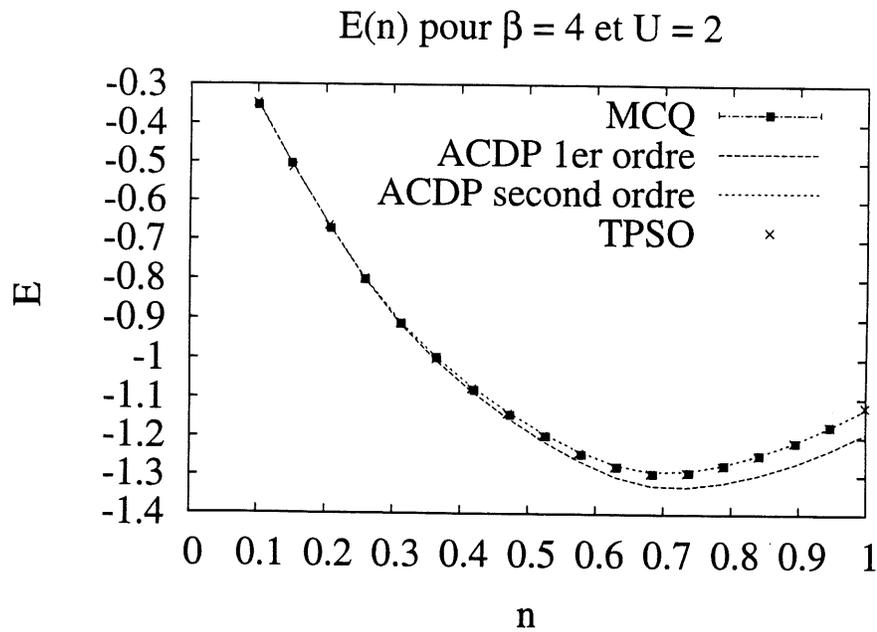


Figure 3.15: Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 4$ et $U = 2$.

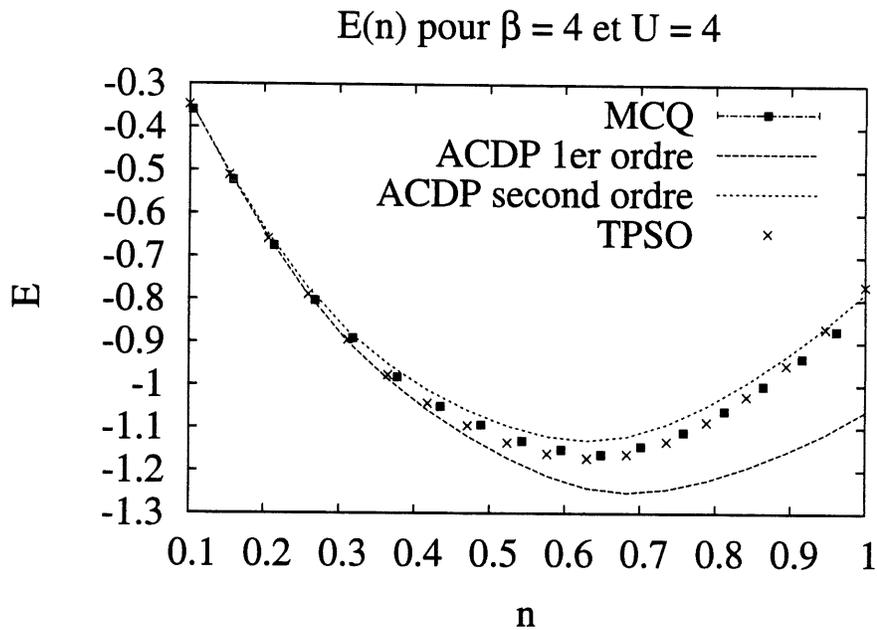


Figure 3.16: Résultats de $E(n)$ pour $\beta = 4$ et $U = 4$.

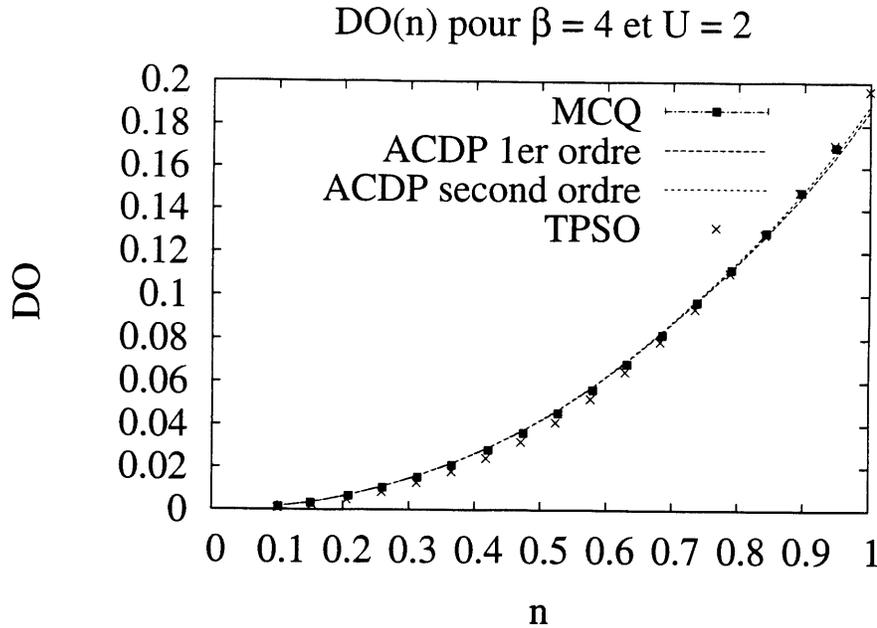


Figure 3.17: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 2$ et $\beta = 4$.

ordre sont calculés avec la fonction de Green sans interaction et les résultats du second ordre sont calculés avec la fonction de Green corrigée:

$$E(T, n) = \frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}, \sigma} \left[\frac{(\epsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma(ik_n, \mathbf{k})/2)}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0)} \right] ; \text{ au premier ordre} \quad (3.3)$$

$$E(T, n) = \frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}, \sigma} \left[\frac{(\epsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma(ik_n, \mathbf{k})/2)}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma(ik_n, \mathbf{k})} \right] ; \text{ au second ordre} \quad (3.4)$$

On constate d'abord que l'accord entre le MCQ et ACDP est aussi bon que pour le remplissage.

Encore une fois, pour l'énergie, une comparaison avec les résultats de la théorie de perturbation au second ordre a été faite. Les résultats à $U = 2$ correspondent si bien que l'analyse se concentrera sur les calculs fait à $U = 4$. À première vue, la théorie de perturbation semble donner d'aussi bons résultats que la méthode ACDP. Il subsiste tout de même un bon avantage à l'utilisation de la méthode ACDP. Il a déjà été démontré [41] que la croissance de la longueur de corrélation antiferromagnétique près

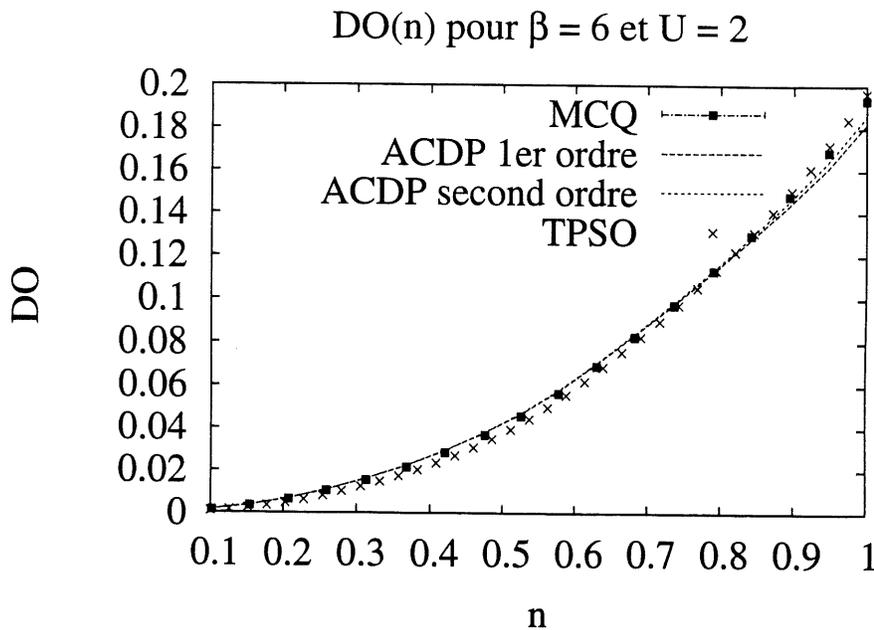


Figure 3.18: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 2$ et $\beta = 6$.

de $n = 1$ est reproduite par la méthode ACDP. La TPSO ne contient pas cet effet. De plus, en traçant la double occupation en fonction du remplissage et de la température, on constate que la méthode ACDP donne de biens meilleurs résultats, comme on peut le constater aux figure 3.17 - 3.20. Cette quantité contient des propriétés physiques intéressantes, puisqu'elle est reliée à la valeur moyenne de S_z^2 (équation (1.43)). De plus, quantitativement, par rapport à l'énergie, les valeurs de double occupation sont plutôt faibles. Il est donc important d'avoir la plus grande précision possible sur le calcul de cette quantité. Il est par conséquent pertinent de privilégier la méthode ACDP. De plus, on verra que la théorie de perturbation ne réussit pas à reproduire le pic de chaleur spécifique à basse température.

En observant attentivement les résultats d'énergie, on remarque que très près du demi-remplissage, la méthode ACDP donne de meilleurs résultats que la théorie de perturbation. De plus, la région où la TPSO est la plus juste en est une où les erreurs relatives sont les plus petites. Par contre, près du demi-remplissage, la double occupation est surévaluée pour les deux méthodes approximatives, surtout à $\beta = 6$, où

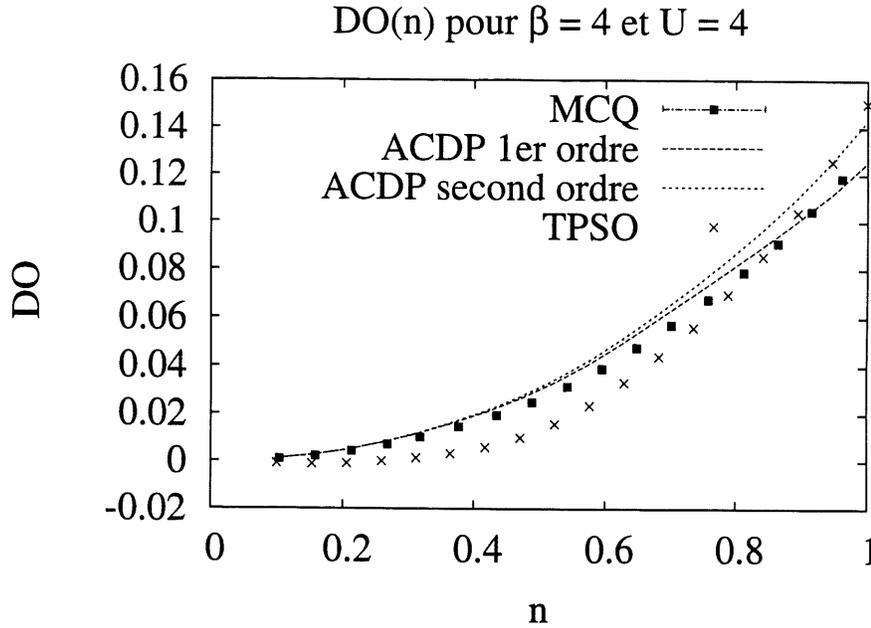


Figure 3.19: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 4$ et $\beta = 4$.

les effets non triviaux apparaissent. À une telle température, on observe l'ouverture du pseudogap dans le poids spectral, autant pour le Monte-Carlo que pour l'ACDP [52]. Dans le régime pseudogap, avec la méthode ACDP, on s'attend à ce que la théorie flanche car elle suppose au départ l'innexistence de cette phase. En effet, on utilise χ_0 pour décrire χ_{sp} et χ_{ch} . Or, évidemment, dans le cas sans interaction (dans la fonction χ_0), il n'y a pas présence de pseudogap. alors que finalement la théorie montre l'ouverture du poids spectral [41].

Sur la figure 3.20, dans le cas $U = 4$ et $\beta = 6$, on observe une nette amélioration entre le premier et le second ordre. Il s'agit là d'une belle démonstration de l'expression du pseudogap dans l'approximation ACDP. Au premier ordre, l'énergie cinétique est simplement l'énergie totale à $U = 0$, voir à équation (3.3). Pour des températures supérieures à celles où apparaît le second pic de chaleur spécifique (voir aux figures 3.22 - 3.23), l'énergie cinétique au premier ordre constitue une bonne approximation. Autrement dit, le seul effet des corrélations gît dans l'ajout de l'énergie potentielle. Cette contribution n'apparaît pas dans la chaleur spécifique (discuté ultérieurement).

