

Réseaux de tenseurs et solveurs d'impureté pour la théorie du champ moyen dynamique

par

Alexandre Foley

Thèse présentée au département de physique
en vue de l'obtention du grade de docteur ès sciences (Ph.D.)

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 5 juillet 2020

Le 5 juillet 2020

Le jury à accepté la thèse de Monsieur Alexandre Foley dans sa version finale.

Membres du jury

Prof. David Sénéchal
Directeur de recherche
Département de physique

Prof. Louis Taillefer
Membre interne
Département de physique

Philippe Corboz
Membre externe
Institut of theoretical physics
Université d'Amsterdam

Prof. René Côté
Président Rapporteur
Département de physique

Une méthode est plus importante qu'une découverte, puisque la bonne méthode mène à des découvertes nouvelles et encore plus importantes.

-Lev Landau

Sommaire

Cette thèse porte sur l'obtention de solutions au problème d'impureté de la théorie du champ moyen dynamique sur amas. Le problème d'impureté consiste en des sites en interaction submergées dans un bain d'électrons sans interaction. Ce bain est déterminé par la condition d'autocoherence du champ moyen dynamique. Dans le contexte du champ moyen dynamique, la solution prend la forme d'une fonction de Green, une observable dynamique. La fonction de Green est riche en information : elle encode la densité d'état à une particule, l'énergie potentielle ainsi que les valeurs moyennes de toute observable à un corps. Plusieurs classes de solutionneurs existent pour ce problème d'impureté; on se concentre sur ceux usant du formalisme hamiltonien. Dans ce formalisme, la qualité des résultats est limitée par la représentation hamiltonienne du bain.

Dans le formalisme hamiltonien, le bain du champ moyen dynamique a une grande liberté de jauge : il existe de nombreuses façons de le représenter. Cette liberté crée certaines difficultés : bien que toutes les représentations soient formellement équivalentes, elles ne sont pas toutes également faciles à traiter numériquement. Il faut donc choisir judicieusement. Historiquement, on obtenait une paramétrisation pratique en imposant des contraintes heuristiques au bain. On montre qu'en utilisant les symétries du réseau on peut créer une paramétrisation complète qui se prête au traitement numérique. Avec cette paramétrisation et un solutionneur par diagonalisation exacte, on a revisité le problème de la compétition entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle de Hubbard pour les cuprates. Cette étude montre que la coexistence homogène est possible avec un dopage en électrons, mais impossible avec un dopage aux trous, contrairement aux résultats déjà publiés.

La taille du bain est aussi limitée avec un solutionneur hamiltonien : il doit être discret et fini. Avec un solutionneur par diagonalisation exacte, la difficulté du problème croît exponentiellement avec le nombre d'orbitales. On est limité à moins de vingt orbitales au total avec cette méthode. En utilisant les méthodes sur réseaux de tenseurs, la difficulté numérique des problèmes hamiltoniens croît plutôt de façon polynomiale. Avec les réseaux de tenseurs, calculer la fonction de Green demeure ardu. On pallie cette difficulté en extrapolant la représentation en fractions continues de la fonction de Green. Contrairement aux méthodes par diagonalisation exacte, cette méthode donne une densité d'état qui peut être continue. On démontre le potentiel de cette méthode en l'appliquant au modèle de Hubbard sur le réseau de Bethe.

Remerciements

Merci à tous les gens qui m'ont aidé à accomplir le travail qu'on trouve dans cette thèse.

Merci aux professeurs du département de physique, particulièrement à David Sénéchal et André-Marie Tremblay. Merci à Thomas Baker, Simon Verret et Maxime Charlebois : avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer, de discuter de physique et de méthodes numériques ainsi que de préparer et exécuter des simulations. Un merci particulier à Thomas : sans ton aide la mise en pratique des méthodes de réseaux de tenseurs eut été impossible.

Merci à ma famille et mes amis : votre soutien tout au long de ce projet m'a aidé à persévérer.

Finalement, merci à Anne-Marie Roy, l'amour de ma vie.

Table des matières

Liste des publications	viii
Liste des acronymes	ix
Introduction	1
1 Champ moyen dynamique sur amas	3
1.1 Les fonctions de Green	4
1.1.1 Équations différentielles ordinaires	4
1.1.2 Application à la mécanique quantique	5
1.1.3 L'interaction et la self-énergie	7
1.2 Champ moyen dynamique sur amas	8
1.3 Calcul de la fonction de Green et de la self-énergie	11
1.3.1 Algorithme de Lanczos pour la fonction de Green	11
1.3.2 État fondamental	13
1.3.3 Éléments hors-diagonaux de la fonction de Green	14
2 Applications au modèle de Hubbard pour les cuprates	16
2.1 Paramétrisation du bain et coexistence de la supraconductivité avec l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard	17
2.2 Calcul de la rigidité superfluide	30
2.3 Brisure de la symétrie de translation en CDMFT	30
3 Réseaux de tenseurs	31
3.1 Principes de base	32
3.1.1 Construction d'un MPO	36
3.2 Groupe de renormalisation de la matrice densité	40
3.2.1 Effet de l'ordre des sites sur l'état MPS	41
3.2.2 Optimisation simultanée de plusieurs états	43
3.3 Calcul de fonction de Green à l'aide de réseaux de tenseurs	44
3.3.1 Calcul de la récurrence de Lanczos avec des MPS et MPO	44
4 Extrapolation de fractions continues	47
4.1 Convergence des fractions continues	48
4.2 Impureté d'Anderson	49
4.3 Développement numérique de fonctions en fractions continues	52
4.3.1 Distribution semi-elliptique	53
4.3.2 Distribution avec un gap	54

4.3.3	Distribution comportant des singularités	55
4.3.4	Distribution normale	56
4.3.5	La sécante hyperbolique	57
4.3.6	La gaussienne avec un gap	58
4.3.7	Coefficients α_i – analyse d’erreur	59
4.4	Extrapolation	60
4.4.1	Exemple d’extrapolation	61
4.5	Procédure DMFT	66
5	Application au réseau de Bethe	69
5.1	Effet du nombre d’étages et d’orbitales sur la solution DMFT	71
5.2	Poids spectraux	75
5.3	Valeurs moyennes	82
	Conclusion	86
	Annexe A Algèbre des fractions continues	88
A.1	Addition	89
A.2	Soustraction	89
A.3	Produit	91
A.4	Division	92
	Annexe B Autres modèles d’extrapolation	93
	Bibliographie	94

Liste des publications

Articles Publiés

- [1] A. Foley, S. Verret, A.-M. S. Tremblay et D. Sénéchal, “Coexistence of superconductivity and antiferromagnetism in the Hubbard model for cuprates”, [Physical Review B **99**, 184510 \(2019\)](#).
- [2] S. Verret, J. Roy, A. Foley, M. Charlebois, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay, “Intrinsic cluster-shaped density waves in cellular dynamical mean-field theory”, [Physical Review B **100**, 224520 \(2019\)](#).
- [3] M. Charlebois, S. Verret, A. Foley, O. Simard, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay, “Hall effect in cuprates with an incommensurate collinear spin-density wave”, [Physical Review B **96**, 205132 \(2017\)](#).
- [4] O. Simard, C.-D. Hébert, A. Foley, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay, “Superfluid stiffness in cuprates : effect of mott transition and phase competition”, [Physical Review B **100**, 094506 \(2019\)](#).

Article sur l’arXiv

- [5] A. Di Paolo, T. E. Baker, A. Foley, D. Sénéchal et A. Blais, “Efficient modeling of superconducting quantum circuits with tensor networks”, [arXiv :1912.01018 \[quant-ph\] \(2019\)](#).

Brevet

- [6] A. Foley, T. E. Baker, A. Di Paolo et D. Sénéchal, “COMPUTER-IMPLEMENTED METHOD OF SOLVING A HAMILTONIAN”, brev. provisoire, application 62/942,868 (SOCPRA, 3 déc. 2019).

Voir section 3.2.2 pour plus de détails au sujet de ce brevet.

Liste des acronymes

- (C)DMFT : (*Cluster*) *Dynamical Mean Field Theory*, Champ moyen dynamique (sur amas)
- (C)DMFT-ED : La (C)DMFT utilisée avec un solveur d'impureté de type ED.
- DMRG : *Density Matrix Renormalization Group*, Groupe de renormalisation de la matrice densité.
- ED : *Exact Diagonalization*, Diagonalisation exacte.
- MPO : *Matrix Product Operator*, Opérateur en produits matriciels.
- MPS : *Matrix Product State*, État en produits matriciels.
- PEPS : *Projected Entangled Pair State*, État de paires enchevêtrées.
- QMC : *Quantum Monte Carlo*, Monte-Carlo Quantique.
- SVD : *Singular Value Decomposition*, Décomposition en valeurs singulières.
- TN : *Tensor Network*, Réseau de tenseurs.
- TNR : *Tensor Network Renormalization*, Groupe de Renormalisation de réseaux de tenseurs.

Introduction

Historiquement, l'amélioration de la connaissance humaine au sujet des matériaux est la clé de nombreux développements technologiques. Certainement la plus célèbre de ces technologies, le transistor, l'élément central de tous les ordinateurs modernes, découle de l'étude des semi-conducteurs. Une autre technologie, les aimants nécessaires à l'imagerie médicale par résonance magnétique, découle de la découverte des supraconducteurs à haute température. Dans le cas des supraconducteurs à haute température et de nombreux autres matériaux aux propriétés exotiques, on croit que ce sont les fortes corrélations et les propriétés quantiques des électrons qui sont à l'origine des comportements observés. L'étude théorique de ces matériaux se fait à l'aide de modèles, souvent le modèle de Hubbard ou des variations sur celui-ci. Les fortes corrélations font en sorte que ces modèles sont souvent difficiles à résoudre, des méthodes adaptées sont donc nécessaires.

Dans l'étude des électrons fortement corrélés, les méthodes sur amas quantiques ont fait leurs preuves. Ces méthodes nous permettent d'étudier des systèmes avec des couplages électroniques trop forts pour les méthodes traditionnelles, comme la théorie des perturbations. Grossièrement, les méthodes sur amas quantiques procèdent en obtenant la solution d'un petit système, qu'on appelle *impureté* ou *amas*. On en extrapole ensuite une solution approximative pour un réseau infini ; cette étape du problème est appelée le *problème d'impureté*. La fidélité de cette extrapolation est contrôlée par la taille de l'impureté. Les méthodes sur amas sont particulièrement bien adaptées au modèle de Hubbard. Dans notre quête vers des résultats toujours plus précis et fidèles à la réalité, ces méthodes sur amas souffrent d'un point faible saillant : le problème d'impureté devient rapidement trop dur pour les ordinateurs actuels et ceux d'un avenir proche.

Il y a présentement deux types de solveurs bien établis pour résoudre le problème d'impureté des méthodes sur amas : la diagonalisation exacte et les solveurs Monte-Carlo à champs auxiliaires. D'une certaine façon, les deux méthodes sont complémentaires : le Monte-Carlo doit travailler à des températures relativement élevées alors que les méthodes de diagonalisation exacte sont confinées à des températures très basses. En pratique, les méthodes Monte-Carlo travaillent en «temps imaginaire», ce qui a comme conséquence que seules les propriétés thermodynamiques sont directement accessibles. La dynamique est indirectement accessible avec des méthodes de prolongement analytiques numériques. Avec la diagonalisation exacte, il est possible de calculer des quantités relevant de la dynamique aussi facilement que celles relevant de la thermodynamique. Malheureusement pour les

partisans de la diagonalisation exacte, ces méthodes ont une limitation supplémentaire lorsqu'on fait appel à la théorie du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) : alors que les solveurs Monte-Carlo sont en mesure de traiter implicitement un champ moyen dynamique de complexité arbitraire, la diagonalisation exacte doit le traiter dans le formalisme hamiltonien et la richesse du champ moyen dynamique s'en trouve limitée.