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

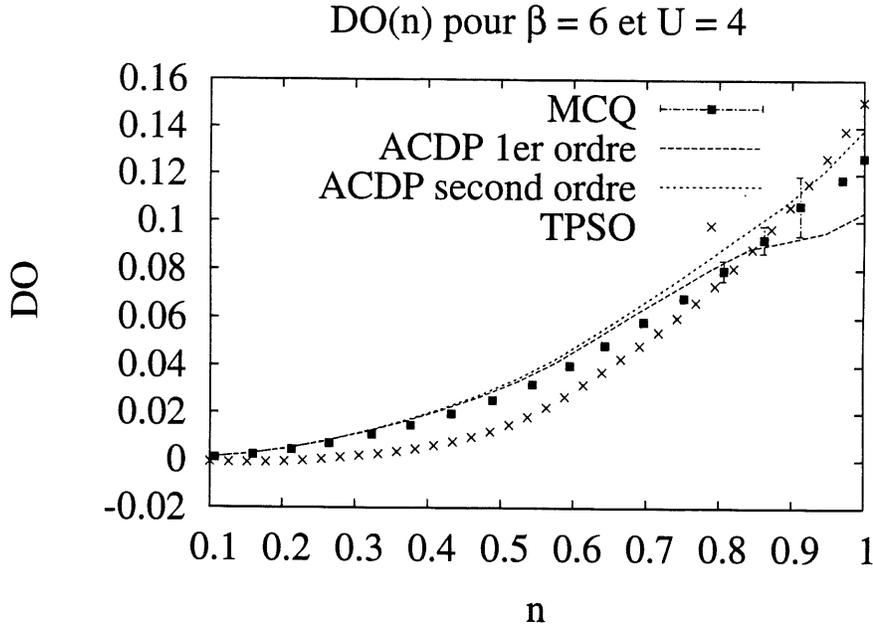


Figure 3.20: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 4$ et $\beta = 6$.

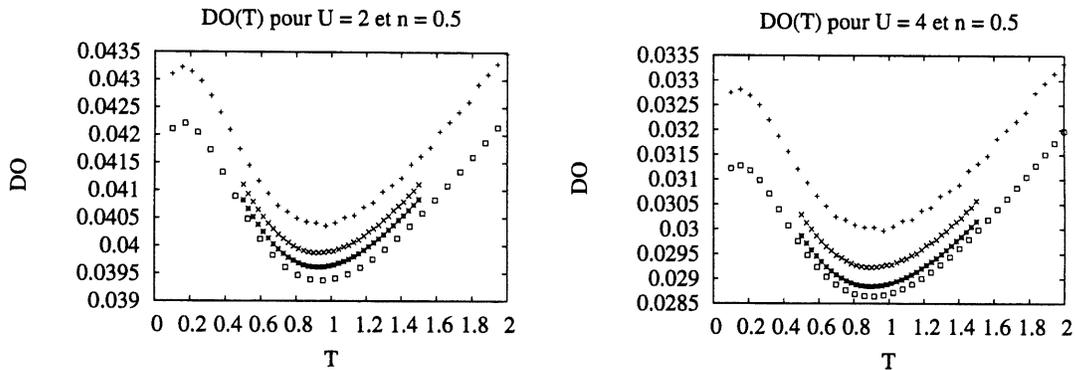


Figure 3.21: Pour $U = 2$ et $U = 4$ et $n = 0.5$ selon le nombre de fréquences de Matsubara, on voit des différences dans la double occupation. sur chaque graphique, les courbes de bas en haut on été calculée avec $(2n + 1)\pi T = 80, 160, 320$ et 640 respectivement.

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

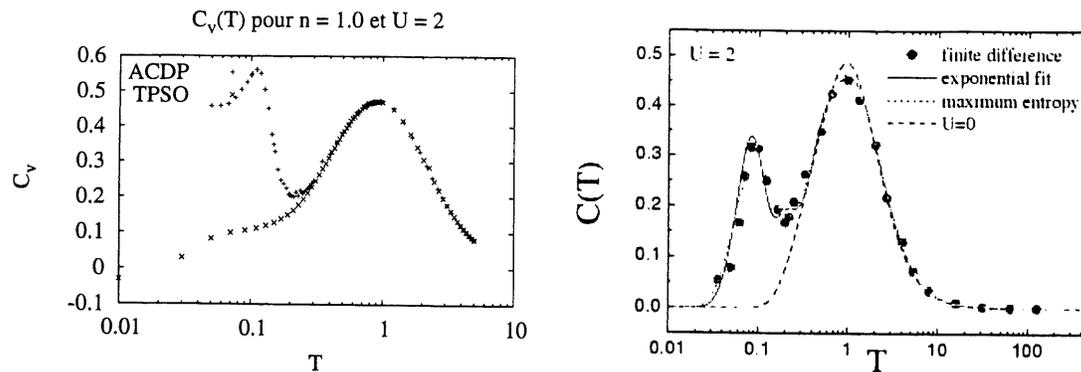


Figure 3.22: Chaleur spécifique en fonction de la température pour $U = 2$ et $n = 1.0$. Le graphique de gauche présente les résultats pour ACDP et TPSO. On remarque que la théorie de perturbation ne présente pas le pic à basse température. À droite, on trouve les résultats MCQ obtenus par le groupe de R.T. Scalettar [51].

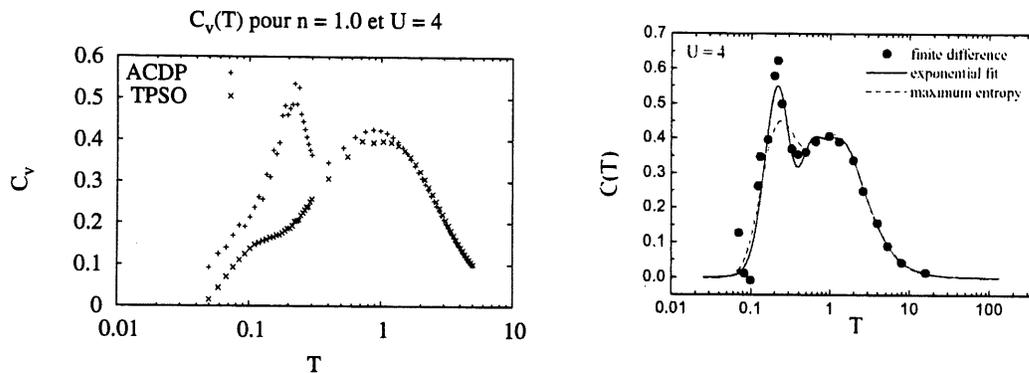


Figure 3.23: Chaleur spécifique en fonction de la température pour $U = 4$ et $n = 1.0$. Le graphique de gauche présente les résultats pour ACDP et TPSO. On remarque encore une fois que la théorie de perturbation ne présente pas le pic à basse température. À droite, on trouve les résultats MCQ obtenus par le groupe de R.T. Scalettar [51].

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

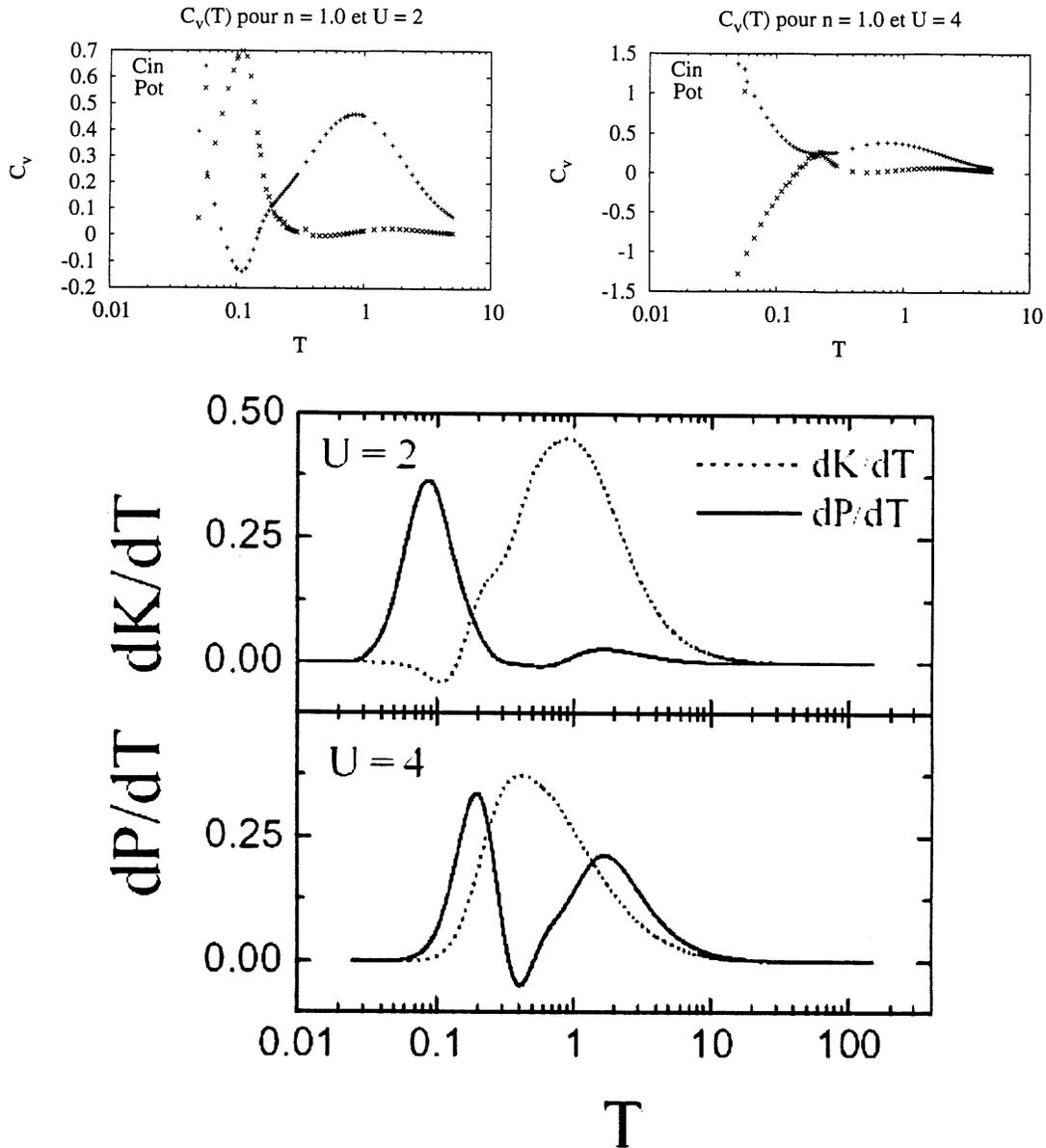


Figure 3.24: Contributions cinétique (K) et potentielle (P) à la chaleur spécifique en fonction de la température pour différentes valeurs de U à demi-remplissage. À gauche ce trouve les résultats ACDP. À droite, on trouve les résultats MCQ obtenus par le groupe de R.T. Scalettar [51]. Il s'agit ici d'un très bon test car à $U = 4$, le comportement des contributions cinétique et potentielle à la chaleur spécifique ne sont pas triviales.

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

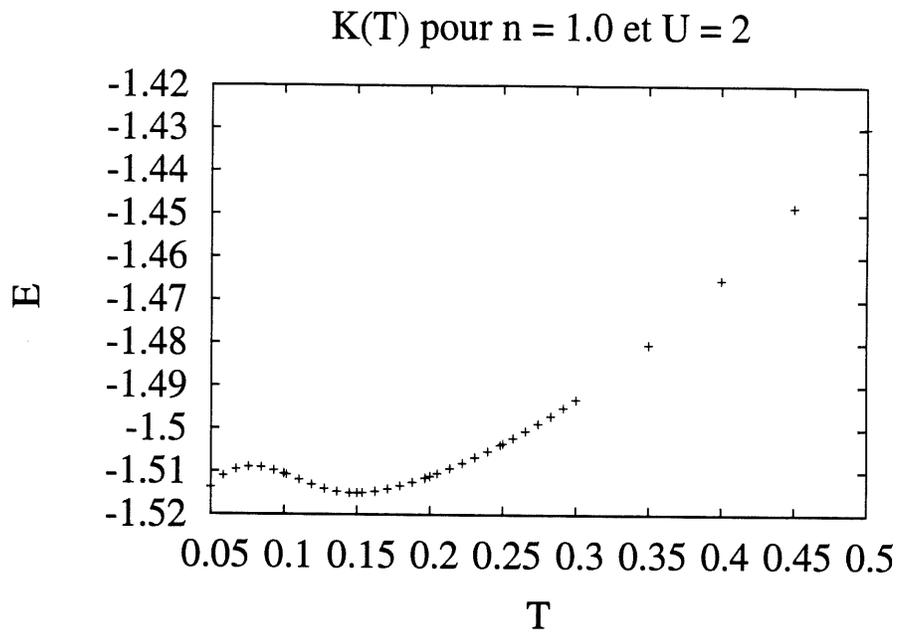


Figure 3.25: Contributions cinétique à l'énergie totale. On constate le maximum local à basse température qui devrait plutôt être une saturation si on en croit les résultats MCQ de la figure précédente.

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

Mais aux températures plus faibles, l'effet des corrélations se fait sentir même dans l'énergie cinétique. L'approximation au premier ordre ne suffit plus, l'énergie cinétique n'est pas seulement l'énergie totale sans interactions.

Le nombre de fréquences de Matsubara sur lesquelles les sommes dans la trace sont faites est choisi tel que $(2n + 1)\pi T = 640$, où n est le nombre de fréquences de Matsubara. Si on choisit un nombre inférieur à 640 (figure 3.21), comme 80 par exemple, les courbes tracées de double occupation présentent des différences d'environ 4%. Idéalement, il faudrait augmenter le nombre de fréquences de Matsubara jusqu'à convergence. Mais cela requiert de très grands temps de calculs. D'un autre côté la correspondance avec le Monte-Carlo est déjà très satisfaisante. De plus, la figure 3.21 suggère que le nombre de fréquences de Matsubara choisi est suffisant pour obtenir une précision de l'ordre de 1%. À plus fort couplage, puisque l'erreur relative est plus grande, il se peut qu'en augmentant le nombre de fréquences de Matsubara, la correspondance devienne meilleure.

Finalement, la chaleur spécifique en fonction de la température à demi-remplissage pour $U = 2$ et $U = 4$ a été calculée pour comparer avec les résultats MCQ obtenus par le groupe de R.T. Scalettar [51]. Aux figures 3.22 et 3.23 on voit les résultats obtenus avec ACDP au second ordre et TPSO sur l'un des graphiques et les résultats du groupe de R.T. Scalettar sur l'autre. Les résultats d'ACDP sont faits pour un réseau de taille 8×8 alors que le Monte-Carlo sont faits pour du 8×8 . Qualitativement, les résultats d'ACDP et de MCQ se ressemblent. Quantitativement, on voit que la position du pic à basse température n'est pas exactement la même, et les amplitudes relatives des deux pics sont différentes. En effet, le pic à basse température ACDP est de plus grande amplitude que celui à haute température, contrairement aux résultats cités. Mais gardons en tête que ce pic n'est décrit seulement que par quelques points dans les résultats MCQ. Par contre, la théorie de perturbation ne réussit pas à montrer le pic à basse température. Cela pousse à conclure que pour les très basses températures, à peu près aux températures inférieures à celle de l'ouverture du pseudogap, la théorie de perturbation ne réussit pas à tenir compte des effets dûs aux corrélations, contrairement à la méthode ACDP. En effet, puisque le pic à haute température est reproduit simplement par le cas sans interaction ($U = 0$) on en con-

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

clut que les corrélations entrent en jeu à une température d'environ $0.2t$ pour $U = 2$. En traçant la dérivée de la portion cinétique et potentielle de la chaleur spécifique (voir figure 3.24), on trouve que le pic à basse température est principalement dû à la double occupation et le second à l'énergie cinétique. À $U = 4$, les résultats Monte-Carlo indiquent que même à haute température, l'effet des corrélations devient important. À la figure 3.24, on découvre pour $U = 4$ un bon test pour n'importe quelle théorie car il peut être effectué même à haute température. En effet, le pic à haute température dans la chaleur spécifique totale est en fait constitué de deux pics centrés à des températures différentes. À $U = 4$, la contribution potentielle à la chaleur spécifique semble conforme aux résultats MCQ. Mais la contribution cinétique ne donne pas de trop bons résultats.

Maintenant, à très basse température, plutôt que de devenir nulles, les contributions cinétiques et potentielles divergent. On pense que cela serait dû à un comportement irrégulier de la double occupation à faible température. On suggère de calculer la double occupation à partir de d'autres techniques ou de garder la double occupation fixe en dessous d'une certaine température pour corriger cet effet. Cela indique une limite à basse température de la théorie ACDP *brute*. On pense que le même phénomène serait responsable de la saturation de la chaleur spécifique (ou du comportement linéaire de l'énergie à basse température) que l'on remarque sur la figure 3.22.

Malgré tout, il semble que le coupable de la saturation soit uniquement l'énergie cinétique. À la figure 3.25, on remarque un maximum local dans l'énergie cinétique. Ce qui induit une contribution positive à la chaleur spécifique cinétique. Mais selon les résultats MCQ, on devrait plutôt assister à une saturation de l'énergie cinétique, de sorte que la chaleur spécifique cinétique s'annule (à une température d'environ $0.08t$). Cela suggère que l'ouverture du pseudogap a beaucoup plus d'influence sur l'énergie cinétique que sur l'énergie potentielle et que la double occupation elle-même semble conforme au MCQ. Il s'agit d'un problème sur lequel il faudra se pencher.

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

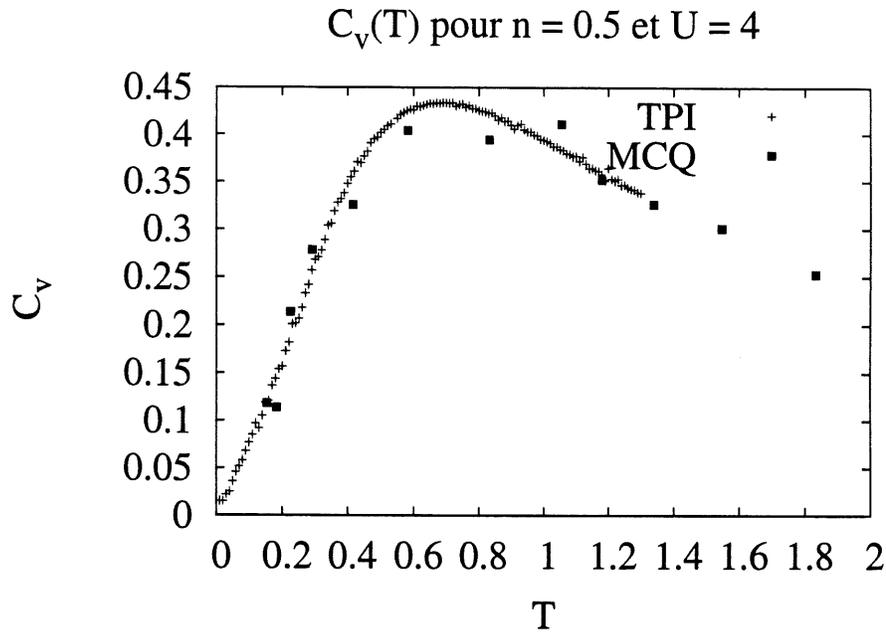


Figure 3.26: Chaleur spécifique pour $U = 4$ et $n = 0.5$. Le bruit dans les données Monte-Carlo est dû à l'imprécision de la dérivée aux différences finies faites avec un grand écart entre chaque point. L'incertitude sur les données Monte-Carlo n'a pas été calculées.

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

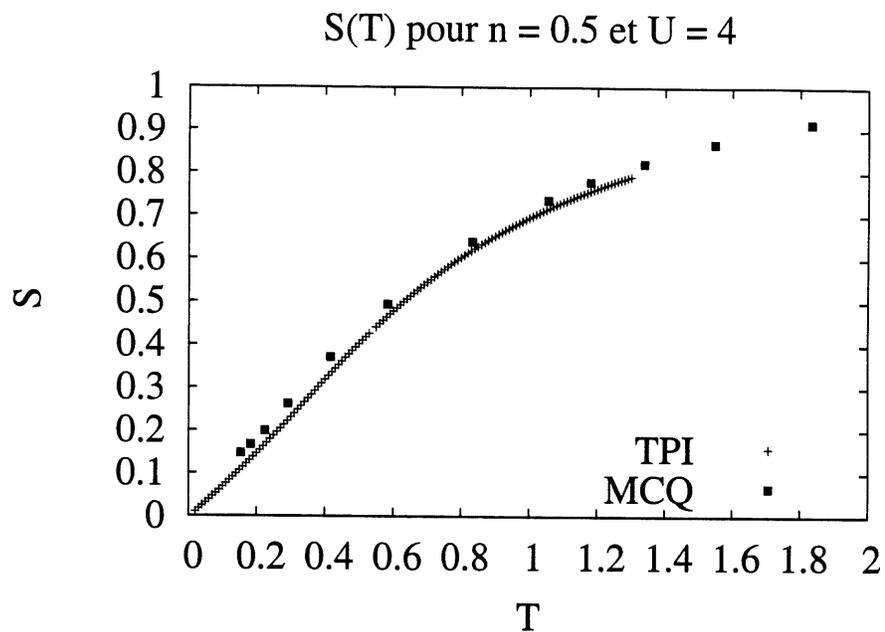


Figure 3.27: Entropie pour $U = 4$ et $n = 0.5$, calculée par l'intégrale de la chaleur spécifique. Encore une fois, il n'y a pas de barres d'erreurs sur les résultats Monte-Carlo.

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

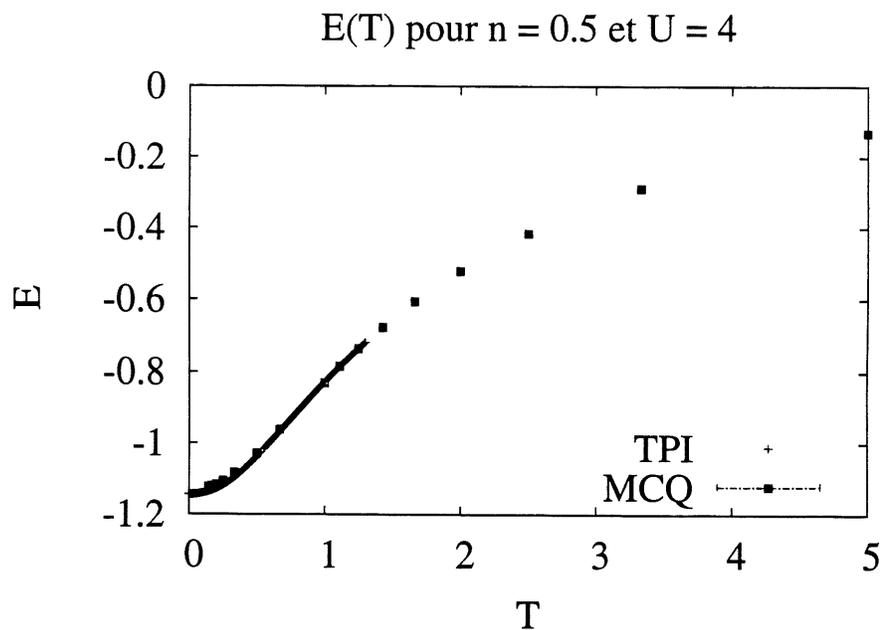


Figure 3.28: Énergie pour $U = 4$ et $n = 0.5$.

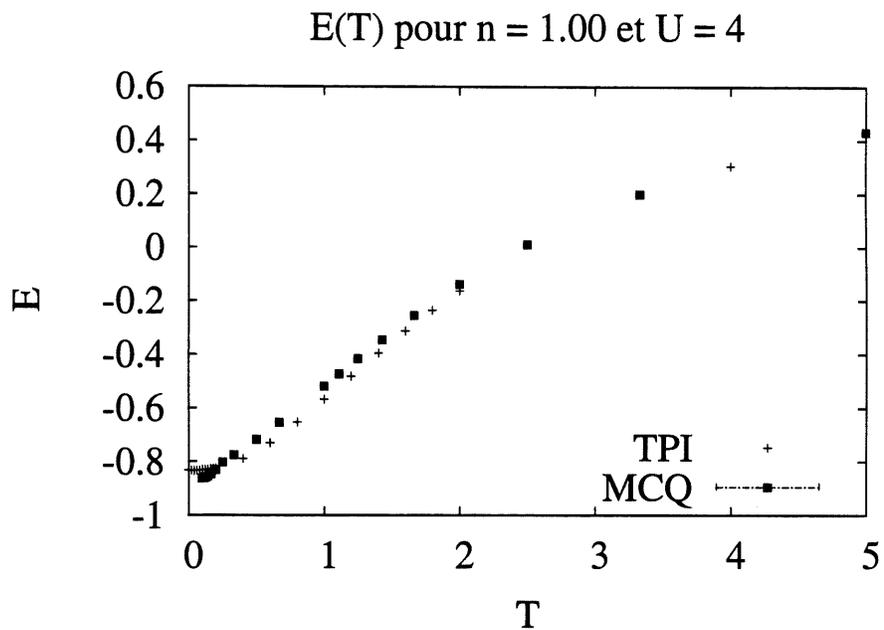


Figure 3.29: Énergie pour $U = 4$ et $n = 1.0$.

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

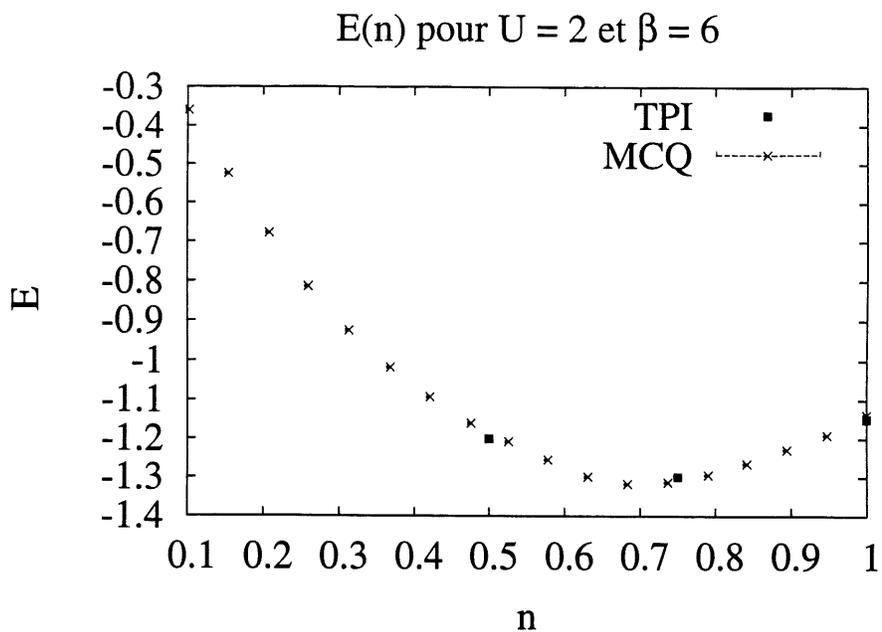


Figure 3.30: Énergie pour $U = 2$ et $\beta = 6$.