Des développements plus récents ont établi le formalisme des réseaux de tenseurs. Celui-ci a été appliqué avec beaucoup de succès à plusieurs classes de problèmes à faible dimension, notamment les isolants unidimensionnels avec la DMRG [1, 2], les changements de phase en 1D avec la TNR [3] et certains problèmes bidimensionnels avec les PEPS [1, 4]. Ce formalisme consiste à exprimer la fonction d'onde ou encore la matrice densité sous la forme d'un réseau de tenseurs et ensuite d'en optimiser l'énergie. Le problème pour le physicien devient donc celui d'adapter la topologie du réseau de tenseurs de façon à maximiser sa capacité à encoder l'information pertinente au problème d'intérêt, tout en gardant ce réseau le plus simple possible. Très récemment, quelques problèmes d'impureté ont été résolus avec des réseaux de tenseurs [5-7].

Cette thèse a deux objectifs. Dans un premier temps (chap. 2), on tente d'améliorer au maximum la fidélité des résultats de la CDMFT dans les limites de la diagonalisation exacte. On accomplit ceci en s'assurant que le bain contient tous les paramètres indépendants possibles étant données les symétries du problème étudié. Dans un deuxième temps (chap. 3-5), on met au point une méthode numérique de solution d'impuretés exploitant le formalisme des réseaux de tenseurs. Cette méthode doit être en mesure de traiter un champ moyen dynamique plus complexe que ce qui est possible avec la diagonalisation exacte.

Cette thèse est organisée comme suit : on explique au chapitre 1 le formalisme de la DMFT et les besoins des méthodes sur amas. Au chapitre 2, on présente les travaux accomplis avec un solveur par diagonalisation exacte. Au chapitre 3, on explore le formalisme des réseaux de tenseurs et on l'applique au problème d'impureté. Au chapitre 4, on explique les principes de base de la méthode récursive [8] et on explique comment l'adapter au problème d'impureté. Finalement, au chapitre 5, on présente les résultats obtenus en combinant la méthode récursive avec les réseaux de tenseurs.

Chapitre 1

Champ moyen dynamique sur amas

Les méthodes d'amas quantiques visent à obtenir une approximation de la fonction de Green d'un modèle d'électrons fortement corrélés sur réseau. L'intérêt d'obtenir la fonction de Green¹ tient à sa relation à plusieurs observables communément étudiées dans les laboratoires, par exemple la densité d'états, et à notre capacité à calculer des solutions approximatives à des problèmes difficiles en fonction de celle-ci. Un avantage de la fonction de Green est sa simplicité lorsqu'on la compare à la fonction d'onde du même système : pour la fonction d'onde, il faut considérer la position et la quantité de mouvement de chacune des particules présentes, tandis que la fonction de Green dépend, dans le pire des cas, de seulement deux temps et deux positions. Lorsqu'on se préoccupe des propriétés collectives d'un grand nombre de particules, cette différence devient un avantage substantiel de la fonction de Green.

Dans cette thèse, on s'attarde tout particulièrement à une méthode d'approximation de la fonction de Green d'un modèle sur réseau : la théorie du champ moyen dynamique sur amas. Dans ce chapitre, on explique d'abord ce qu'est une fonction de Green dans le cadre de la mécanique quantique, ensuite on explique en quoi consiste le champ moyen dynamique et finalement on décrit une méthode élémentaire pour obtenir numériquement la fonction de Green d'un amas quantique, la diagonalisation exacte (ED).

1. Dans cette thèse, l'expression *fonction de Green* désigne ce qu'on appelle plus généralement la *fonction de Green à une particule*.

1.1 Les fonctions de Green

La définition mathématique originale de la fonction de Green ne correspond pas tout à fait à celle des théories des champs ou de l'état solide ; pour ces dernières, il serait plus approprié de parler du *propagateur*. Dans cette section, on explique ce qu'est une fonction de Green du point de vue mathématique et la situation où celle-ci coïncide avec le propagateur de particules. Le propagateur d'ondes ou de particules est la fonction de Green des physiciens.

La fonction de Green est un objet mathématique inventé en 1841 par George Green, un meunier anglais, dans le but de résoudre des équations différentielles linéaires avec des termes sources, spécifiquement celles décrivant le potentiel électrostatique [9]. Dans les dix années qui suivirent, George Green appliqua la même technique pour décrire la propagation d'ondes dans différents milieux [10]. Dans cette thèse, on s'attarde seulement aux quelques propriétés de la fonction de Green immédiatement importantes pour les méthodes de solutions numériques utilisées et le calcul des observables. Pour une exploration plus en profondeur de la fonction de Green dans le problème à N-corps, consultez les références [11-14].

1.1.1 Équations différentielles ordinaires

Pour un opérateur différentiel linéaire L_r agissant sur un ensemble de variables $\{r_i\}$, une solution $f(r)$ et un terme de source $y(r)$, l'équation différentielle est :

$$L_r f(r) = \sum_{i,n} l_{i,n}(r) \frac{\partial^n}{\partial r_i^n} f(r) = y(r). \quad (1.1)$$

La fonction de Green $G(r)$ est alors définie par

$$L_r G(r - r') \equiv \delta(r - r'). \quad (1.2)$$

La fonction de Green est donc la solution à l'équation différentielle lorsque le terme de source est un delta de Dirac. D'un certain point de vue, il s'agit de l'inverse multiplicatif de l'opérateur différentiel. Avec la fonction de Green, on peut obtenir une solution à l'équation différentielle pour n'importe quel terme de source à l'aide de la convolution suivante :

$$f(r) = \int dr' G(r - r') y(r'). \quad (1.3)$$

Ce formalisme est aussi applicable aux équations intégro-différentielles, et ce sans aucune modification. En fait, la propriété centrale de l'opérateur L_r est sa linéarité.

Pour les mathématiciens, c'est (1.2) qui définit ce qu'est une fonction de Green. L'utilité de cette équation est limitée aux problèmes linéaires.

1.1.2 Application à la mécanique quantique

La définition de la fonction de Green dans la section précédente n'est pas celle utilisée pour le problème à N-corps ; comme l'équation de Schrödinger est toujours homogène, l'équation (1.3) est inutile pour obtenir une solution exacte. Il est possible d'utiliser cette dernière dans le cadre de la théorie des perturbations : une perturbation peut être traitée comme un terme inhomogène. Dans le cadre du problème à N-corps, il y a plusieurs définitions possibles de la fonction de Green. Dans le cadre de cette thèse, une seule d'entre elles est nécessaire : la fonction de Green retardée. Elle est définie ainsi :

$$G(r, r'; t) = -i \langle \{\Psi(r, t), \Psi^\dagger(r', 0)\} \rangle \Theta(t). \quad (1.4)$$

où $\{\Psi(r, t), \Psi^\dagger(r', 0)\}$ est l'anticommutateur de l'opérateur d'annihilation fermionique au temps t et à la position r avec l'opérateur de création à la position r' et au temps 0, la valeur moyenne est prise dans l'état à l'équilibre du système, et $\Theta(t)$ est la distribution de Heaviside. La variable de position r contient aussi l'ensemble des degrés de liberté internes d'une particule, par exemple le spin. La distribution de Heaviside fait en sorte que la fonction de Green est un objet causal : la particule ajoutée au temps 0 dans le commutateur peut seulement disparaître plus tard, jamais avant d'être apparue. Il s'agit donc d'une observable dépendant du temps et de la position. En inspectant cette formule, on peut immédiatement constater que la fonction de Green contient de l'information au sujet de la propagation de particules et de trous dans un milieu. En effet, la valeur moyenne du premier terme de l'anticommutateur est l'amplitude de probabilité qu'une particule créée à la position r' au temps 0 se retrouve à la position r au temps t , et le deuxième terme est le conjugué complexe de l'amplitude de probabilité qu'un trou apparu en r' au temps 0 se retrouve en r au temps t .

Cette fonction de Green n'est pas celle de l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde, mais celle d'une équation connexe. Dans le cas sans interaction entre les particules, la fonction de Green (1.4) est la solution de l'équation

$$\int dr'' [i\delta(r - r'') \frac{\partial}{\partial t} - H_0(r, r'')] G_0(r'', r'; t) = \delta(r - r') \delta(t) \quad (1.5)$$

où $H_0(r, r')$ est l'élément de matrice entre les positions r et r' du hamiltonien et les unités sont choisies de sorte que $\hbar \equiv 1$. Cette équation a la structure de l'éq. (1.2) : il s'agit d'une fonction de Green au sens de la section précédente. Pour les systèmes invariants par translation, cette équation peut être résolue analytiquement. L'équation de Schrödinger de l'état à N-corps $|\Phi(t)\rangle$, dans le formalisme de la seconde quantification, est

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = \mathbf{H}_0 |\Phi(t)\rangle = \iint dr dr' H_0(r, r') \Psi^\dagger(r, 0) \Psi(r', 0) |\Phi(t)\rangle. \quad (1.6)$$

Maintenant, on doit se demander comment extraire de l'information pertinente de la fonction de Green. Pour ce faire, on passe du temps aux fréquences à l'aide d'une transformée

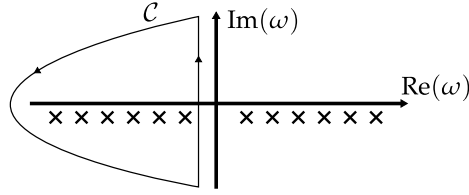


FIGURE 1.1 Le parcours fermé \mathcal{C} sur lequel on intègre sur le plan complexe. Les croix symbolisent la position des pôles de la fonction de Green. Tous les pôles situés à une fréquence négative sont inclus dans le parcours \mathcal{C} .

de Fourier. On peut aisément démontrer que la transformée de Fourier sur le temps de (1.4) est

$$G(r', r; \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_n \langle 0 | \Psi(r) | n \rangle \frac{1}{E_0 - E_n + \omega + i\eta} \langle n | \Psi^\dagger(r') | 0 \rangle + \langle 0 | \Psi^\dagger(r') | n \rangle \frac{1}{E_n - E_0 + \omega + i\eta} \langle n | \Psi(r) | 0 \rangle \quad (1.7)$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental du système, $|n\rangle$ est le n^e état propre du système et E_n l'énergie de l'état propre n .

Cette formule est communément appelée la *représentation de Lehmann*. Sous cette forme, quelques identités très utiles sont obtenues. Tout d'abord, en inspectant les deux termes de la représentation de Lehmann, on remarque que tous les pôles du premier terme sont situés à des fréquences réelles et positives et ceux du deuxième à des fréquences réelles négatives.

En intégrant sur le plan complexe les fréquences le long du trajet \mathcal{C} (fig. 1.1) choisi de façon à inclure uniquement les pôles du deuxième terme, on obtient, par le théorème des résidus, une quantité fort utile au calcul de la valeur moyenne de tout opérateur à un corps \mathbf{O} :

$$\mathbf{O} \equiv \iint dr dr' O(r, r') \Psi^\dagger(r') \Psi(r) \quad (1.8)$$

$$\oint_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} G(r', r; \omega) = \langle \Psi^\dagger(r') \Psi(r) \rangle \quad (1.9)$$

$$\langle \mathbf{O} \rangle = \iint dr dr' O(r, r') \oint_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} G(r', r; \omega). \quad (1.10)$$

La densité d'états à une particule est une autre quantité qui s'exprime en termes de la fonction de Green pour le problème à N-corps. La densité d'états à une particule, dans le cas sans interaction, est définie par :

$$N(\omega) = \sum_i \delta(\omega - \epsilon_i) \quad (1.11)$$

où les ϵ_i sont les énergies des états à une particule du système. Elle peut aussi être exprimée par la fonction de Green :

$$N(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int dr G(\omega, r, r). \quad (1.12)$$

Les équations (1.11) et (1.12) sont équivalentes seulement dans le cas sans interaction et la première est pertinente seulement dans ce cas. Quand des interactions sont présentes, il n'y a pas de relation triviale entre l'énergie des états à une particule et les variations d'énergie dues aux excitations à une particule de l'état fondamental.