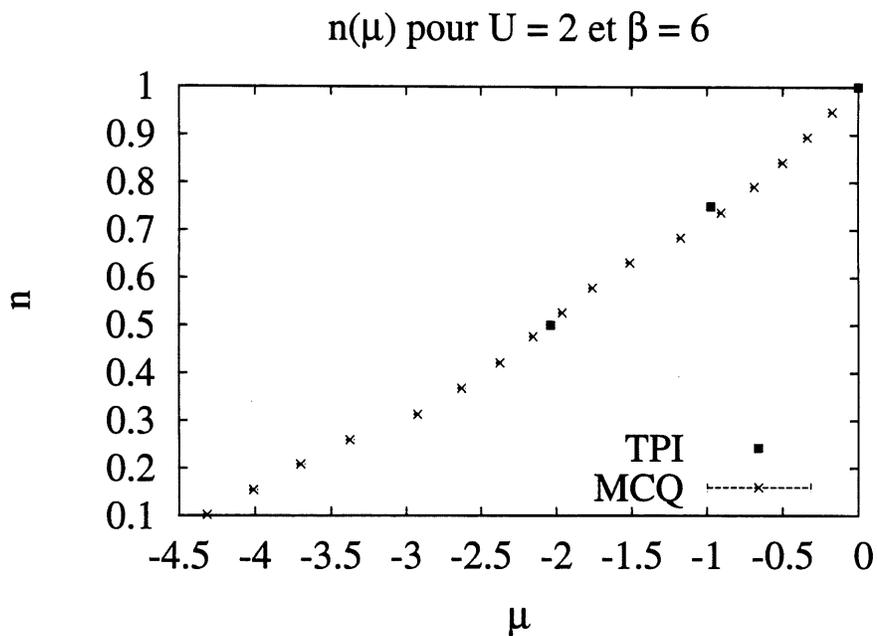


Figure 3.31: Remplissage pour $U = 2$ et $\beta = 6$.

3.2.3 Théorie de perturbation interamas et MCQ

On présente ici quelques résultats obtenus avec la théorie de perturbation interamas comparés avec les résultats Monte-Carlo. L'amas de base pour le calcul de perturbation interamas est un réseau 2×2 . Quantitativement, les résultats ne correspondent pas toujours très bien, mais si on regarde la chaleur spécifique ou l'entropie (figure 3.26 et 3.27) les résultats sont qualitativement corrects. Dans ces deux dernières courbes, il faut garder en tête que le remplissage est de $n = 0.5$. Puisque pour le Monte-Carlo la variable indépendante est le potentiel chimique plutôt que le remplissage, il y a des erreurs sur le remplissage dues à l'incertitude statistique dans le potentiel chimique. Il n'est pas évident de choisir le bon potentiel chimique pour garder un remplissage constant en fonction de la température, malgré les résultats des figures 3.10-3.12. Plusieurs méthodes ont été utilisées, comme un lissage polynomial, par exemple, et aucune d'entre elles n'a vraiment été satisfaisante. Qui plus est, étant donné la difficulté face au remplissage, les régressions pour $\Delta\tau \rightarrow 0$ n'ont pas été faites. Et finalement, la dérivée numérique et l'intégration par trapèze introduisent des erreurs, particulièrement pour le MCQ (voir annexe B). Si on regarde l'énergie en fonction de la température à la figure 3.29, on réalise que les résultats ne sont pas aussi bons qu'on aurait espéré. Mais il faut savoir que cette méthode est plus efficace aux basses températures. De plus, certains paramètres de calcul n'ont pas encore été suffisamment explorés. D'un autre côté, si on regarde les figures 3.30 et 3.31, les résultats sont plutôt bons autant pour $n(T, \mu)$ que pour $E(T, n)$. Aussi, hors demi-remplissage, à la figure 3.28 on observe un plutôt bon accord. C'est avec cette dernière courbe que la chaleur spécifique et l'entropie pour le Monte-Carlo ont été calculés. Il ne faut pas oublier qu'on compare ici des réseaux de taille finie (MCQ) avec des résultats pour des réseaux de taille infini (TPI). Mais les résultats ne sont pas encore suffisamment nombreux pour conclure clairement. Il faut aussi noter que sur ces derniers graphiques, les régressions en $\Delta\tau$ ont été faites. Il n'en demeure pas moins qu'une généralisation de cette méthode qui utiliserait le MCQ pour résoudre chaque amas à température finie serait très prometteuse [24].

En observant la chaleur spécifique à la figure 3.26 on remarque qu'à basse température, la chaleur spécifique est linéaire. Il s'agit d'un résultat remarquable de la théorie. Pour

3.2. COMPARAISONS DU MCQ AVEC LES AUTRES MÉTHODES

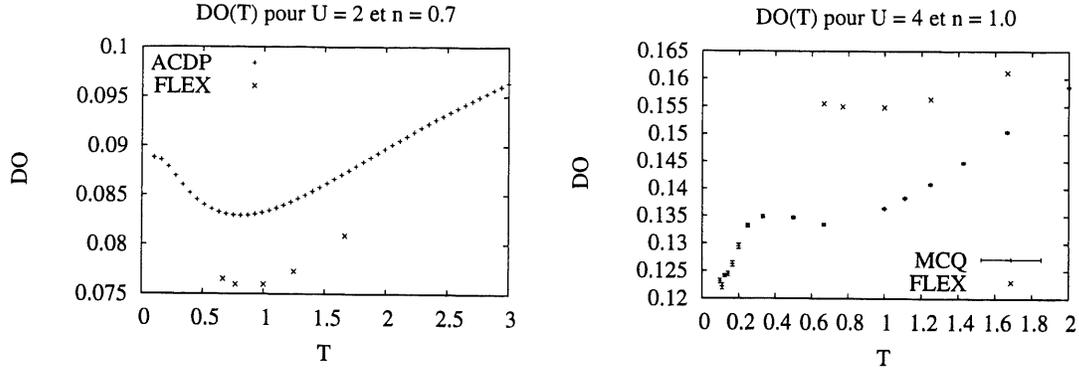


Figure 3.32: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 2, n = 0.7$ ainsi que pour $U = 4, n = 1.0$.

un système de taille finie résolu par des diagonalisations exactes, la discrétisation des niveaux d'énergie entraîne un comportement exponentiel de la chaleur spécifique à basse température. L'application de la TPI aux diagonalisations exactes corrige ce phénomène. Les incertitudes pour le Monte-Carlo n'ont pas été calculés. Les barres d'erreurs provenant des données d'énergie sont de l'ordre de la taille des points. Mais pour la dérivée, il faudrait rigoureusement calculer les erreurs dues à la dérivée par les différences finies. Il en est de même pour l'entropie mais en plus il faudrait ajouter les erreurs dues à l'intégration par la méthode des trapèzes. Une discussion sur ces erreurs se trouve dans l'annexe B.

3.2.4 FLEX, MCQ et ACDP

Il a été question précédemment de certaines méthodes de résolution qui utilisent les règles de Kadanoff et Baym. La méthode *Fluctuation Exchange* ou FLEX en est une. Malgré l'uniformité thermodynamique imposée dans ce modèle, on constate qu'elle ne parvient pas à bien décrire les propriétés du modèle de Hubbard [41]. La double occupation est l'une de ces propriétés. Avec la technique FLEX, il existe quatre façons différentes d'obtenir la double occupation:

$$\frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \chi_{sp}(ik_n, \mathbf{k}) = n - 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \quad (3.5)$$

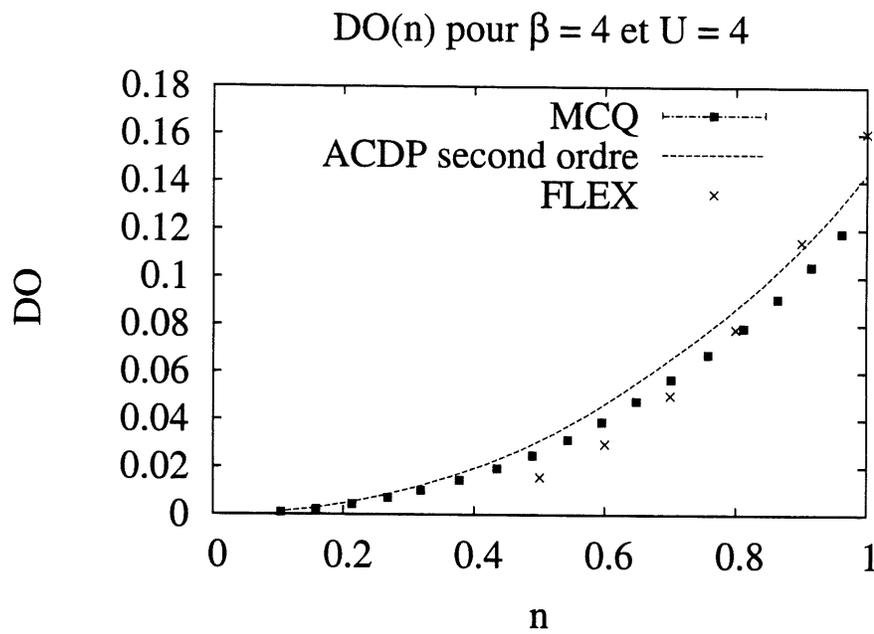


Figure 3.33: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ pour $U = 4$, $\beta = 4$ en fonction du remplissage. La taille du réseau pour FLEX est 6x6 alors que pour le Monte-Carlo elle est de 8x8.

$$\frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \chi_{ch}(ik_n, \mathbf{k}) = n + 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - n^2 \quad (3.6)$$

$$\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{U} \text{Tr} \left(\frac{\Sigma}{2} \right) G \quad (3.7)$$

$$\frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \chi_{sp}(ik_n, \mathbf{k}) - \chi_{ch}(ik_n, \mathbf{k}) = 4\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - n^2 \quad (3.8)$$

Il est important de noter qu'aucune des ces quatre méthodes ne donnent les mêmes résultats. On s'attend à ce que l'équation (3.8) donne les meilleurs résultats car elle tient compte du non respect du principe d'exclusion de Pauli. Il s'agit d'une combinaison des équations (3.5) et (3.6). C'est cette méthode qu'on a utilisé pour tout les résultats de FLEX. En faisant des comparaisons avec la méthode ACDP (figure 3.32) dans la gamme de paramètres où cette approximation donne de bons résultats (figure 3.17), on remarque la très grande différence entre les résultats de FLEX et d'ACDP. En comparant avec le Monte-Carlo à des couplages intermédiaires, on constate encore une fois de grandes différences dans les valeurs de double occupation. Bien que l'uniformité thermodynamique de FLEX soit respectée, les divergences entre les résultats de cette méthode et ceux du MCQ sont trop importantes pour être ignorées. Ce qu'il faut garder en tête, c'est que pour les graphiques de FLEX présentés ici, on a conservé les meilleurs résultats obtenus. À la figure 3.33 pour une température relativement élevée, on constate que les résultats de double occupation calculés avec FLEX correspondent mal. En additionnant les équations (3.5) et (3.6) plutôt qu'en les soustrayant, on peut vérifier le respect du principe de Pauli. Le tableau 3.1 montrent les résultats obtenus.

3.3 Localisation induite par la température

Aux figures 3.34 et 3.35 on reproduit les résultats de double occupation déjà calculés par François Lemay. Étant donné les nouveaux choix d'accélération de convergence (voir annexe E) on a recalculé la double occupation. Les résultats sont plutôt semblables. Quantitativement, il y a des différences, mais la position du minimum ne s'est pas déplacée de manière significative, soit environ 1% de différence sur la température.

3.3. LOCALISATION INDUITE PAR LA TEMPÉRATURE

n choisi	n calculé par la règle de somme
1.0	0.753463507
0.9	0.650613904
0.8	0.542341709
0.7	0.429727733
0.6	0.314308047
0.5	0.199193597

Tableau 3.1: Tableau de données sur le non-respect du principe de Pauli par l'approche FLEX. À gauche on trouve les valeurs de n choisie pour le calcul et à droite, on trouve les résultats calculés en additionnant les équations (3.5) et (3.6).

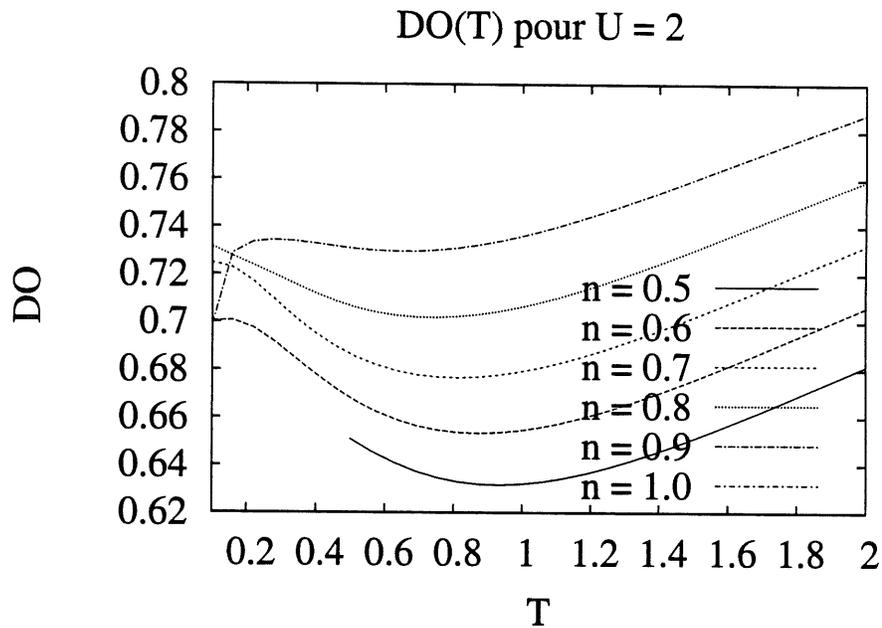


Figure 3.34: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ avec $U = 2$ pour divers remplissages. Calculés avec $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{U} \text{Tr} \left[\frac{\Sigma^{(2)}}{2} G^{(2)} \right]$. L'échelle de double occupation (DO) est normalisée par $\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$.