On peut même définir une généralisation de la densité d'états qui est fonction des degrés de liberté des particules : le poids spectral²,

$$A(\omega, r, r') \equiv -2\text{Im}(G(\omega, r, r')). \quad (1.13)$$

Si on substitue la représentation de Lehmann dans la formule précédente et qu'on évalue la limite sur η on obtient :

$$A(r', r; \omega) = 2\pi \sum_n \left\{ \langle 0 | \Psi(r) | n \rangle \delta(E_0 - E_n + \omega) \langle n | \Psi^\dagger(r') | 0 \rangle + \langle 0 | \Psi^\dagger(r') | n \rangle \delta(E_n - E_0 + \omega) \langle n | \Psi(r) | 0 \rangle \right\}. \quad (1.14)$$

Le poids spectral contient toute l'information présente dans la fonction de Green. En effet, celle-ci s'exprime ainsi en fonction du poids spectral :

$$G(\omega, r, r') = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \frac{A(\omega', r, r')}{\omega + i\eta - \omega'}. \quad (1.15)$$

Cette dernière équation est une conséquence de la causalité de la fonction de Green et est une *relation de Kramers-Krönig*. Une conséquence importante de (1.15) est que les éléments diagonaux de la fonction de Green, $G(\omega, r, r)$, peuvent être exprimés sous la forme de fractions continues [15, Chap.13]. L'algorithme présenté à la section 1.3 exploite ce fait afin d'obtenir une description de la fonction de Green dans cette représentation.

1.1.3 L'interaction et la self-énergie

Lorsqu'on ajoute un ou plusieurs termes d'interaction au hamiltonien, obtenir la fonction de Green devient significativement plus compliqué. Un terme supplémentaire apparaît dans l'équation de la dynamique de la fonction de Green (1.5) : la self-énergie. La présence de la self-énergie rend l'équation beaucoup plus difficile à résoudre exactement ; il n'y a pas de solution exacte connue dans la vaste majorité des cas.

En présence d'interactions, la dynamique de la fonction de Green est décrite par l'équation de Dyson,

$$\int d^3r'' [G_0^{-1}(r', r'', \omega) - \Sigma(r', r'', \omega)] G(r'', r, \omega) = \delta(r' - r), \quad (1.16)$$

2. Cette équation est simplifiée grâce à la symétrie sous inversion du temps. Pour les systèmes n'ayant pas cette symétrie, il faut utiliser une formule un peu plus compliquée [11].

où $G_0(r, r', \omega)$ est la transformée de Fourier de la solution à (1.5) et $\Sigma(r, r', \omega)$ est la self-énergie. Pour un hamiltonien avec un terme d'interaction à deux corps :

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \iint d^3r_1 d^3r_2 \frac{V(r_1, r_2)}{2} \Psi^\dagger(r_1) \Psi^\dagger(r_2) \Psi(r_2) \Psi(r_1), \quad (1.17)$$

la self-énergie est définie comme ceci :

$$\begin{aligned} \Sigma(r, r', \omega) \equiv & \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \iint d^3r'' d^3r_1 V(r, r_1) \\ & \times \sum_n \left[\frac{\langle \Omega | \Psi^\dagger(r_1) \Psi(r_1) \Psi(r) | n \rangle \langle n | \Psi^\dagger(r'') | \Omega \rangle}{E_0 - E_n + \omega + i\eta} \right. \\ & \left. + \frac{\langle \Omega | \Psi^\dagger(r'') | n \rangle \langle n | \Psi^\dagger(r_1) \Psi(r_1) \Psi(r') | \Omega \rangle}{E_n - E_0 + \omega + i\eta} \right] \\ & \times G^{-1}(r'', r', \omega). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Cette fonction encode l'impact de l'interaction entre les particules sur leur propagation et l'impact de leur propagation sur l'énergie d'interaction. Comme on peut le constater en inspectant la définition de la self-énergie (1.18), on peut en extraire la valeur moyenne de l'interaction. On fait cela en intégrant sur le parcours illustré à la fig. 1.1 (le même que pour l'éq. (1.9)) le produit de la self-énergie avec la fonction de Green et en prenant la trace de l'objet résultant :

$$\langle \mathbf{V} \rangle = \iint \oint_C \Sigma(r, r'; \omega) G(r', r; \omega) \frac{d\omega}{2\pi i} dr dr' \quad (1.19)$$

Obtenir une solution exacte à l'équation de Dyson (1.16) est aussi difficile que de résoudre l'équation de Schrödinger, car la self-énergie est définie en termes de deux propagateurs, dont un est la fonction de Green qu'on souhaite résoudre. Il faut donc faire appel à des méthodes approximatives. Dans les situations où la contribution sans interaction à la fonction de Green peut être obtenue de façon exacte, le problème devient celui de calculer la self-énergie. Le champ moyen dynamique nous offre une solution approximative dans cette situation.

1.2 Champ moyen dynamique sur amas

Le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) est une méthode approximative pour obtenir la fonction de Green d'un modèle défini sur un réseau cristallin. Cette méthode est typiquement utilisée dans le régime du couplage intermédiaire, lorsque l'amplitude du terme d'interaction est comparable à la largeur de bande de la densité d'états sans interaction. Il s'agit du régime où ni l'énergie cinétique des particules, ni l'interaction entre celles-ci ne domine, rendant les approches plus traditionnelles, telle la théorie des perturbations, incapables de produire des résultats satisfaisants.

Le principe du champ moyen dynamique sur amas est le suivant : on substitue au réseau un amas de quelques sites dans un bain de particules sans interaction. Le hamiltonien de l'amas est celui du réseau où tous les sites sauf ceux de l'amas sont tronqués. La fonction de

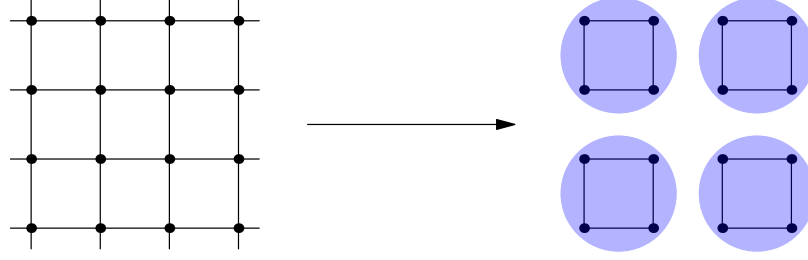


FIGURE 1.2 Réduction d'un réseau à un amas. Dans l'illustration seulement une plaquette de quatre sites du réseau est conservée dans l'amas. Le nuage bleu autour de la plaquette représente le bain sans-interaction qui est couplé à l'amas.

Green du réseau est calculée en utilisant la self-énergie de l'amas dans l'équation de Dyson du réseau. Les paramètres du bain sont ajustés de telle sorte que la fonction de Green du réseau soit localement équivalente à celle de l'amas [16-18]. Expliquons plus en détail.

Considérons le hamiltonien du modèle de Hubbard :

$$H = \sum_{rr'\sigma} t_{r-r'} \mathbf{c}_{r\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{r'\sigma} + \sum_r U \mathbf{c}_{r\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{r\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{r\downarrow} \mathbf{c}_{r\uparrow} \quad , \quad (1.20)$$

où $\mathbf{c}_{r\sigma}^{(\dagger)}$ est l'opérateur d'annihilation (de création) d'un électron de spin σ au site r du réseau cristallin, la matrice $t_{r-r'}$ contient l'amplitude de saut entre les sites r et r' , ainsi que le potentiel chimique dans le terme t_0 et finalement U est le coût en énergie d'avoir deux particules qui occupent le même site. Le hamiltonien d'un amas CDMFT pour ce réseau est

$$H_{\text{imp}} = \sum_{R,R'\sigma} t_{R-R'} \mathbf{c}_{R\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{R'\sigma} + \sum_R U \mathbf{c}_{R\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{R\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{R\downarrow} \mathbf{c}_{R\uparrow} + \sum_{R\sigma;\alpha} \theta_{R\sigma,\alpha} (\mathbf{c}_{R\sigma}^\dagger \mathbf{b}_\alpha + \mathbf{b}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_{R\sigma}) + \sum_\alpha \epsilon_\alpha \mathbf{b}_\alpha^\dagger \mathbf{b}_\alpha \quad , \quad (1.21)$$

où \mathbf{b}_α est l'opérateur d'annihilation d'une particule à l'orbitale α du bain, et les sommes sur les sites R sont restreintes aux sites de l'amas. Ce Hamiltonien est celui d'un problème d'impureté, le *modèle d'Anderson*. Pour reconstruire la fonction de Green du réseau, on considère que l'amas est répété de façon à créer un super-réseau reproduisant tous les sites du réseau original, tel qu'illustré à la figure 1.3. À moins d'avoir un seul site par amas, ce super-réseau ne sera pas invariant par translation comme le réseau original. Il s'agit d'un des principaux défauts de la CDMFT. La zone de Brillouin du super réseau est plus petite que celle du réseau original ; on la nomme la *zone de Brillouin réduite*. Dans cette zone de Brillouin réduite, l'approximation pour la fonction de Green est

$$\mathbf{G}_r(\omega, \tilde{\mathbf{k}}) = [\omega - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}}) - \mathbf{\Sigma}_a(\omega)]^{-1} \quad , \quad (1.22)$$

où $\mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})$ est la matrice de saut du réseau représentée dans la zone de Brillouin réduite, $\mathbf{\Sigma}_a(\omega)$ est la self-énergie de l'amas et les opérateurs en gras sont des matrices en R, R' . Pour alléger la notation, la limite $\eta \rightarrow 0$ sur la fréquence $\omega + i\eta$ est implicite. Cette fonction de Green est une matrice à l'échelle de l'amas, et une fonction dans la zone de Brillouin réduite. Avec cette

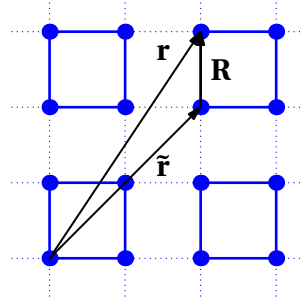


FIGURE 1.3 Un super-réseau construit avec des amas 2×2 . Un vecteur du réseau original, \mathbf{r} , est décomposé en termes d'un vecteur du super-réseau $\tilde{\mathbf{r}}$ et un vecteur intra-amas \mathbf{R} . Si tous les sites du réseau sont identiques, la zone de Brillouin du super-réseau a un quart de la surface de la zone de Brillouin du réseau. Quatre bandes sont situées à l'intérieur de la zone de Brillouin du super-réseau, une pour chacun des sites de l'amas.

formule pour la fonction de Green du réseau, nous sommes en mesure d'écrire l'équation de la condition d'auto-cohérence de la CDMFT :

$$\int \frac{d^d \tilde{k}}{(2\pi)^d} \mathbf{G}_r(\omega, \tilde{k}) - \mathbf{G}_c(\omega) = 0. \quad (1.23)$$

Cette équation demande que la fonction de Green du réseau $\mathbf{G}_r(k, \omega)$ soit localement équivalente à la fonction de Green de l'impureté $\mathbf{G}_c(\omega)$ et ce pour toute fréquence ω . Cette condition est satisfaite en optimisant les paramètres du bain $\theta_{r\sigma, \alpha}$ et ϵ_α . En pratique, on optimise ces paramètres en les ajustant avec une self-énergie fixe. C'est-à-dire qu'on obtient la self-énergie d'un amas avec un bain donné, et qu'on minimise la différence entre les deux fonctions de Green en variant seulement les paramètres du bain dans le deuxième terme de l'éq. (1.23) et on réévalue la self-énergie de l'amas avec les nouveaux paramètres jusqu'à ce que le bain soit optimal. Les étapes de la procédure sont illustrées à la fig. 1.4 Dans le cadre de cette approximation, la dépendance de l'éq. (1.23) sur les paramètres du bain est relativement simple; seul \mathbf{G}_c en dépend :

$$\mathbf{G}_c(\omega) = [\mathbf{G}_{0c}^{-1}(\omega) - \mathbf{\Gamma}(\omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega)]^{-1} \quad (1.24)$$

$$\Gamma_{R\sigma, R'\sigma'}(\omega) \equiv \sum_{\alpha} \frac{\theta_{R\sigma, \alpha}^* \theta_{R'\sigma', \alpha}}{\omega - \epsilon_{\alpha}}. \quad (1.25)$$

La simplicité de cette dépendance de G_c sur le bain est une conséquence de l'absence d'interaction dans ce dernier. En effet, c'est seulement à cause de l'absence d'interaction que la fonction d'hybridation $\mathbf{\Gamma}(\omega)$ est connue. Notons que la fonction de Green de l'impureté $\mathbf{G}_c(\omega)$ et l'hybridation $\mathbf{\Gamma}(\omega)$ sont indépendantes de la base utilisée pour décrire le bain.

Il ne nous manque plus qu'un ingrédient pour mettre en pratique le champ moyen dynamique sur amas : une méthode numérique pour calculer la fonction de Green et la self-énergie d'un amas, c'est-à-dire résoudre le problème d'impureté.

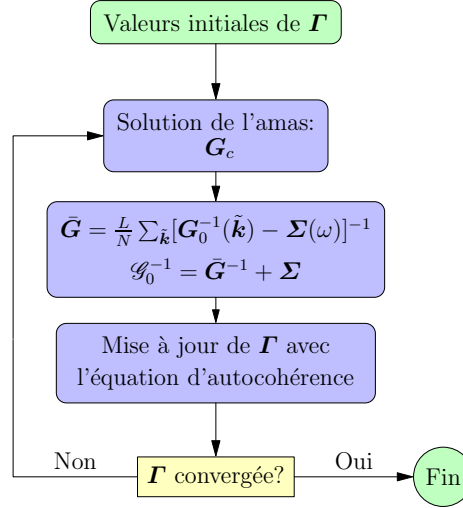


FIGURE 1.4 Schéma de l'algorithme (C)DMFT.

1.3 Calcul de la fonction de Green et de la self-énergie

1.3.1 Algorithme de Lanczos pour la fonction de Green

La causalité de la fonction de Green entraîne qu'il est possible de représenter celle-ci sous la forme d'une fraction continue. En effet, l'éq. (1.15) est une conséquence de la présence de la distribution de Heaviside dans la fonction de Green dépendant du temps. L'intégrale de cette équation est une transformée de Stieltjes et la solution de celle-ci peut être représentée sous la forme d'une fraction continue de Jacobi [15]. En fait, on peut même aller un peu plus loin : chacun des deux termes provenant de l'anticommutateur admet une représentation sous forme de fraction continue dans sa représentation de Fourier, puisque ces deux termes sont causaux. Dans la représentation de Lehmann de la fonction de Green (1.7) chacun de ces deux termes est un élément de l'inverse d'une matrice hermitienne. Cela devient plus explicite lorsqu'on enlève les relations de fermeture de l'équation (1.7) :

$$G(r', r; \omega) = \langle 0 | \mathbf{c}_r [E_0 - \mathbf{H} + \omega]^{-1} \mathbf{c}_r^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | \mathbf{c}_r^\dagger [\mathbf{H} - E_0 + \omega]^{-1} \mathbf{c}_r | 0 \rangle. \quad (1.26)$$

Nous allons représenter les éléments diagonaux ($r = r'$) de $[E_0 - \mathbf{H} + \omega]^{-1}$ et $[\mathbf{H} - E_0 + \omega]^{-1}$ sous la forme d'une fraction continue de Jacobi (voir la section 4.1 pour une introduction aux fractions continues) :

$$\frac{b_0^2}{\omega - a_0 - \frac{b_1^2}{\omega - a_1 - \dots}} = - \prod_{i=0}^{\infty} \frac{-b_i^2}{\omega - \alpha_i}. \quad (1.27)$$

La première étape pour obtenir les coefficients a_i et b_i de la formule précédente est d'appliquer l'algorithme de Lanczos au hamiltonien. Cet algorithme effectue un changement de base sur une matrice de telle sorte que celle-ci devient tridiagonale. Si la base générée par l'algorithme de Lanczos est formée des états orthonormaux $\{|\phi_i\rangle\}$ et que dans cette base le hamiltonien à la forme suivante :

$$H = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & & \\ & \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{m-2} \\ & & & \beta_{m-2} & \alpha_{m-2} & \beta_{m-1} \\ 0 & & & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

alors trivialement, les vecteurs et coefficients répondent aux relations suivantes :

$$\beta_{i+1}|\phi_{i+1}\rangle = (H - \alpha_i)|\phi_i\rangle - \beta_i|\phi_{i-1}\rangle, \quad (1.29)$$

$$\alpha_i = \langle \phi_i | H | \phi_i \rangle \quad \forall (i \geq 0) \text{ et} \quad (1.30)$$

$$\beta_i = \langle \phi_i | H | \phi_{i-1} \rangle \quad \forall (i \geq 1). \quad (1.31)$$

L'équation (1.29) nous permet de calculer le vecteur suivant étant donné les deux précédents et les coefficients correspondants du hamiltonien. Cette formule effectue une projection sur un sous-espace de Krylov [19]. La taille de la matrice projetée m contrôle le degré de convergence des états de basse énergie dans se sous-espace. Pour le calcul de la fonction de Green, on doit choisir $|\phi_0\rangle = \frac{c_r|0\rangle}{|c_r|0\rangle}$ ou $|\phi_0\rangle = \frac{c_r^\dagger|0\rangle}{|c_r^\dagger|0\rangle}$, selon le terme de (1.26) qu'on désire calculer.

Étant donné notre choix d'état $|\phi_0\rangle$ pour la procédure de Lanczos, seul le premier élément de la diagonale de la matrice inverse nous intéresse. Pour obtenir une expression de cet élément de matrice, on définit quelques nouvelles matrices, soit

$$H_i = \begin{pmatrix} \alpha_i & \beta_{i+1} & & & 0 \\ \beta_{i+1} & \alpha_{i+1} & \beta_{i+2} & & \\ & \beta_{i+2} & \alpha_{i+2} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{m-2} \\ & & & \beta_{m-2} & \alpha_{m-2} & \beta_{m-1} \\ 0 & & & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} \end{pmatrix}_{(m-i) \times (m-i)} \quad (1.32)$$

$$\text{et } B_i = \begin{pmatrix} \beta_i & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}_{1 \times (m-i)}. \quad (1.33)$$

Le hamiltonien dans sa forme tridiagonale est $H = H_0$ et les matrices ci-dessus peuvent être définies de manière récurrente en fonction de blocs :

$$H_i = \begin{pmatrix} \alpha_i & B_{i+1} \\ B_{i+1}^\dagger & H_{i+1} \end{pmatrix}. \quad (1.34)$$

En solutionnant pour g_i dans le système d'équations linéaire par blocs

$$\begin{pmatrix} z - \alpha_i & B_i \\ B_i^\dagger & z - H_{i+1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_i & X_i \\ X_i^\dagger & Z_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad (1.35)$$

on trouve

$$g_i = \frac{1}{z - \alpha_i - B_{i+1}[z - H_{i+1}]^{-1}B_{i+1}^\dagger}. \quad (1.36)$$

Dans l'expression précédente, on ne s'intéresse encore une fois qu'au premier élément de la matrice inverse $[z - H_{i+1}]^{-1}$. On peut donc substituer $\beta_{i+1}^2 g_{i+1}$ à $B_{i+1}[z - H_{i+1}]^{-1}B_{i+1}^\dagger$. Comme H_{m-1} n'est qu'un scalaire, $g_{m-1} = (z - \alpha_{m-1})^{-1}$ termine la formule récurrente (1.36). On trouve donc que les coefficients de (1.27) sont simplement $b_i = \beta_i$ et $a_i = \alpha_i$, b_0 étant la norme de l'état déterminant le premier vecteur de la base de Lanczos, soit $b_0^2 = \langle 0 | \mathbf{c}_r \mathbf{c}_r^\dagger | 0 \rangle$ ou $\langle 0 | \mathbf{c}_r^\dagger \mathbf{c}_r | 0 \rangle$.

Cette approche est pratique tant que la matrice a une taille qui permet l'application de l'algorithme de Lanczos. Cette procédure peut être optimisée pour les matrices n'ayant qu'une petite fraction d'éléments non nul, comme c'est le cas du modèle de Hubbard dans la base spatiale. Avec cette optimisation, il est possible de travailler dans l'espace de Hilbert entier du modèle de Hubbard ayant un peu moins de 20 sites. Au premier abord, 20 sites semble peu, mais l'espace de Hilbert d'un tel système comporte $4^{20} \approx 10^{12}$ vecteurs de base, un nombre si grand que seuls des superordinateurs sont en mesure d'en manipuler les vecteurs. Des systèmes aussi gros peuvent être traités avec une algèbre linéaire traditionnelle, car l'algorithme de Lanczos tronque le hamiltonien, d'une façon particulièrement bien adaptée au calcul de la fonction de Green. En effet, seule une infime partie de l'espace de Hilbert complet est pertinente au calcul de la fonction de Green et l'algorithme de Lanczos n'explore que cette partie. Cette affirmation tient à l'observation suivante : chaque étage successif qu'on ajoute à la fraction continue ajoute un nouveau pôle à la fonction de Green et modifie la position et l'amplitude des pôles déjà présents. Lorsqu'un nombre suffisant d'étages est obtenu, les nouveaux pôles sont de très faibles amplitudes et les modifications aux pôles déjà présents sont négligeables.

1.3.2 État fondamental

L'état fondamental est le premier élément nécessaire au calcul de la fonction de Green dans le formalisme hamiltonien. Il existe nombre d'algorithmes standards capables de calculer l'état fondamental d'une grande matrice creuse tel le hamiltonien du modèle de

Hubbard. Notamment, c'est l'usage original de l'algorithme de Lanczos qu'on a décrit à la section précédente.

En effet, en démarrant l'algorithme avec un état quelconque et en effectuant un nombre suffisamment grand d'itérations, l'état fondamental de la matrice projetée (1.28) est une bonne approximation de l'état fondamental de la matrice entière. Diagonaliser la matrice tridiagonale donne l'état fondamental en fonction des états construits par la récurrence de Lanczos. À chaque itération, on peut reconstruire l'état fondamental dans l'espace de Hilbert complet avec les deux derniers états de Lanczos et les coefficients α_i et β_i définissant leur relation avec le reste de l'espace projeté.

1.3.3 Éléments hors-diagonaux de la fonction de Green

L'approche décrite 1.3 n'est pas directement applicable aux éléments de la fonction de Green qui ne sont pas sur la diagonale. C'est-à-dire qu'on ne peut pas appliquer l'algorithme précédent pour des expressions comme

$$\langle 0 | \mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger | 0 \rangle \quad (1.37)$$

où $\mathbf{M} = \omega \pm (\mathbf{H} - E_0)$ si $r \neq r'$. Il existe plusieurs solutions à ce problème. Ici on décrit l'une des plus simples.