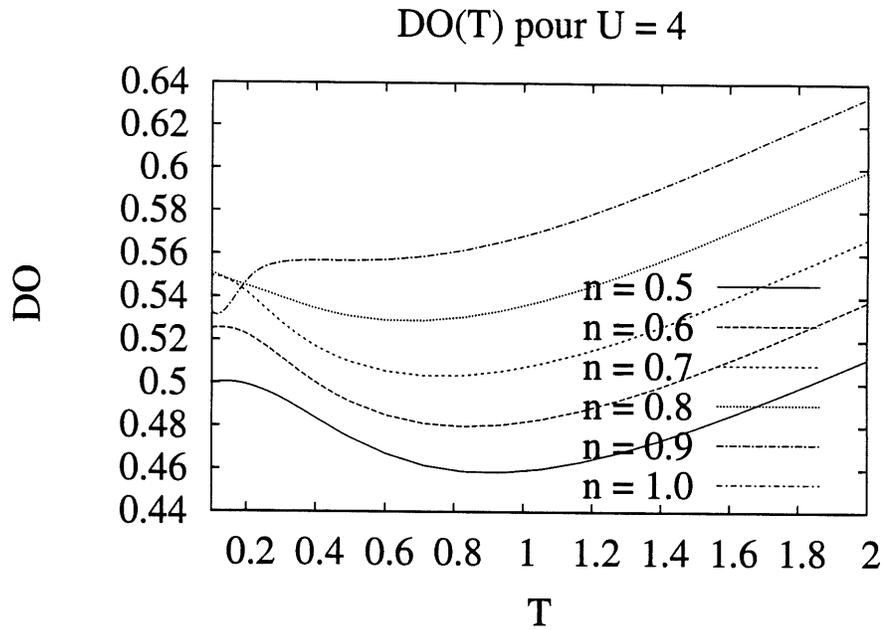


Figure 3.35: Résultats de $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ avec $U = 4$ pour divers remplissages. Calculés avec $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{U} \text{Tr} \left[\frac{\Sigma^{(2)}}{2} G^{(2)} \right]$ L'échelle de double occupation (DO) est normalisée par $\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$.

3.3. LOCALISATION INDUITE PAR LA TEMPÉRATURE

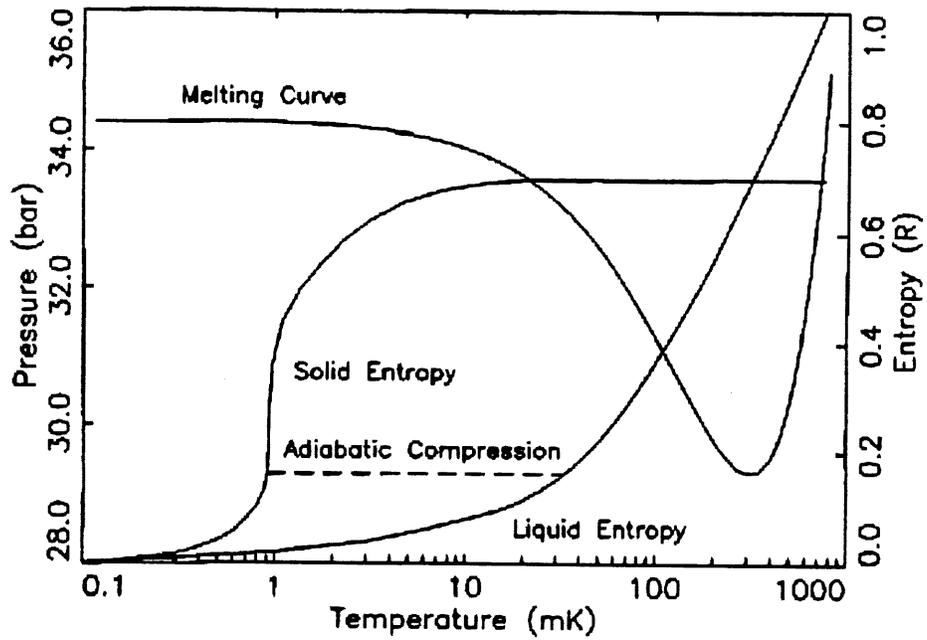


Figure 3.36: Diagramme de phase pression-température pour ^3He .

3.3. LOCALISATION INDUITE PAR LA TEMPÉRATURE

On a déjà mis en évidence l'existence d'un minimum dans la courbe de double occupation $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ en fonction de la température [3, 53]. La double occupation, comme on le sait déjà, est reliée à S_z^2 (équation (1.43)). Lorsque les spins sont localisés, c'est-à-dire lorsque la double occupation est faible à cause des interactions, les spins ont la liberté d'être dans deux directions possibles. Par exemple, dans la limite $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \rightarrow 0$, il n'y a qu'un électron au maximum par site et son spin peut être *up* ou *down*. Par contre, dans une mer de Fermi conventionnelle, chaque état k doit être occupé par deux électrons. L'un doit être *up* et l'autre nécessairement *down*, principe de Pauli oblige, sauf dans une plage d'énergie d'ordre T autour du niveau de Fermi E_F . En considérant cela, on peut faire l'analogie entre le système d'électrons corrélés qu'on étudie ici et un autre système de fermions corrélés, celui de l'hélium trois.

En 1950, Pomeranchuk avait prédit la présence d'un minimum dans la courbe de changement de phase solide-liquide de l' He^3 [54]. On observe ce phénomène à une pression de 29 atm à une température voisinant 0.3 K. Cet effet résulte d'une compétition entre l'entropie du liquide et l'entropie du solide [55]. Les propriétés fermioniques de l' ^3He liquide font en sorte que le liquide est plus ordonné que le solide. En effet, pour le solide, tous les degrés de liberté de spin sont présents alors que seulement une petite fraction $\left(\frac{T}{E_F}\right)$ contribue dans le liquide de Fermi que constitue l'hélium trois. Le minimum observé dans la double occupation $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ en fonction de la température semble être à première vue une analogie du phénomène observé dans l'hélium trois. En effet, les électrons sont aussi des fermions. Comme on l'a dit plus tôt, les degrés de liberté de spins ne sont pas les mêmes selon que ces derniers sont localisés ou non. Mais la courbe de double occupation ne représente pas un changement de phase contrairement à l'Hélium, ainsi cette analogie a ses limites. Il est tout de même intéressant d'observer le comportement de l'entropie dans les gammes de paramètres voisines du minimum de double occupation.

En faisant une simple analyse du calcul de l'entropie, on se rend compte qu'il est difficile d'avoir recours à un argument entropique pour cette localisation induite par la température et les interactions. En effet, la double occupation contribue directement au calcul de l'entropie:

3.3. LOCALISATION INDUITE PAR LA TEMPÉRATURE

$$E = \text{Tr} \left[\left(\epsilon + \frac{\Sigma}{2} \right) G \right] \quad (3.9)$$

$$= \text{Tr} [\epsilon G] + \text{Tr} \left[\frac{\Sigma}{2} G \right] \quad (3.10)$$

$$= \text{Tr} [\epsilon G] + U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \quad (3.11)$$

$$\equiv K + V \quad (3.12)$$

où on a défini $V = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$. La chaleur spécifique s'obtient donc par

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_n = \left(\frac{\partial (K + V)}{\partial T} \right)_n \quad (3.13)$$

En définissant $S_V \equiv \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial V}{\partial T'} \right)_n dT'$, la partie potentielle de l'entropie et $S_K \equiv \int_0^T \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial K}{\partial T'} \right)_n dT'$, la partie cinétique, on se rend compte que la partie potentielle de l'entropie dépend explicitement de la double occupation⁶. Dans l'effet Pomeranchuk, on compare l'entropie du liquide avec l'entropie du solide. Au point où se croisent ces deux quantités se trouve le minimum de la courbe de changement de phase liquide-solide, figure 3.36 [56]. Dans le contexte du modèle de Hubbard, il n'est pas possible d'extraire l'information dans l'entropie concernant la double occupation par une comparaison semblable.

L'idée de base telle que suggérée par Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, et Marcelo J. Rozenberg [3], est de comparer l'entropie du métal avec l'entropie de l'isolant. Selon Georges et *al*, la transition métal-isolant se produit à des valeurs de couplage beaucoup plus élevées que celles atteintes dans cette étude. Comme on le constate à la figure 3.37, la courbe d'entropie à $U = 0$ (métal) ressemble qualitativement énormément à celle pour $U = 2$, ce qui pousse à croire qu'on est toujours en présence d'un métal. La seule façon de trouver une phase isolante serait en observant ce qui arrive à $S(T)$ en augmentant U jusqu'à ce qu'on observe un changement dans le comportement de la courbe de l'entropie. Selon George et *al*, cette transition se

⁶La constante d'intégration à l'infini pour l'entropie cinétique est la même que pour l'entropie totale et celle de l'entropie potentielle est zéro.

3.3. LOCALISATION INDUITE PAR LA TEMPÉRATURE

produirait pour des valeurs de U s'approchant de $U = 10$. En observant la figure 12 de la référence [51], reproduite à la figure 3.24, on constate un changement significatif dans le comportement de la chaleur spécifique. La contribution cinétique se déplace vers de plus faibles températures alors que la contribution potentielle se déplace vers de plus hautes températures. Ceci implique un changement de comportement dans l'entropie tel qu'observé par Georges et *al.* Mais il n'en demeure pas moins qu'on observe ce minimum de double occupation pour des valeurs d'interaction faibles et hors demi-remplissage. Cela suggère que l'existence de ce minimum est dû à un phénomène différent de l'effet Pomeranchuk.

À basse température, on observe une chute radicale de double occupation. On a d'abord attribué ce comportement à un problème de la méthode ACDP et à un comportement non physique [53]. On se souvient que des comparaisons ont été faites à des températures aussi faibles que $\beta = 6$, c'est-à-dire $T \sim 0.166t$. à $U = 2$, les différences sont négligeables entre le MCQ et ACDP. À $U = 4$, la méthode ACDP a tendance à surestimer la double occupation. Ce n'est que récemment qu'on a confirmé cette chute de double occupation avec des résultats MCQ.

À $t = 0$ (ou pour $t/U \rightarrow 0$), chaque électron est *localisé* sur un site. La double occupation est alors nulle et on se trouve dans la limite d'Heisenberg. À $U = 0$ (ou pour $U/t \rightarrow 0$), par contre la double occupation est non nulle mais constante, elle est égale à $\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle = n^2/4$. Maintenant pour des valeurs de couplages intermédiaires, à haute température, la double occupation est égale à $n^2/4$ et à mesure que la température diminue, la double occupation diminue aussi. Cela revient à dire que la chute température a pour effet de localiser les électrons. Le déplacement de la position du minimum local de $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle(T)$ selon le remplissage suggère qu'à cette température, les excitations thermiques sont telles que les électrons *voient* la surface de fermi, ce qui favorise légèrement la localisation. La chute radicale de la double occupation, à plus faible température, indique l'ouverture du pseudogap. Il serait intéressant dans une future étude de tracer le poids spectral à demi-remplissage pour $2 < \beta < 5$ et de constater si l'ouverture du pseudogap dans le poids spectral se produit à une température qui correspond à la chute de la double occupation. On sait déjà qu'à $\beta = 5$, le poids spectral montre l'ouverture du pseudogap [52]. Cette chute

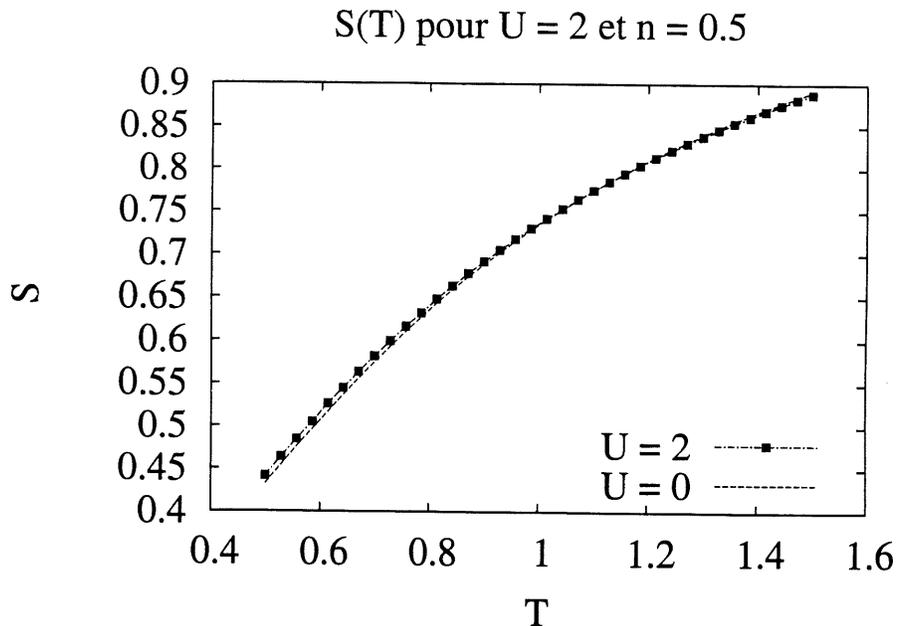


Figure 3.37: Résultat d'entropie pour $U = 0$ et $U = 2$.

de double occupation est le signe d'apparition d'ordre antiferromagnétique. Puisque cette méthode respecte le théorème de Mermin-Wagner, le critère pour l'apparition d'ordre antiferromagnétique est le suivant. Plutôt que de constater une divergence de la longueur de corrélation, cette dernière demeure finie mais devient beaucoup plus grande que la longueur d'onde thermique de de Broglie à une particule: $\xi_{th} = v_F/\pi T$.