Cette solution est la conséquence de l'observation suivante :

$$\begin{aligned} \langle 0 | (\mathbf{c}_r + a^* \mathbf{c}_{r'}) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{c}_r^\dagger + a \mathbf{c}_{r'}^\dagger) | 0 \rangle &= \langle 0 | \mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_r^\dagger | 0 \rangle \\ &+ aa^* \langle 0 | \mathbf{c}_{r'} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger | 0 \rangle \\ &+ a \langle 0 | \mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger | 0 \rangle \\ &+ a^* \langle 0 | \mathbf{c}_{r'} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_r^\dagger | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (1.38)$$

En choisissant une fois $a = 1$ et une fois $a = i$ on peut isoler une expression pour (1.37) en fonction d'éléments d'inverses qui peuvent tous être exprimés sous forme de fraction continue :

$$\begin{aligned} \langle 0 | \mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger | 0 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 0 | (\mathbf{c}_r + \mathbf{c}_{r'}) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{c}_r^\dagger + \mathbf{c}_{r'}^\dagger) | 0 \rangle \\ &+ \frac{i}{2} \langle 0 | (\mathbf{c}_r + i \mathbf{c}_{r'}) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{c}_r^\dagger - i \mathbf{c}_{r'}^\dagger) | 0 \rangle \\ &- \frac{1+i}{2} \langle 0 | (\mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_r^\dagger + \mathbf{c}_{r'} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.39)$$

Notez que dans le cas où tous les éléments de \mathbf{M} sont réels, $\langle 0 | \mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \mathbf{c}_{r'} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_r^\dagger | 0 \rangle$ et l'équation précédente se simplifie à

$$\begin{aligned} \langle 0 | \mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger | 0 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 0 | (\mathbf{c}_r + \mathbf{c}_{r'}) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{c}_r^\dagger + \mathbf{c}_{r'}^\dagger) | 0 \rangle \\ &- \frac{1}{2} \langle 0 | (\mathbf{c}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_r^\dagger + \mathbf{c}_{r'} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{c}_{r'}^\dagger) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.40)$$

Il n'est donc pas nécessaire de faire intervenir des nombres complexes dans les routines d'algèbre linéaire si tous les éléments du hamiltonien sont réels.

Cette méthode pour calculer les éléments hors diagonaux est numériquement économe : le nombre total de fractions continues à calculer est égale au nombre d'éléments distincts présents dans la fonction de Green.

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, on a expliqué *(i)* ce qu'est la fonction de Green et la self-énergie dans le cadre du problème à N-corps et de la CDMFT, *(ii)* la CDMFT et *(iii)* un algorithme pour obtenir une solution par diagonalisation exacte du problème d'impureté de la CDMFT.

Concernant la fonction de Green et la self-énergie, on a vu comment calculer la valeur moyenne d'observables à un corps, l'énergie potentielle, le poids spectral et la densité d'états. On a expliqué que la fonction de Green est une fonction causale. Cette propriété entraîne une relation exprimant la fonction de Green en fonction du poids spectral ainsi que la possibilité d'exprimer la fonction de Green sous la forme d'une fraction continue.

La CDMFT est une méthode de solution approximative de la fonction de Green de particules sur un réseau. Elle fait l'approximation que la self-énergie d'une impureté située dans un bain autocohérent et sans interaction est équivalente à celle du réseau. La CDMFT se réduit à la DMFT dans le cas où l'impureté ne contient qu'une seule orbitale interagissante.

Finalement, on a vu que l'algorithme de Lanczos est une méthode permettant de calculer les éléments de matrices de la fonction de Green sous la forme d'une fraction continue ainsi que l'état fondamental d'un hamiltonien.

Chapitre 2

Applications au modèle de Hubbard pour les cuprates

Avant de tenter d'aller au-delà de ce qui est possible avec les solveurs d'impureté par diagonalisation exacte, nous avons effectué des améliorations techniques à la CDMFT et étudié ses limitations et défauts. Quelques articles ont résulté de ces efforts.

Le premier [20] est inclus dans son intégralité dans ce chapitre. On y effectue une paramétrisation rigoureuse du bain et on y illustre l'importance de cette paramétrisation grâce au problème de coexistence microscopique de la supraconductivité avec l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard pour les cuprates. Un élément central de ce travail est la comparaison avec une paramétrisation plus simple utilisée auparavant. Les résultats avec la paramétrisation simple ont été obtenus par Simon Verret dans le cadre de sa maîtrise [21]. L'analyse des données et l'écriture de l'article est le résultat d'une collaboration étroite de tous les auteurs.

Le deuxième article [22] est bâti sur le premier : on y calcule la rigidité superfluide à l'aide des fonctions de Green obtenues dans le premier article. Ce sont des calculs effectués par Olivier Simard dans le cadre de sa maîtrise, sous la direction d'André-Marie Tremblay [23].

Le dernier article [24] est une étude du principal défaut de la CDMFT, la brisure de l'invariance par translation du réseau, l'accord surprenant avec les expériences qui résulte de cette brisure et des tentatives de correction qui ont été utilisées dans la communauté. Cet article fut le fruit de multiples et longues conversations entre les auteurs au fil de plusieurs années. Les calculs furent effectués par Joyrtimoy Roy et Simon Verret.

2.1 Paramétrisation du bain et coexistence de la supraconductivité avec l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard [20]

Lorsqu'on s'attaque au problème d'impureté de la CDMFT avec des méthodes hamiltoniennes, on doit paramétriser le bain de façon explicite : le bain doit avoir son propre hamiltonien ainsi que des termes le couplant à l'amas. On a une très grande liberté dans la façon d'effectuer cette paramétrisation, beaucoup plus grande que ce qui est nécessaire : comme les paramètres du bain n'interviennent dans les équations de la CDMFT qu'au travers de la fonction d'hybridation, toutes les paramétrisations générant la même fonction d'hybridation sont équivalentes. On peut parler de classes d'équivalences dans la paramétrisation de l'hybridation.

Avec la diagonalisation exacte, on optimise typiquement le bain en minimisant une fonction de poids construite à partir de la condition d'autocohérence de la CDMFT (1.23) :

$$W(\epsilon, \theta) = \sum_j^N \left| \int \mathbf{G}_r(i\omega_j, \tilde{k}) d\tilde{k} - [i\omega_j - \mathbf{H}_{0c} - \Gamma(i\omega_j, \epsilon, \theta) - \Sigma_c(i\omega_j)]^{-1} \right|^2 \quad (2.1)$$

Cette fonction de poids est évaluée le long d'une grille de fréquences imaginaires $i\omega_j = ij/\beta$ déterminé par la température fictive $\beta^{-1} = 50^{-1}$ et une fréquence maximale $\omega_N = 2$. Cette fonction est le carré de la différence entre la fonction de Green du réseau projeté sur l'amas et la fonction de Green de l'amas en fonction des paramètres de bain, à self-énergie fixe. La condition d'autocohérence stipule que ces deux fonctions de Green doivent être égales. La somme sur les fréquences est prise le long de l'axe imaginaire, car les fonctions de Green de système finis sont toujours une somme de pôles sur l'axe réel, ce qui se prête très mal à des manipulations numériques.

La structure de la fonction de poids peut être une source de difficultés lorsqu'on utilise une méthode de moindres carrés dans la recherche des paramètres optimaux. En effet, les méthodes de moindres carrés sont des techniques d'optimisation locale. Pour les fonctions qui ont plus d'un minimum, on ne peut garantir que le minimum est global. De plus, ces méthodes deviennent instables lorsque plusieurs points dans l'espace des paramètres sont équivalents, en particulier lorsque ces points forment un continuum. La procédure de CDMFT (voir fig. 1.4) risque alors de se mettre à alterner entre plusieurs points équivalents sans être capable de s'arrêter d'elle-même. C'est pour cela qu'il faut imposer un minimum de contraintes sur la paramétrisation du bain. Dans le meilleur des cas, ces contraintes font en sorte que chacun de ces ensemble de configurations équivalentes de la paramétrisation a exactement une configuration accessible.

À ce jour, dans la plupart des études CDMFT avec diagonalisation exacte, les contraintes de la paramétrisation sont choisies de façon heuristique. Ce choix donne des résultats généralement satisfaisants et est facile d'utilisation. Une paramétrisation plus rigoureuse, qui impose seulement des contraintes justifiées par les symétries de l'impureté, peut être construite à l'aide de la théorie des groupes. Pour un même nombre d'orbitales de bain,

beaucoup plus de paramètres libres sont présents. Cette paramétrisation rigoureuse requiert conséquemment un effort substantiellement plus important lors de son optimisation, mais, en principe, devrait mener à des résultats plus fiables. On l'a appliqué au problème de la coexistence de la supraconductivité avec l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard pour les cuprates.

La proximité de ces deux phases est une caractéristique commune chez les supraconducteurs non-conventionnels, et la coexistence uniforme des ces deux phases semble possible dans plusieurs familles de supraconducteurs non-conventionnels, notamment dans les cuprates dopés en électrons. C'est en contraste marqué aux cuprates dopés en trous. Dans ces derniers, la phase antiferromagnétique est bien moins résiliente au dopage, et laisse place à une onde de spin incommensurable bien avant que la supraconductivité apparaisse. Des études CDMFT-ED antérieures, faites avec la paramétrisation heuristique, ont trouvé de la coexistence microscopique, du côté dopé aux trous autant que du côté dopé aux électrons. Dans cet article, on montre qu'avec les paramètres de bande du cuprate YBCO, cette coexistence du côté dopé aux trous est un artéfact causé par les lacunes de la paramétrisation heuristique du bain. En effet, avec la paramétrisation générale, la coexistence microscopique est absente de ce système lorsqu'on dope en trous. On croit que les résultats présentés dans cet article sont les plus fidèles qui peuvent être obtenus avec un solveur ED. Pour faire mieux dans le formalisme hamiltonien, il faut faire appel à des méthodes de solutions différentes pour le problème d'impureté. Les méthodes de réseaux de tenseurs sont la direction qu'on explore dans le chapitre 3 et qu'on met en application au chapitre 5, pour un problème simple.

Coexistence of Superconductivity and Antiferromagnetism in the Hubbard model for cuprates

A. Foley,^{1,*} S. Verret,¹ A.-M. S. Tremblay,^{1,2} and D. Sénéchal¹

¹Département de physique and Institut quantique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1

²Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario, Canada, M5G 1Z8

(Dated: January 31, 2020)

Antiferromagnetism and d -wave superconductivity are the most important competing ground-state phases of cuprate superconductors. Using cellular dynamical mean-field theory (CDMFT) for the Hubbard model, we revisit the question of the coexistence and competition of these phases in the one-band Hubbard model with realistic band parameters and interaction strengths. With an exact diagonalization solver, we improve on previous works with a more complete bath parametrization which is carefully chosen to grant the maximal possible freedom to the hybridization function for a given number of bath orbitals. Compared with previous incomplete parametrizations, this general bath parametrization shows that the range of microscopic coexistence of superconductivity and antiferromagnetism is reduced for band parameters for $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, and confined to electron-doping with parameters relevant for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$.

I. INTRODUCTION

The proximity of antiferromagnetism (AF) with superconductivity (SC) is common in unconventional superconductors: Bechgaard salts, heavy-fermion superconductors, high-temperature superconductors (cuprates), iron pnictides and selenides, can all go from antiferromagnetic to superconducting upon varying some parameter (doping, pressure, etc.). Microscopic, i.e., spatially homogeneous, coexistence of superconductivity with antiferromagnetism is a definite possibility in iron pnictides [1] and selenides [2], in the heavy-fermion compound CeRhIn_5 [3, 4] and in electron-doped cuprate superconductors [5]. In this respect, hole-doped cuprates are quite different: the only magnetic phase with which superconductivity coexists is an incommensurate spin-density wave [6–9]. A clear difficulty is to distinguish microscopic coexistence (a pure phase) from macroscopic coexistence resulting from inhomogeneities in the sample or from thermodynamic separation of competing phases.

The antiferromagnetic phase breaks rotation symmetry ($SO(3)$) and can be characterized by an order parameter \mathbf{M} , the staggered magnetization. Superconductivity, on the other hand, breaks the $U(1)$ symmetry associated with electron number conservation and the associated order parameter is the pairing amplitude Δ . A signature of the microscopic coexistence of these two phases would be the presence of the so-called π -triplet order parameter [10–12], which is necessarily nonzero if both \mathbf{M} and the d -wave order parameter Δ are nonzero. Note that the π -triplet is a kind of pair-density wave [13–15]. However, it is different from the pair-density wave observed experimentally in scanning tunnelling microscopy [16]. A unified description of the two broken symmetries can be formulated in the language of $SO(5)$ symmetry [10]. A phenomenological Landau-Ginzburg theory of the interplay and coexistence of the two phases can also be formulated without reference to the $SO(5)$ description [11].

The issue of a possible AF-SC coexistence in high- T_c superconductors has been addressed theoretically using the one-band Hubbard model and its strong-coupling limit, the t - J model. Inui *et al.* found microscopic AF-SC coexistence in a slave-boson (mean field) treatment of the Hubbard model [17]. Himeda *et al.* found it in a variational Monte Carlo study of the t - J model [12]. The presence of the π -triplet order parameter was studied in the mean-field approximation by Kyung [18], also in the t - J model. Beyond the mean-field approximation, microscopic AF-SC coexistence was predicted to occur within the Hubbard model with the Variational Cluster Approximation (VCA) [19] and Cluster Dynamical Mean Field Theory (CDMFT) [20, 21]. In Ref. [20], microscopic coexistence for the nearest-neighbor hopping model was found only for small interaction strength ($U \leq 8t$). Functional Renormalization Group (FRG) methods, although more relevant to weak and moderate coupling, also predict the occurrence of such a microscopic coexistence phase [22, 23].

The lack of microscopic coexistence of superconductivity with commensurate antiferromagnetism in hole doped cuprates casts some doubt on the prediction of quantum cluster methods or on the relevance of the one-band Hubbard model to these materials. In this paper, we show that a more careful application of CDMFT to the one-band Hubbard model makes this AF-SC microscopic coexistence disappear in models relevant to hole-doped cuprates, while reducing its range in a model of electron-doped cuprates. We use a CDMFT impurity solver based on exact diagonalization at zero temperature, like in Refs [20, 21], and compare the simple parametrization that they used with the most general parametrization of the bath orbitals, as used in Ref. [24–26]. Quantum Monte Carlo (QMC) solvers, especially state of the art continuous-time (CT-QMC) solvers [27] are free of bath parametrization ambiguities. Up to now, CT-QMC solvers have been used to study only the superconducting [28–42] and the antiferromagnetic phases [28, 43, 44] separately. In principle, the question of coexistence can be addressed with these approaches, but this has yet to be done.

A QMC cluster size scaling study [45] has demonstrated that 2×2 plaquettes give reasonably well converged results

* Corresponding author: Alexandre.Foley@usherbrooke.ca

and exponential convergence of local observables with cluster size has been observed [46–48]. Because of this and since a 2×2 cluster is already very close to the limit of what is feasible with ED-CDMFT¹ given the computational resources available to us, we only consider that one size of cluster.

This paper is organized as follows: In Section II we present the model and explain the method used (ED-CDMFT), with a particular attention towards the bath parametrization. In Section III we present and discuss our results, before concluding.

II. MODEL AND METHOD

Although high-temperature superconductors are charge-transfer insulators [49], they are often modelled by the one-band Hubbard model on a square lattice:

$$H = - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \sigma} t_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}', \sigma} + U \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}\uparrow} n_{\mathbf{r}\downarrow} - \mu \sum_{\mathbf{r}, \sigma} n_{\mathbf{r}\sigma}. \quad (1)$$

The hopping amplitudes $t_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}$ depend on the particular compound and are restricted to nearest-neighbor (t), second-neighbor (t') and third neighbour (t''). We use two sets of parameters: one for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO: $t'/t = -0.3$, $t''/t = 0.2$) [50], a hole-doped compound, and one for $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO: $t'/t = -0.17$, $t''/t = 0.03$) [51], an electron-doped compound. The first neighbour hopping, t , defines the energy scale and is set to unity ($t = 1$). The NCCO hoppings can also be considered representative of a class of hole-doped cuprates to which $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_2$ belongs (see Fig. 5 of Ref.52).

A. Cluster Dynamical Mean Field Theory

In CDMFT, for the purpose of computing the electron self-energy Σ , the above model is replaced by a cluster model (in this paper, a four-site plaquette) immersed in an effective medium. With an exact diagonalization solver, this medium is represented by a finite set of uncorrelated bath orbitals hybridized with the cluster sites. This discretization of the medium is an additional approximation that must be made to accommodate an ED solver, and as such can lead to additional finite size effects [24]. These bath orbitals, together with the cluster, are described by an Anderson impurity model (AIM):

$$H_{\text{imp}} = H_{\text{clus}} + \sum_{\alpha, \xi} (\theta_{\alpha\mu} c_\alpha^\dagger a_\mu + \text{H.c.}) + \sum_{\mu, \nu} \epsilon_{\mu\nu} a_\mu^\dagger a_\nu \quad (2)$$

where H_{clus} is the restriction of the Hubbard Hamiltonian (1) to the cluster. a_ν annihilates an electron on the

bath orbital labelled ν (ν stands for both orbital and spin indices and so does α for cluster orbitals). The matrix $\theta_{\alpha\mu}$ defines the hybridization between bath and cluster, and $\epsilon_{\mu\nu}$ defines the dynamics of the bath. The bath parameters $\theta_{\alpha\mu}$ and $\epsilon_{\mu\nu}$ are determined by an iterative procedure, as explained below.

The one-electron Green function \mathbf{G}' takes the following form as a function of complex frequency ω :

$$\mathbf{G}'^{-1}(\omega) = \omega - \mathbf{t} - \Gamma(\omega) - \Sigma(\omega) \quad (3)$$

where the hybridization matrix $\Gamma(\omega)$ is defined as

$$\Gamma(\omega) = \boldsymbol{\theta}(\omega - \epsilon)^{-1} \boldsymbol{\theta}^\dagger \quad (4)$$

in terms of the matrices $\theta_{\alpha\mu}$ and $\epsilon_{\alpha\beta}$. In practice, the cluster Green function is computed from an exact diagonalization technique and the self-energy is extracted from Eq. (3).

The Green function $\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ for the original lattice Hubbard model is then computed from the cluster's self-energy as

$$\mathbf{G}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \mathbf{G}_0^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) - \Sigma(\omega). \quad (5)$$

Here $\tilde{\mathbf{k}}$ denotes the wave vectors belonging to the Brillouin zone associated with the superlattice of plaquettes, and \mathbf{G}_0 is the non-interacting lattice Green function. All Green function-related quantities are $2N_c \times 2N_c$ matrices, $N_c = 4$ being the number of sites in the plaquette.

The bath parameters are ideally determined by the self-consistency condition $\mathbf{G}'(\omega) = \bar{\mathbf{G}}(\omega)$, where

$$\bar{\mathbf{G}}(\omega) \equiv \int \frac{d^2\tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^2} \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \quad (6)$$

and where the integral is carried over the reduced Brillouin zone (the domain of $\tilde{\mathbf{k}}$). In other words, the local Green function $\mathbf{G}'(\omega)$ should coincide with the Fourier transform $\bar{\mathbf{G}}(\omega)$ of the full Green function at the origin of the superlattice. This condition should hold at all frequencies, which is impossible in ED-CDMFT because of the finite number of bath parameters ϵ and $\boldsymbol{\theta}$ at our disposal. Thus, the self-consistency condition is replaced by a minimization of the so-called *distance function*:

$$d = \sum_{\omega_n} W(i\omega_n) \text{Tr} \left| \mathbf{G}'^{-1}(i\omega_n) - \bar{\mathbf{G}}^{-1}(i\omega_n) \right|^2, \quad (7)$$

with respect to the bath parameters for a given value of Σ . The weight function $W(x)$ is meant to give more importance to small frequencies and a fictitious temperature is used to define the grid of Matsubara frequencies over which the above merit function is evaluated. Details can be found, for instance, in Refs [21, 53–55]. In this work, we use a fictitious temperature $\beta = 50/t$ and set $W(i\omega_n)$ to 1 if $\omega_n < \omega_c$, with $\omega_c = 2t$; $W(i\omega_n)$ is set to zero for higher Matsubara frequencies.

To summarize, the ED-CDMFT procedure runs as follows:

1. An initial, trial set of bath parameters is chosen.

¹ The bath structure being simpler in one dimension, computations with more than four correlated orbitals are possible with an ED solver. [24]

2. The ED solver is applied to Hamiltonian (2) and provides a numerical representation of \mathbf{G}' that allows for a quick computation of $\mathbf{G}'(\omega)$, and hence of $\Sigma(\omega)$, at any complex frequency.
3. The Fourier transform $\bar{\mathbf{G}}(\omega)$ is computed for the set of Matsubara frequencies appearing in (7).
4. A new set of bath parameters $\{\theta_{\alpha\mu}, \varepsilon_{\mu\nu}\}$ is obtained by minimizing the distance function (7).
5. We go back to step 2 with the new set of bath parameters until convergence is achieved.

Note that superconductivity is allowed in the procedure through the use of the Nambu formalism, by which a particle-hole transformation is performed on the spin-down orbitals (e.g. $c_{\alpha,\downarrow} \rightarrow c_{\alpha,\downarrow}^\dagger$). This does not require a doubling of the degrees of freedom in the Green function if no spin-flip terms are present in the model, which is the case here. With 8 bath orbitals, we introduce two Nambu spinors, one for the cluster and one for the bath:

$$C = (c_{1\uparrow} \dots c_{4\uparrow}, c_{1\downarrow}^\dagger \dots c_{4\downarrow}^\dagger) \quad (8)$$

$$A = (a_{1\uparrow} \dots a_{8\uparrow}, a_{1\downarrow}^\dagger \dots a_{8\downarrow}^\dagger). \quad (9)$$

The noninteracting part of Hamiltonian (2) then takes the general form

$$H_{\text{imp},0} = (C^\dagger, A^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbf{T} & \boldsymbol{\theta} \\ \boldsymbol{\theta}^\dagger & \boldsymbol{\epsilon} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ A \end{pmatrix} \quad (10)$$

where the matrices $\boldsymbol{\theta}$ and $\boldsymbol{\epsilon}$ can now contain anomalous terms.

Two different bath parametrizations are used in this paper, as described in the next section. They parametrize the same number of bath orbitals, but they differ in the number of free parameters that are set by the CDMFT procedure. The first bath parametrization is essentially the same as the one used in Ref. [21]; the second, inspired by Ref. [24, 25], contains many more independent parameters. One may naturally expect that increasing the number of bath parameters brings the system closer to perfect self-consistency. Using the second parametrization gives us the best possible self-consistency for a given number of orbitals; this is where this paper improves upon previous studies. On the other hand, the CDMFT procedure itself becomes more time consuming, in particular optimizing the merit function Eq. (7).