3.4 Résumé des résultats importants

Dans la première section, on a vérifié l'uniformité thermodynamique pour la méthode ACDP pour des températures aussi basse que $\frac{1}{10}t$ et pour des valeurs de couplages de $U = 4$. On note que la reproduction des effet de taille finie. Plus la température est élevée ou plus le remplissage est faible, plus l'uniformité est respectée. On calcul l'uniformité pour des valeurs de couplages aussi grande que $U = 4$ et pour des températures aussi faibles que $\beta = 10(t^{-1})$.

3.4. RÉSUMÉ DES RÉSULTATS IMPORTANTS

Dans la seconde section on a fait des comparaisons entre les résultats MCQ et deux autres méthodes, soit la méthode ACDP, la théorie de perturbation au second ordre. Seule la méthode ACDP présente le pic de chaleur spécifique à basse température observée avec le MCQ au demi-remplissage. De plus elle offre les meilleurs résultats de double occupation parmi les trois méthodes comparée au Monte-Carlo. La forme des contributions cinétiques et potentielles à $U = 4$ suggère une méthode de comparaison à haute température où des effets dû aux corrélations se font déjà sentir. On analysant la chaleur spécifique calculée avec la méthode ACDP, il semble que dans le régime pseudogap, des problèmes apparaissent dans l'énergie cinétique.

Les comparaisons entre le Monte-Carlo et la théorie de perturbation interamas a donné de bon résultats sauf pou la courbe de l'énergie en fonction de la température à demi-remplissage.

On a vu que la chute de double occupation, observée avec le Monte-Carlo correspond à l'ouverture du pseudogap. Elle provient d'une manifestation du respect du théorème de Mermin-Wagner. La présence du minimum de double occupation à faible couplage et hors demi-remplissage suggère que l'analogie avec l'effet Pomeranchuk est inadéquat.

Conclusion

Dans ce travail, il a été question de plusieurs choses. D'abord, on a vérifié l'uniformité thermodynamique de la méthode ACDP. Ensuite, on a fait des comparaisons entre des résultats de simulations Monte-Carlo et quatre autres méthodes de résolutions, soit la méthode autocohérente à deux particule, la théorie de perturbation interamas, *fluctuation exchange* et la théorie de perturbation au second ordre. Et finalement, on a analysé la double occupation et le lien possible entre l'apparition d'un minimum locale dans la double occupation et l'effet Pomeranchuk.

Pour se faire, on a montré qu'il est possible d'intégrer analytiquement l'entropie dans la limite des faibles remplissages car pour un remplissage suffisamment faible, on s'approche du cas $U \rightarrow 0$, ce qui nous a conduit à l'équation suivante:

$$S(T, n) = - \int_{\zeta}^n \left[\left(\frac{\partial \mu(T, n')}{\partial T} \right)_{n'} - \ln(n') \right] dn' - n \ln(n) + n - \zeta \left[\ln(f(T)) + \frac{T}{f(T)} \frac{\partial f(T)}{\partial T} \right] \quad (3.14)$$

Ensuite, on a vu qu'il était possible de calculer l'entropie avec la chaleur spécifique sans connaître cette dernière aux basses températures étant donné qu'il est possible de calculer l'entropie à l'infini. Encore une fois, dans cette limite, on s'approche de la limite $U \rightarrow 0$:

$$S(T, n) = 2 \ln \left(\frac{2}{2-n} \right) - n \ln \left(\frac{n}{2-n} \right) - \int_T^{\infty} \frac{1}{T'} \left(\frac{\partial E(T', n)}{\partial T'} \right)_n dT' \quad (3.15)$$

Avec ces résultats, il a été possible de calculer les deux côtés du tableau 2.1. L'uniformité thermodynamique de la méthode ACDP est respectée à environ 3% (figure 3.2) pour $U \leq 2$ et environ 6% pour $2 < U \leq 4$ (figures 3.7). Et ce, pour d'aussi faibles températures que $\frac{1}{10}t$ (figure 3.1). Cette méthode n'utilisant pas les méthodes conservatrices de Kadanoff et Baym y trouve donc un franc succès. On observe aussi que plus le remplissage est bas, plus l'interaction U est faible et plus les températures sont hautes, plus l'uniformité est respectée (figures 3.4 et 3.5).

Des comparaisons avec des résultats de simulations Monte-Carlo Quantique montrent qu'en plus d'être uniforme thermodynamiquement, la méthode ACDP donne des résultats en accord avec les simulations, surtout pour $U \leq 2$. On ne dénote pas beaucoup de différences en terme de précision pour les deux méthodes, $\text{Tr}G$ ou $\text{Tr}(\epsilon + \Sigma/2)G$. Celles-ci présentent les mêmes différences avec le Monte-Carlo aux mêmes endroits (figures 3.10 - 3.16), c'est-à-dire que les plus grandes différences se trouvent près du demi-remplissage et aux plus basses températures.

Des comparaisons avec la théorie des perturbations au second ordre montre que la plus grande force de la méthode ACDP tient à sa capacité de calculer la double occupation avec une grande précision (figures 3.17) et sa capacité à produire le second pic de chaleur spécifique à basse température. Par contre, on découvre aussi que dans le régime pseudogap, lors de la chute de la double occupation, l'énergie cinétique au deuxième ordre perd toute sa fiabilité. Des résultats de double occupation en fonction du nombre de fréquences de Matsubara et de la température indiquent qu'il serait possible d'avoir une plus grande précision en augmentant le nombre de fréquences de Matsubara (figures 3.21). Malheureusement, cela implique de plus grands temps de calculs. Tout ça devient donc une question de compromis. En comparant les résultats de double occupation avec la méthode FLEX, on se rend compte que malgré l'imposition de l'uniformité thermodynamique dans FLEX, elle ne donne pas de très bons résultats pour la double occupation (figure 3.32). La double occupation constitue une quantité thermodynamique puisqu'il s'agit de la contribution potentielle à l'énergie et à la chaleur spécifique.

Les comparaisons des résultats de théorie de perturbation interamas avec le Monte-Carlo ou la méthode ACDP ne permettent pas de conclure clairement quant à l'efficacité

de cette méthode. Les accords (figures 3.30, 3.28 et 3.31) ou les désaccords (figure 3.29) ne sont pas suffisamment unanimes pour trancher clairement. Lorsqu'on regarde en fonction du remplissage à température constante, on obtient de bons résultats, mais la figure 3.29 suggère que les résultats en fonction du remplissage ont été calculés à la meilleure température. Par contre, en fonction de la température, ce n'est pas le cas. Une future étude permettra sûrement de trancher la question plus clairement. Les résultats obtenus pour l'instant sont tout de même encourageant.

Une analyse thermodynamique du minimum de double occupation en fonction de la température n'a pas permis de montrer que ce minimum était dû à l'entropie. Il a été démontré que l'entropie dépendait directement de la double occupation car elle est à l'origine de la contribution potentielle de l'entropie, à l'équation (3.12). Même en comparant avec le cas sans interaction, il n'y a rien qui indique que le minimum de double occupation serait dû à l'entropie (figure 3.37). Il faudra trouver une autre approche pour expliquer la présence de ce minimum de double occupation. Mais en analysant les courbe de double occupation, on observe la chute radicale de la double occupation qui indique l'ouverture du pseudogap.

Donc il a été démontré ici que la méthode autocohérente à deux particules respecte l'uniformité thermodynamique d'une part et cadre bien avec le Monte-Carlo d'autre part. On a vu aussi que la méthode ACDP calcule mieux la double occupation et la chaleur spécifique que la théorie de perturbation au second ordre. Il a aussi été montré que la méthode FLEX ne parvient pas à calculer cette quantité. Les résultats de TPI ouvrent la porte sur une future étude plus approfondie de cette méthode. De plus, l'entropie ne semble pas être à l'origine de la présence du minimum de double occupation. Et finalement, la chute de la double occupation à basse température indique l'ouverture du pseudogap. Dans cette région, des corrections pourront être apportées à La méthode ACDP.

Maintenant que ce travail est complété, il sera possible à l'avenir d'appliquer la méthode ACDP à des problèmes plus réalistes. Il faudra maintenant utiliser des réseaux de taille infinie et vérifier si l'uniformité est toujours respectée. Il faudra faire des calculs à de plus basses températures et faire quelques modifications à la méthode pour cela. Notamment, il faudra viser l'utilisation de certaines méthodes

pour réduire les temps de calculs. Il faudra introduire des sauts aux seconds voisins, voir même plus. Et ultimement, appliquer ce modèle à un système quasi-2D plutôt que strictement 2D et tenir compte d'autres effets ou d'autres paramètres, tels que la pression. Une fois tous ces effets pris en compte, il sera possible de faire de plus justes comparaisons avec des résultats expérimentaux et d'explorer un peu mieux le diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique aux alentours de l'ouverture du pseudogap.

Annexe A

Limite $U = 0$, les solutions importantes

L'hamiltonien étant diagonal dans l'espace réciproque, on trouve facilement l'énergie:

$$E(T, \mu) = \langle \hat{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{1 + e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}} \quad (\text{A.1})$$

Pour trouver la chaleur spécifique, on n'a qu'à dériver l'équation (A.1):

$$C_{\mu} = \left(\frac{\partial E(T, \mu)}{\partial T} \right)_{\mu} = - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}{T^2 (1 + e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)})^2} \quad (\text{A.2})$$

L'entropie a la valeur suivante:

$$S(T, \mu) = - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} f(\mathbf{k}) \ln(f(\mathbf{k})) - (1 - f(\mathbf{k})) \ln(1 - f(\mathbf{k})) \quad (\text{A.3})$$

où $f(\mathbf{k}) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}$, qu'on calcule avec:

$$\Omega(T, \mu) = -k_B T \ln \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{n})} \right] \quad (\text{A.4})$$

$$S(T, \mu) = - \left(\frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial T} \right)_{\mu} \quad (\text{A.5})$$

Et finalement, le remplissage:

$$n(T, \mu) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} f(\mathbf{k}) \quad (\text{A.6})$$

Puisque le remplissage est bien connu, il est facilement possible de faire le passage $A(T, \mu) \rightarrow A(T, n)$, ce qui facilite l'analyse des résultats avec interactions.

Annexe B

Calculs numériques, intégrations et différentiation

Il y a deux grandes catégories de types de données sur lesquelles il faudra faire des opérations d'intégration ou de dérivation pour calculer les quantités thermodynamiques qui nous concernent. Les résultats Monte-Carlo Quantique d'une part, qui comportent des erreurs statistiques, et les résultats analytiques approximatifs d'autre part. Ensuite, pour chacun des deux types, il y a deux sources de problèmes: les problèmes dûs à l'intégration et les problèmes dûs à la différentiation.

B.1 Dérivée numérique

La dérivation numérique constitue un problème de taille dans le traitement de données autant au niveau expérimental que pour toutes formes de simulations numériques. Dans le premier cas, des problèmes de bruit expérimental peuvent survenir et dans le second, les instabilités informatiques rendent cette opération compliquée. En principe, on ne connaît qu'une seule méthode rigoureuse pour effectuer cette opération et il s'agit de l'application directe de la définition de la dérivée. Techniquement on nomme cette opération la *méthode des différences finies*. Voici une discussion de ce problème d'abord du point de vue des résultats analytiques et ensuite du point de

B.1. DÉRIVÉE NUMÉRIQUE

vue des résultats de simulations MCQ.

B.1.1 Dérivation de quantités déterministes

Il s'agit ici de trouver une méthode de dérivation numérique pour des quantités calculées analytiquement. Voici un rappel de la définition de la dérivée:

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \delta x) - f(x)}{\delta x} \quad (\text{B.1})$$

Numériquement, cette opération s'effectue sur une fonction discrète:

$$\left. \frac{df(x_i)}{dx} \right]_{x_{i+1/2}} \approx \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x} \quad (\text{B.2})$$

$$\Delta x = (x_{i+1} - x_i) \quad (\text{B.3})$$

où $x_{i+1/2} = x_i + \Delta x$. Il est possible d'évaluer l'erreur systématique sur la dérivée en faisant un développement de (B.2) autour de $x_{i+1/2}$:

$$f(x_{i+1}) = f(x_{i+1/2}) + \frac{df}{dx} \Delta x' + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \Delta x'^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} \Delta x'^3 + \dots \quad (\text{B.4})$$

$$f(x_i) = f(x_{i+1/2}) - \frac{df}{dx} \Delta x' + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \Delta x'^2 - \frac{1}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} \Delta x'^3 + \dots \quad (\text{B.5})$$

$$\Delta x' = \frac{\Delta x}{2} \quad (\text{B.6})$$

$$\Rightarrow \left. \frac{df(x_i)}{dx} \right]_{x_{i+1/2}} \approx \frac{df}{dx} + \frac{1}{24} \frac{d^3 f}{dx^3} \Delta x^2 \quad (\text{B.7})$$

Ainsi, il est clair que plus Δx est petit, plus la valeur de la dérivée discrète tend vers la valeur exacte.

B.1.2 Dérivées numériques et quantités statistiques

Maintenant, si on tient compte de l'erreur statistique ¹, on remarque à partir de l'équation (B.2) que l'incertitude MCQ intervient deux fois dans la dérivée. Autrement

¹incertitude MCQ

B.2. INTÉGRATIONS NUMÉRIQUES

dit, l'erreur statistique sur la dérivée est grosso modo² le double de l'erreur sur la fonction originale.

Par ailleurs, il faut tenir compte du fait que les données MCQ comportent des fluctuations statistiques. En effet, il subsiste une forme de bruit dans les données MCQ qui peuvent introduire de très grandes erreurs dans l'évaluation de la dérivée. Il existe plusieurs méthodes pour pallier ce problème. Il a été suggéré [50] de faire un lissage à l'aide de fonctions exponentielles ou avec des techniques d'entropie maximale [57]. Il a aussi été suggéré d'utiliser des polynômes [49]. Ensuite, on calcule analytiquement la dérivée de la fonction lissée.