B. Simple bath parametrization

A simple and intuitive way to configure the bath orbitals for a 4-site plaquette is illustrated on Fig. 1. Time and memory constraints limit the number of bath orbitals to 8, for a total of 12 orbitals in the AIM Eq. (2). The 8 bath orbitals are separated into two sets, numbered 1 and 2, each with four orbitals. Each set can be thought of as a ‘‘ghost’’ of the plaquette, with a site energy ε_i ($i = 1, 2$), hybridized with

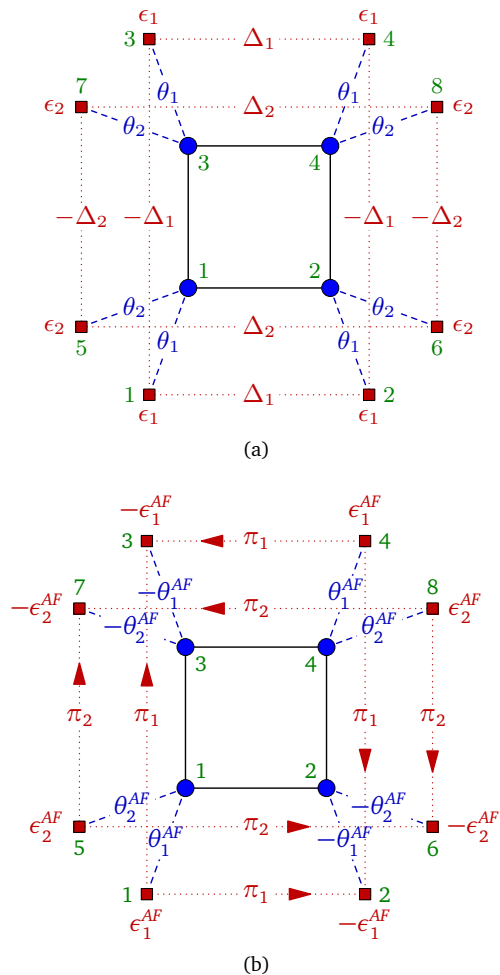


Figure 1. Schematic description of the simple bath parametrization. The blue circles represent the cluster sites and red squares the bath orbitals. Intra bath terms are shown in red and hybridization terms in blue. Cluster and bath orbitals are numbered separately. (a): terms that are used when not probing antiferromagnetism, with C_{2v} symmetry. (b): additional terms needed when probing antiferromagnetism and breaking C_{2v} down to C_2 . See text for details.

the bath through a hopping amplitude θ_i . The presence of superconductivity in the effective medium is characterized by a singlet pairing amplitude Δ_i with opposite signs along the x and y directions, in accordance with d -wave symmetry. This makes a total of 6 independent parameters, as summarized on Fig. 1a. If only superconductivity is probed, the AIM has a C_{2v} symmetry (horizontal and vertical reflections) and only those 6 bath parameters are used.

If antiferromagnetism is considered as well, then the symmetry is reduced to C_2 (a π rotation). Six additional parameters are introduced, as illustrated on Fig. 1b: Spin antisymmetric bath energies $\varepsilon_i^{\text{AF}}$ and hybridizations θ_i^{AF} that alternate in sign between sites, and triplet-pairing amplitudes π_i whose signs are defined on the figure (via arrows). This makes a total of 12 independent bath parameters.

Let us specify the matrices introduced in Eq. (10). We

order the bath orbitals so the two sets of 4 spin-up orbitals are consecutive and followed by the two sets of spin down orbitals, in the same order. Overall, the 16×16 matrix ϵ associated with this bath model has the following structure, in terms of 4×4 blocks:

$$\epsilon = \begin{pmatrix} E_1 + E_1^{AF} & 0 & D_1 & 0 \\ 0 & E_2 + E_2^{AF} & 0 & D_2 \\ D_1 & 0 & -E_1 + E_1^{AF} & 0 \\ 0 & D_2 & 0 & -E_2 + E_2^{AF} \end{pmatrix} \quad (11)$$

where $E_i = \varepsilon_i \mathbf{1}_{4 \times 4}$, $E_i^{AF} = \varepsilon_i^{AF} \text{diag}(1, -1, -1, 1)$ and

$$D_i = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta_i + \pi_i & \Delta_i - \pi_i & 0 \\ -\Delta_i - \pi_i & 0 & 0 & \Delta_i + \pi_i \\ \Delta_i + \pi_i & 0 & 0 & -\Delta_i - \pi_i \\ 0 & \Delta_i - \pi_i & -\Delta_i + \pi_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

The minus signs in the bottom half of the ϵ matrix comes from the Nambu representation of spin down orbitals. On the other hand, the 8×16 matrix θ has the following structure:

$$\theta = \begin{pmatrix} \Theta_1 + \Theta_1^{AF} & \Theta_2 + \Theta_2^{AF} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Theta_1 + \Theta_1^{AF} & -\Theta_2 + \Theta_2^{AF} \end{pmatrix} \quad (13)$$

where $\Theta_i = \theta_i \mathbf{1}_{4 \times 4}$, $\Theta_i^{AF} = \theta_i^{AF} \text{diag}(1, -1, -1, 1)$.

C. General bath parametrization

The bath parametrization defined above is not the most general one. In order to construct the most general bath appropriate to each point group (C_{2v} and C_2), one must first realize that any unitary transformation of the bath orbitals is possible, and that this gauge freedom must be fixed somehow. We do this by requiring (1) that the matrix ϵ be diagonal and (2) that it falls into irreducible representations of the symmetry group of the AIM.

If only superconductivity is probed, we can impose C_{2v} symmetry (horizontal and vertical reflexions) on the AIM. In addition to C_{2v} symmetry, we also assume spin symmetry, which reduces the number of independent parameters. C_{2v} has four distinct irreducible representations to each of which we associate two bath orbitals, for a total of 8, the same number as in the simple parametrization of the previous section. We label these orbitals from 1 to 8, in two consecutive series of four, each series corresponding to the four irreducible representations: 1 and 5 in the first representation, 2 and 6 in the second, 3 and 7 in the third, and 4 and 8 in the fourth. Fig. 2a illustrates the hybridization of the first four orbitals. The coefficients θ_i and Δ_i are the parameters present in the hybridization between the cluster and the i th bath orbital: θ_i is the amplitude of the simple hoppings and Δ_i is the amplitude of the singlet pairing operators.

In this bath parametrization, the matrix ϵ is diagonal: $\text{diag}(\varepsilon_i) \oplus \text{diag}(-\varepsilon_i)$, with $i = 1, \dots, 8$. Again, the last 8 components correspond to the spin-down orbitals in the Nambu representation (hence the minus sign).

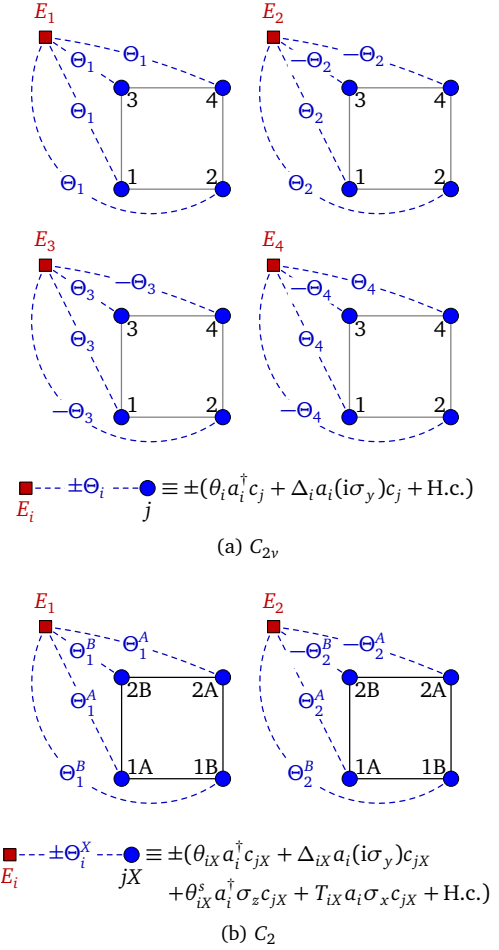


Figure 2. Top (a): Schematic description of the general parametrization of the bath when probing superconductivity with C_{2v} symmetry. Blue circles represent the cluster sites and red squares the bath orbitals. The 4 subfigures correspond to the first four bath orbitals, each associated with a different irreducible representation of C_{2v} . The blue dashed lines and accompanying symbols represent a hybridization operator as defined below the figure. The four diagrams correspond to the first 4 columns (or the last 4 columns) of the expressions (15) and (16) in the text. Bottom (b): the same, for C_2 symmetry, used when probing antiferromagnetism and superconductivity. The operators symbolized by the dashed line are once again defined below the figure. The superscripts A and B correspond to the two sublattices when AF order is present. In the equations of (a) and (b), spinor notation is used: the Pauli matrices define the spin part of each term.

The hybridization matrix θ , on the other hand, is a dense 8×16 matrix:

$$\theta = \begin{pmatrix} \Theta & -D \\ D & -\Theta \end{pmatrix} \quad (14)$$

where the 4×8 blocks Θ and D are defined as

$$\Theta = \begin{pmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 & \theta_5 & \theta_6 & \theta_7 & \theta_8 \\ \theta_1 & \theta_2 & -\theta_3 & -\theta_4 & \theta_5 & \theta_6 & -\theta_7 & -\theta_8 \\ \theta_1 & -\theta_2 & \theta_3 & -\theta_4 & \theta_5 & -\theta_6 & \theta_7 & -\theta_8 \\ \theta_1 & -\theta_2 & -\theta_3 & \theta_4 & \theta_5 & -\theta_6 & -\theta_7 & \theta_8 \end{pmatrix} \quad (15)$$

$$D = \begin{pmatrix} \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 & \Delta_4 & \Delta_5 & \Delta_6 & \Delta_7 & \Delta_8 \\ \Delta_1 & \Delta_2 & -\Delta_3 & -\Delta_4 & \Delta_5 & \Delta_6 & -\Delta_7 & -\Delta_8 \\ \Delta_1 & -\Delta_2 & \Delta_3 & -\Delta_4 & \Delta_5 & -\Delta_6 & \Delta_7 & -\Delta_8 \\ \Delta_1 & -\Delta_2 & -\Delta_3 & \Delta_4 & \Delta_5 & -\Delta_6 & -\Delta_7 & \Delta_8 \end{pmatrix} \quad (16)$$

The number of independent bath parameters is 8 in ϵ and $2 \times 8 = 16$ in θ , for a total of 24.

If antiferromagnetism is probed as well, the symmetry reduces to C_2 , which has only two irreducible representations. Since we can afford 8 bath orbitals, we associate 4 bath orbitals to each irreducible representation, with the same pattern as the C_{2v} bath. Namely, all the odd labelled bath orbitals have the same structure as the first orbital, and all the even bath orbitals have the same structure as the second orbital. The cluster-bath couplings of the first and second bath orbitals are illustrated in Fig. 2b. The superscripts A and B refer to the two sublattices induced by antiferromagnetic order. The parameters associated with different sublattices may differ.