B.2 Intégrations numériques

Deux techniques d'intégration seront citées ici. La première est la forme la plus simple. Malheureusement, c'est la seule technique qui peut être utilisée pour traiter les données MCQ en des temps de calculs raisonnables. La seconde est la technique d'intégration de Romberg, un algorithme d'intégration relativement sophistiqué. En même temps, on exposera les raisons pour lesquelles cet algorithme serait difficilement utilisable pour les simulations MCQ.

B.2.1 À propos des erreurs d'intégration et de l'intégrale indéfinie

Dans cette étude, on ne veut pas seulement évaluer une seule intégrale définie mais bien tracer le résultat de l'intégrale en fonction du paramètre sur lequel on intègre. Une façon de faire est de subdiviser notre intégrale en portions d'intégrales définies et d'écrire le résultat après chaque sous-intégrale. Par contre, de cette façon, les erreurs faites à chaque étape intermédiaire s'accumulent. C'est pourquoi, dans le choix de l'algorithme de Romberg notamment, il sera avantageux de recalculer l'intégrale

²Bien souvent, cette erreur fluctue en fonction de divers paramètres, notamment en fonction de la température.

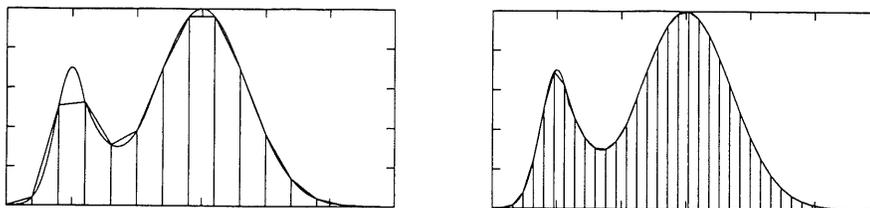


Figure B.1: Deux exemples d'intégrations par trapèzes pour la même fonction. Dans les deux cas, le nombre de points change. Plus le nombre de points est grand, plus le résultat est précis.

à partir de la borne de départ pour chaque point et de laisser tomber le résultat intermédiaire.

B.2.2 Intégration simple, la méthode du trapèze

Cette méthode consiste à décortiquer l'intervalle d'intégration en un certain nombre de points. Entre chacun de ces points, on forme un trapèze dont on calcule la surface.

Il existe une méthode encore plus grossière mais elle se distingue de la méthode des trapèzes seulement aux extrémités. Il s'agit de remplacer les trapèzes par des rectangles (figure B.2). Cette méthode ne nous permet pas d'évaluer l'intégrale de façon satisfaisante, mais elle permet au moins de situer une borne inférieure et une borne supérieure au résultat de l'intégrale.

Avec cette méthode d'intégration, le fait de laisser tomber les résultats intermédiaires et de recommencer l'intégrale du début pour chaque point ne confère aucun avantage ni en précision ni en temps de calculs. À la figure B.3 on trace l'entropie à $U = 0$ calculée par intégration trapèze en fonction du nombre de points. On observe l'inefficacité évidente de cette méthode d'intégration. Ce manque d'efficacité vient en partie du fait que la fonction à intégrer provient d'une dérivée numérique. S'il y a du bruit dans la fonction à dériver, l'intégrale par trapèze introduit des erreurs potentiellement indétectables. En plus, l'erreur sur le point à plus basse température

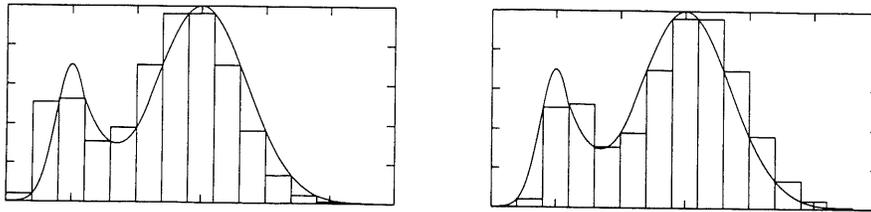


Figure B.2: Les deux figures ci-haut montrent deux intégrations par rectangles pour la même fonction. Les deux résultats présenteront une borne inférieure et supérieure d'un intervalle qui contient le résultat exact.

(on se souvient qu'on intègre à partir de l'infini plutôt que l'inverse) est la suivante:

$$e = \sum_{i=1}^N I_i - T_i \quad (\text{B.8})$$

où N est le nombre de point calculés pour tracé la fonction et $I_i = \int_{a_i}^{b_i} f(x)dx$ pour le point i et $T_i = \frac{h}{2}(a_i + b_i)$. Les a_i et b_i sont les bornes d'intégration pour chaque points intermédiaires de la fonction. $b_{N+1} = a_N$, $b_1 = b$ et $a_N = a$ pour l'intégrale indéfinie évalué de a à b . Chaque erreur occasionné à une étape intermédiaire du calcul est accumulée au point suivant. Ce qui explique les problèmes observés à la figure B.3.

B.2.3 Intégration Romberg

La méthode d'intégration de Romberg est une méthode itérative. À chaque itération, on passe à l'ordre supérieur d'approximation jusqu'à convergence. Il s'agit d'un algorithme d'intégration fréquemment utilisé. Son principe de fonctionnement est le suivant [58]. Soit:

$$I = \int_a^b f(x)dx, \quad (\text{B.9})$$

l'intégrale à évaluer et:

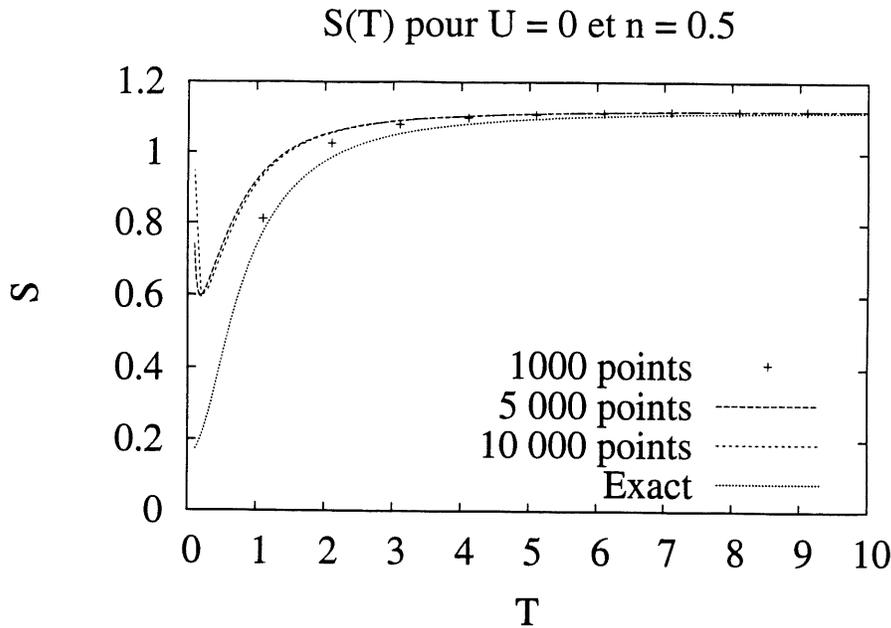


Figure B.3: L'intégrale par trapèze converge vers une valeur erronée de l'entropie

$$T_n = h \left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2} \right), \quad (\text{B.10})$$

l'approximation de l'intégrale, où $y_i = f(x_i)$ et $x_i = a + ih$ ($0 \leq j \leq n$ et $h = (b-a)/n$). Dans le cas où $n = 0$, on retrouve l'intégration par trapèze. Si toutes les dérivées jusqu'à l'ordre $2m + 2$ sont continue sur l'intervall $[a, b]$, alors:

$$E_n = I - T_n = \sum_{j=1}^m \frac{C_j}{n^{2j}} + O\left(\frac{1}{n^{2m+2}}\right) \quad (\text{B.11})$$

où E_n est l'erreur sur l'intégrale et les C_j sont:

$$C_j = K_j \int_a^b f^{(2j)}(x) dx \quad (\text{B.12})$$

Les K_j sont des constantes et $f^{(2j)}(x)$ sont les dérivés d'ordre $2j$. À partir de cette équation, on peut obtenir, par extrapolation, la formule générale:

B.2. INTÉGRATIONS NUMÉRIQUES

$$T_j^k = \frac{4^k T_j^{k-1} - T_{j-1}^{k-1}}{4^k - 1} \quad (\text{B.13})$$

où $k < j$ et où j correspond à l'ordre d'approximation (par exemple, $j = 0$ correspond à la méthode des trapèze, $j = 1$ à la méthode de Simpson, etc) et k indique qu'on utilise $2^k + 1$ valeurs de la fonction pour évaluer l'intégrale. Cette dernière équation constitue l'algorithme de Romberg. Lorsque l'erreur $I - T_j^k$ est plus petite qu'un facteur de tolérance choisit, on cesse d'évaluer l'intégrale.

À la figure B.4 on reprend les calculs d'entropie à $U = 0$. On remarque que cette méthode d'intégration fonctionne bien. Il semble que malgré le bruit, cette méthode d'intégration réussit tout de même à converger vers les bonnes valeurs. Cependant, les temps de calculs sont plus longs. En augmentant le nombre de fréquences de Matsubara (voir section 3.2.2), on peut éviter ce problème car le bruit dans l'énergie diminue. L'erreur sur chaque point n'a pas d'influence sur les points suivants car on évalue l'intégrale avec une borne commune pour chaque point, dans notre cas la borne supérieure.

Cette routine d'intégration peut facilement être utilisée avec la méthode ACDP étant donné les temps de calculs relativement courts. Mais il est pour l'instant impensable d'utiliser cette méthode pour les simulations MCQ. À moins d'une importante parallélisation du programme, les temps de calculs requis pour cette méthode peuvent facilement devenir astronomiques. Par exemple, pour $U = 2$, pour un système 8 par 8 (64 sites), à une température de $0.2t$ avec 29000 mesures, calculer une valeur d'énergie nécessite environ vingt-quatre heures de calculs et pour une température de $0.4t$ il en faut environ huit³. Ce temps de calculs converge vers deux heures à plus haute température, ce qui correspond grossièrement à une dizaine d'heures pour une valeur d'énergie pour une température donnée. Il faut environ quatre ou cinq itérations Romberg pour les méthodes analytiques avant convergence. Donc environ une trentaine de points de chaleur spécifique pour une valeur d'entropie. Si on veut une vingtaine de points pour notre courbe d'entropie, cela prendrait environ 6 000 heures de calcul. Ce qui représente environ 250 jours de calcul. Maintenant, il faut multiplier ce nombre par deux car il faut évaluer l'énergie deux fois pour évaluer la

³sur un pentium III, 666 MHz

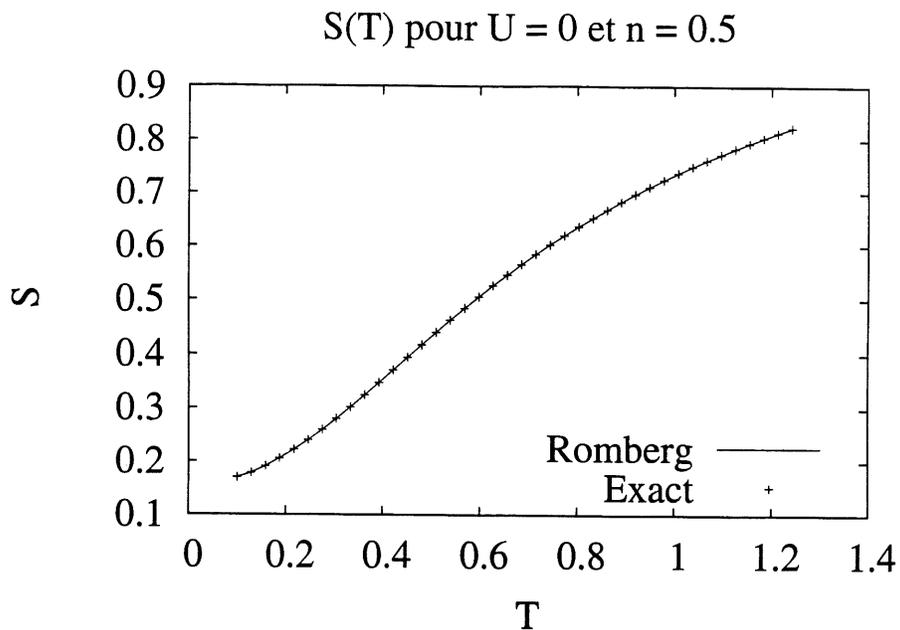


Figure B.4: L'algorithme de Romberg donne la bonne valeur d'entropie

chaleur spécifique une fois. Et on peut facilement supposer que le nombre d'itérations sera plus grand car la dérivée sera difficile à obtenir étant donné les fluctuations statistiques. Chaque itération a pour effet de presque doubler les temps de calculs. Bref, 3 ou 4 années, sinon plus, pour une courbe de vingt points avec cette méthode! C'est pour cette raison qu'avec les résultats MCQ, la méthode des trapèzes est la seule option envisageable pour l'instant. Étant donné la difficulté du calcul de l'entropie par cette méthode (figure B.1), les quantités calculées directement ($E(T, \mu)$, $n(T, \mu)$) seront principalement comparées avec les méthodes analytiques.

Annexe C

Calcul de $\mu(T, n)$ à $n \rightarrow 0$

Si $U = 0$, alors:

$$n = 2 \frac{T}{N} \sum_{l, k_x, k_y} \frac{1}{ik_l - (\epsilon(k_x, k_y) - \mu_0)} \quad (\text{C.1})$$

$$= \frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(k_x, k_y) - \mu_0)} + 1} \quad (\text{C.2})$$

Maintenant, on choisit n dans la limite $n \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow 0} n &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(k_x, k_y) - \mu_0)} + 1} \\ &= \frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(k_x, k_y) - \mu_0)}} \\ &= \frac{2}{N} e^{\beta\mu_0} \sum_{k_x, k_y} e^{-\beta\epsilon(k_x, k_y)} \\ \Rightarrow \ln(n) &= \ln \left(e^{\beta\mu_0} \frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-\beta\epsilon(k_x, k_y)} \right) \\ &= \beta\mu_0 + \ln \left(\frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-\beta\epsilon(k_x, k_y)} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

qui conduit finalement à:

$$\mu_0(n) = T \left[\ln(n) - \ln \left(\frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-\beta \epsilon(k_x, k_y)} \right) \right] \quad (\text{C.4})$$

Donc la dérivée par rapport à la température est la suivante:

$$\left(\frac{\partial \mu_0(T, n)}{\partial T} \right)_n = \ln(n) - \ln(f(T)) - \frac{T}{f(T)} \frac{\partial f(T)}{\partial T} \quad (\text{C.5})$$

où

$$f(T) \equiv \frac{2}{N} \sum_{k_x, k_y} e^{-\beta \epsilon(k_x, k_y)} \quad (\text{C.6})$$

On remarque que seul le premier terme dépend de n , donc le résultat de l'équation (2.22) est:

$$S(T, n)_{U=0} = n \ln(n) - n - n \left[\ln(f(T)) + \frac{T}{f(T)} \frac{\partial f(T)}{\partial T} \right] \quad (\text{C.7})$$

En traçant $\frac{\partial \mu(T, n)}{\partial T}$ pour $U = 0$ et pour n'importe quelle valeur de $U > 0$, on constate qu'à $n \rightarrow 0$, les deux fonctions convergent vers les mêmes valeurs. De plus, $\lim_{n \rightarrow 0} \Sigma = 0$. Donc pour $n \rightarrow 0$ le potentiel chimique à $U > 0$ est identique à celui pour $U = 0$.

Annexe D

Calcul de $S(T = \infty, n)$

Voici le calcul de $S(T = \infty, n)$, nécessaire au calcul de l'entropie par l'intégrale de la chaleur spécifique en intégrant de T à ∞

$$\Omega^0 = -2T \sum_k \ln(1 + e^{-\beta\xi}) \quad (\text{D.1})$$

où

$$\xi = \epsilon - \mu \quad (\text{D.2})$$

Pour trouver $S(T, \mu)$,

$$\Omega(T, \mu) = E(T, \mu) - TS(T, \mu) - \mu n \quad (\text{D.3})$$

$$d\Omega(T, \mu) = -S(T, \mu)dT - nd\mu \quad (\text{D.4})$$

$$\Rightarrow S = - \left(\frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial T} \right)_\mu \quad (\text{D.5})$$

Pour connaître $S(T)$ des électrons libres, il s'agit de dériver l'équation (D.1) par rapport à T .

$$S(T) = 2 \sum_k \ln(1 + e^{-\beta\xi}) + 2T \sum_k \frac{1}{1 + e^{-\beta\xi}}(\xi) \left(\frac{1}{T^2} \right) (e^{-\beta\xi}) \quad (\text{D.6})$$

$$= 2 \sum_k \ln(1 + e^{-\beta\xi}) + \frac{2}{T} \sum_k \frac{\xi}{e^{\beta\xi} + 1}. \quad (\text{D.7})$$

Sauf pour le demi-remplissage, $\mu \rightarrow -\infty$ à température infinie de sorte que

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S(T) = 2N \ln(1 + e^{\beta\mu}) - \frac{2N}{T} \frac{\mu}{1 + e^{-\beta\mu}} \quad (\text{D.8})$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S(T) = 2N \ln(1 + e^{\beta\mu}) - 2N\beta\mu f(-\mu) \quad (\text{D.9})$$

Or, on sait que

$$\frac{2}{N} \sum_k f(\xi) = n \quad (\text{D.10})$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2}{N} \sum_k f(\xi) = 2f(-\mu) = n \quad (\text{D.11})$$

$$\Rightarrow \mu \stackrel{T \rightarrow \infty}{=} T \ln \left(\frac{n}{2-n} \right) \quad (\text{D.12})$$

En remplaçant dans (D.9), on trouve

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S(T) = 2N \ln \left(1 + \frac{n}{2-n} \right) - 2N \left(\frac{1}{1 + \frac{2-n}{n}} \right) \ln \left(\frac{n}{2-n} \right) \quad (\text{D.13})$$

$$= 2N \ln \left(\frac{2}{2-n} \right) - nN \ln \left(\frac{n}{2-n} \right). \quad (\text{D.14})$$

Il y a un problème à $n = 2$, à cause de la division par zéro dans $\ln(\frac{2}{2-n})$, mais on remarque que les deux termes s'annulent exactement et on retrouve $s(T \rightarrow \infty, n = 2) = 0$. De plus, à $n = 1$ on retrouve bien $N \ln 4$. Donc on connaît $S(\infty) \forall n$. On peut retrouver aussi le même résultat avec une approche purement combinatoire et avec l'approximation de Stirling. [REF]

Annexe E

Accélération de convergence dans ACDP

Dans le programme utilisé pour calculer l'énergie, la double occupation et le remplissage, les sommes sur les fréquences de Matsubara entraînent des instabilités numériques. Pour contrer ce problème, on soustrait une certaine quantité dans la somme qu'on rajoute par la suite. Typiquement on utilise un résultat connu, comme la limite $U \rightarrow 0$ ou la limite des grandes fréquences de Matsubara.

Originellement, le programme utilisait les astuces suivantes:

$$E = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, k_n, \sigma} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma(ik_n, \mathbf{k})/2}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma(ik_n, \mathbf{k})} - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + Un/4}{ik_n} \right] + \frac{Un}{4} \quad (\text{E.1})$$

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, k_n} \left[\frac{\Sigma(ik_n, \mathbf{k})}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma(ik_n, \mathbf{k})} - \frac{Un}{2ik_n} \right] + \frac{Un}{4} \quad (\text{E.2})$$

Il s'agit de soustraire la limite pour $U \rightarrow 0$. Maintenant, on utilise plutôt:

$$E = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, k_n, \sigma} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma(ik_n, \mathbf{k})/2}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma(ik_n, \mathbf{k})} - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + Un/4}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - Un/2} \right] \quad (\text{E.3})$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{Un}{4} \right) f(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \quad (\text{E.4})$$

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, k_n} \left[\frac{\Sigma(ik_n, \mathbf{k})}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma(ik_n, \mathbf{k})} - \frac{Un/2}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - Un/2} \right] \quad (\text{E.5})$$

$$+ \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{Un}{2} f(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \quad (\text{E.6})$$

$$f(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - Un/2)}} \quad (\text{E.7})$$

qui est plutôt la limite pour les fréquences de Matsubara infinies. On observe de cette façon une nette amélioration; les résultats s'approchent des résultats MCQ.

Bibliographie

- [1] J. Bardeen, L.N. Cooper, et J.R. Schrieffer. *Phys. Rev.*, **108**:1175, 1957.
- [2] J.G. Bebnorz et K.A. Müller. *Z. Phys. B*, **64**:189, 1986.
- [3] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, et Marcelo J. Rozenberg. *Rev. Mod. Phys.*, **68**:13, 1998.
- [4] H.K. Onnes. *Leiden Commun*, page 120b 122b 124c, 1911.
- [5] W. Meissner et R. Ochsenfeld. *Naturwissenschaft*, **21**:787, 1933.
- [6] Michael Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. International Series in Pure and Applied Physics. McGraw-Hill, 1975.
- [7] Neil W. Ashcroft et N. David Mermin. *Solid States Physics*. Harcourt, 1975.
- [8] W.S. Corak, B.B. Goodman, C.B. Satterthwaite, et A.Wexler. *Phys. Rev.*, **96**:1442, 1954.
- [9] R.E. Glover et M. Tinkham. *Phys. Rev.*, **104**:844, 1956.
- [10] R.E. Glover et M. Tinkham. *Phys. Rev.*, **108**:243, 1957.
- [11] Leon N. Cooper. *Phys. Rev.*, **104**:1189, 1956.
- [12] H. Fröhlich. *Phys. Rev.*, **79**:845, 1950.
- [13] E. Maxwell. *Phys. Rev.*, **78**:477, 1950.
- [14] V.L. Ginzburg et L.D. Laudau. *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.*, **20**:1064, 1950.

BIBLIOGRAPHIE

- [15] A.A. Abrikosov. *Zh Eksperim. i Teor. Fiz.*, **32**:1442, 1957.
- [16] C.E. Gough, M.S. Colciough, E.M. Forgan, R.G. Jordan, M.Keene, C.M. Muirhead, A.I.M. Rae, N. Thomas, J.S. Abell, et S. Sutton. *Nature*, **326**:855, 1987.
- [17] J. Niemeyer, M.R. Dietrich, et C. Politis. *Z. Phys. B*, **67**:155, 1987.
- [18] Gerald Burns. *High-Temperature Superconductivity, An Introduction*. Academic Press, 1992.
- [19] D.J. Van Harlingen. *Rev. Mod. Phys.*, **67**:515, 1995.
- [20] Charles P. Poole Jr., Horacio, et A. Farach Richard J. Creswick. *Superconductivity*. Academic Press, 1995.
- [21] J.L Tallon et J.W Loram. *Physica C*, **349**:53, 2001.
- [22] A.G. Loeser et al. *science*, **237**:325, 1996.
- [23] J. L. Tallon, J. W. Loram, G. V. M. Williams, J. R. Cooper, I. R. Fisher, J. D. Johnson, M. P. Staines, et C. Bernhard. *phys. stat. sol. (b)*, **215**:531, 1999.
- [24] D. Sénéchal, Danny Perez, et Dany Plouffe. Cluster perturbation theory for hubbard models. Accepté pour PRB, 2002.
- [25] S. Uchida et al. *Physica C*, **162**:1677, 1989.
- [26] Hubbard J. *Pros. Roy. Soc. London A*, **276**:238, 1963.
- [27] D. Sénéchal. Mécanique quantique. Notes de cours phy-731, Université de Sherbrooke, 1997.
- [28] S. Allen, H. Touchette, S. Moukouri, Y.M. Vilks, et A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. L.*, **83**:4128, 1999.
- [29] H. Bethe. *Z. Phys.*, **71**:205, 1931.
- [30] E.H. Lieb et F.Y. Wu. *Phys. Rev. Lett.*, **20**:1445, 1968.
- [31] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino, et R.L. Sugar. *Phys. Rev. D*, **24**:2278, 1981.

BIBLIOGRAPHIE

- [32] H.F. Trotter. *Proc. Am. Math. Soc.*, **10**:545, 1959.
- [33] M. Suzuki. *Comm. Math. Phys.*, **51**:183, 1976.
- [34] M. Barma et B.S. Shastry. *Phys. Rev. B*, **18**:3351, 1978.
- [35] R.M. Fye. *Phys Rev. B*, **36**:3833, 1986.
- [36] J.E. Hirsch. *Phys. Rev. B*, **28**:4059, 1983.
- [37] John W. Negele et Henri Orland. *Quantum Many-Particle Systems*. Frontiers in Physics. Addison Wesley, 1988.
- [38] J.E. Hirsch. *Phys. Rev. B*, **31**:4403, 1985.
- [39] Liang Chen et A.-M.S. Tremblay. *Int. J. Mod. Phys.*, **B6**:547, 1992.
- [40] R.T. Scalettar, R.M. Noack, et R.R.P. Singh. *Phys. Rev. B*, **44**:10 502, 1991.
- [41] Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay. *J. Phys. I France*, **7**:1309, 1997.
- [42] H. Ehrenreich, F. Seitz, et D. Turnbull. voir Singwi K.S. et Tosi M.P. p 177.
- [43] Ichimaru S. *Rev. Mod. Phys.*, **54**:1017, 1982.
- [44] J.M. Luttinger et J.C. Ward. *Phys. Rev.*, **114**:1417, 1960.
- [45] G. Baym et P. Kadanoff. *Phys. Rev.*, **127**:1391, 1962.
- [46] G. Baym et P. Kadanoff. *Phys. Rev.*, **124**:287, 1961.
- [47] N.E. Bickers et D.J Scalapino. *Ann. Phys*, **193**:206, 1989.
- [48] D. Sénéchal. *Phys. Rev. Lett.*, **84**:522, 2000.
- [49] D. Duffy et A. Moreo. *Phys. Rev. B*, **55**:12918, 1997.
- [50] T. Paiva, R.T. Scalettar, C. Huscroft, et A.K. McMahan. *Phys. Rev. B*, **63**:125116, 2001.

BIBLIOGRAPHIE

- [51] Thereza Paiva, R. T. Scalettar, Carey Huscroft, et A. K. McMahan. *Phys. Rev. B*, **63**:125116, 2001.
- [52] S. Moukouri, S. Allen, F. Lemay, B. Kyung, D. Poulin, Y.M. Vilk, et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. B*, **61**:7887, 2000.
- [53] F. Lemay. Des propriétés de l'État normal du modèle de hubbard bidimensionnel. Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, 2000.
- [54] I.I. Pomerantchuck. *Zhur. Eksp. i. Theoret. Fiz.*, **20**:919, 1950.
- [55] S.B. Trickey, W.P. Kirk, et E.D. Adams. *Rev. Mod. Phys.*, **44**:668, 1972.
- [56] David M. Lee. *Rev. Mod. Phys.*, **69**:645, 1997.
- [57] M. Jarell et J.E. Gubernatis. *Phys. Rev.*, **269**:133, 1996.
- [58] Robert Alexander Adams. *Calculus: a complete course*. Addison-Wesley, 1995.