The energy E_i ($i = 1, \dots, 8$) has a component ϵ_i even in spin and a component ϵ_i^s odd in spin, which makes $2 \times 8 = 16$ parameters. Thus, the diagonal matrix ϵ has the structure

$$(\epsilon_1 + \epsilon_1^s, \dots, \epsilon_8 + \epsilon_8^s, -\epsilon_1 + \epsilon_1^s, \dots, -\epsilon_8 + \epsilon_8^s) \quad (17)$$

The operators Θ_i^A in Fig. 2b contain four parameters each: θ_i^A , θ_i^{sA} , Δ_i^A , and T_i^A , where θ_i^A is a spin-symmetric hopping operator, θ_i^{sA} a spin antisymmetric hopping, Δ_i^A a singlet pairing and T_i^A a triplet pairing; likewise for Θ_i^B . This makes 8 parameters for each bath index i , therefore $8 \times 8 = 64$ hybridization parameters in total. The hybridization matrix θ has the following form:

$$\theta = \begin{pmatrix} \Theta + \Theta^s & -D + T \\ D + T & -\Theta + \Theta^s \end{pmatrix} \quad (18)$$

where the 4×8 block Θ is defined as

$$\Theta = \begin{pmatrix} \theta_1^A & \theta_2^A & \theta_3^A & \theta_4^A & \theta_5^A & \theta_6^A & \theta_7^A & \theta_8^A \\ \theta_1^B & \theta_2^B & \theta_3^B & \theta_4^B & \theta_5^B & \theta_6^B & \theta_7^B & \theta_8^B \\ \theta_1^B & -\theta_2^B & \theta_3^B & -\theta_4^B & \theta_5^B & -\theta_6^B & \theta_7^B & -\theta_8^B \\ \theta_1^A & -\theta_2^A & \theta_3^A & -\theta_4^A & \theta_5^A & -\theta_6^A & \theta_7^A & -\theta_8^A \end{pmatrix}$$

and likewise for Θ^s (with components $\theta_i^{sA}, \theta_i^{sB}$), D (with components Δ_i^A, Δ_i^B) and T (with components T_i^A, T_i^B). The total number of independent bath parameters in this parametrization is $16 + 64 = 80$. Note that any hybridization function that can be produced with the simple parametrization can also be produced by the general parametrization we described. By applying an unitary transformation on the simple parametrization, we could obtain a bath Hamiltonian with the same structure as the general parametrization, except for a large number of additional constraints between bath parameters.

D. Order parameters

Once a CDMFT solution is found, various order parameters may be computed. The quantities of interest are the averages of the following operators defined on the lattice:

$$\hat{M} = \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} [c_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}\uparrow} - c_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}\downarrow}] \quad \mathbf{Q} = (\pi, \pi) \quad (19)$$

$$\hat{D} = \sum_{\mathbf{r}} [c_{\mathbf{r}\uparrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}\downarrow} - c_{\mathbf{r}\downarrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}\uparrow} - c_{\mathbf{r}\uparrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{y}\downarrow} + c_{\mathbf{r}\downarrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{y}\uparrow}] + \text{H.c.} \quad (20)$$

$$\hat{\pi} = \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} [c_{\mathbf{r}\uparrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}\downarrow} + c_{\mathbf{r}\downarrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{x}\uparrow} - c_{\mathbf{r}\uparrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{y}\downarrow} - c_{\mathbf{r}\downarrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{y}\uparrow}] + \text{H.c.} \quad (21)$$

The first is just the spin-density operator with the antiferromagnetic wavevector \mathbf{Q} . The second defines the d -wave pairing operator: singlet pairing on nearest-neighbour bonds \mathbf{x} and \mathbf{y} with opposite signs. The third is the π -triplet operator: triplet pairing on nearest-neighbour bonds with opposite signs along \mathbf{x} and \mathbf{y} and a spatial modulation defined by the antiferromagnetic wavevector \mathbf{Q} .

In ED-CDMFT, there are two ways to estimate the average of one-body operators. The first, and also the simplest, consists in computing the expectation value of the restriction of these operators to the cluster in the ground state of the impurity model. The averages obtained in this way will be called *cluster averages*.

The second method involves the lattice model Green function (5). Specifically, the average of any one-body operator of the form $\hat{O} = O_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta$ can be computed from the Green function as

$$\langle \hat{O} \rangle = \oint \frac{d\omega}{2\pi} \text{tr}[\mathbf{O}\mathbf{G}(\omega)]. \quad (22)$$

The frequency integral is taken along a contour that surrounds the negative real axis. In practice, this is done in the mixed basis of superlattice wavevectors $\tilde{\mathbf{k}}$ and cluster orbitals indices, knowing that both \mathbf{O} and \mathbf{G} are diagonal in $\tilde{\mathbf{k}}$:

$$\langle \hat{O} \rangle = \oint \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^2\tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^2} \text{tr}[\mathbf{O}(\tilde{\mathbf{k}})\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)] \quad (23)$$

The averages obtained in this way will be called *lattice averages*.

An operator \hat{O} that is defined on sites only, not on bonds, like \hat{M} above, or the electron density \hat{n} , will be called a *local operator*. For such an operator $\mathbf{O}(\tilde{\mathbf{k}})$ does not depend on $\tilde{\mathbf{k}}$ and the above formula simplifies to

$$\langle \hat{O} \rangle = \oint \frac{d\omega}{2\pi} \text{tr}[\mathbf{O}\tilde{\mathbf{G}}(\omega)] \quad (24)$$

where the local Green function $\tilde{\mathbf{G}}$ is defined in Eq. (6). For a local operator, the cluster average, instead of being computed from the impurity ground state, could alternatively

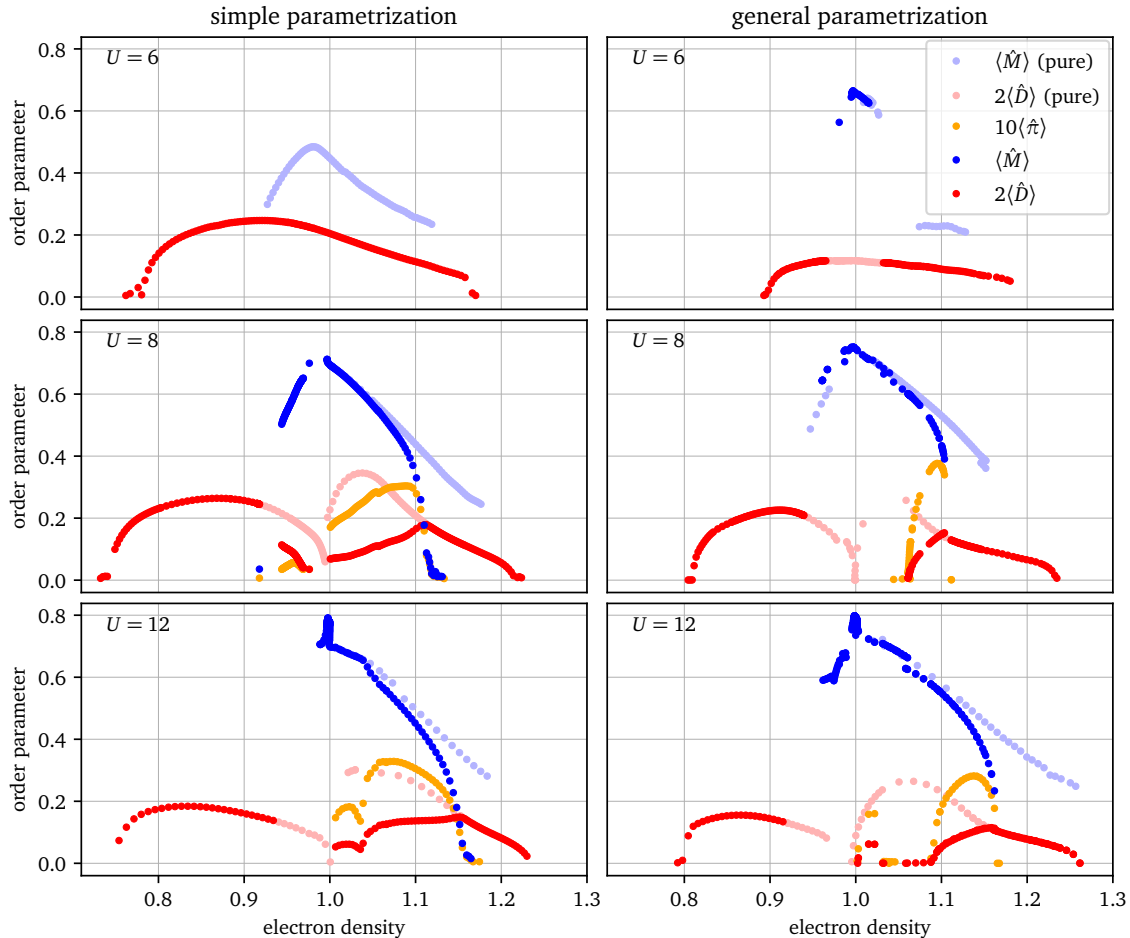


Figure 3. Phase diagrams (order parameter as a function of electron density) obtained with the simple (left) and general (right) bath parametrizations, with YBCO-like band parameters ($t'/t = -0.3$, $t''/t = 0.2$) and three values of onsite repulsion U . Blue symbols represent the AF order parameter $\langle \hat{M} \rangle$, red symbols the dSC order parameter $\langle \hat{D} \rangle$ (times 2) and the orange symbols the π -triplet order (times 10). Dark symbols are obtained when allowing microscopic coexistence of the two orders. Pale symbols are obtained when probing pure solutions. Deep in the superconducting regime, the dark symbols can be from pure SC simulations; allowing for AFM there would have significantly increased computational time with no benefits.

be computed from Eq. (24), but with the impurity Green function \mathbf{G}' substituted for \mathbf{G} , which yields the cluster average mentioned before.

Cluster and lattice averages are not equal for two reasons. First, operators that live on bonds, like \hat{D} and $\hat{\pi}$, differ from their restrictions to the cluster: inter-cluster bonds are ignored. Lattice averages take these inter-cluster bonds into account, cluster averages do not. Second, in ED-CDMFT the self-consistency is only approximate; therefore the local Green function \mathbf{G} is not exactly the same as the impurity Green function \mathbf{G}' . Thus even for a local operator, for which Eq. (24) applies, the lattice average will be only approximately the same as the cluster average.

III. RESULTS

In this section we present zero-temperature phase diagrams: the order parameters as a function of density, for two sets of band parameters and five values of U . We display cluster averages for local operators (electron density \hat{n} and staggered magnetization \hat{M}) and lattice averages for bond operators (\hat{D} and $\hat{\pi}$). See the supplementary material for other combinations and for comments on the differences between them [56]. The lowest value of U for each set (YBCO- and NCCO-like) lies below the Mott transition; hence superconductivity, when probed alone, extends all the way to half-filling. The other values of U are above the Mott transition and hence superconductivity vanishes

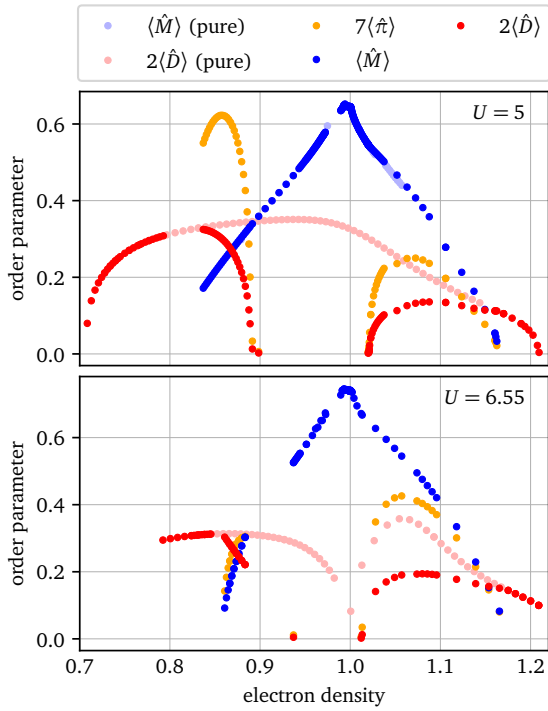


Figure 4. Phase diagrams (order parameter as a function of electron density) obtained with the general bath representations, with NCCO-like band parameters ($t'/t = -0.17$, $t''/t = 0.03$) and two values of onsite repulsion U . Symbols have the same meaning as on Fig. 3. Note that the dSC order parameter is multiplied by 2 and the π -triplet order parameter by 7, for clarity.

exactly at half-filling in the underdoped regime. In larger clusters, both in dynamical cluster approximation with a Quantum Monte Carlo solver[33] and in exact diagonalization with the variational cluster approximation [57], it is found that d -wave superconductivity (dSC) starts away from half-filling.

A. YBCO-like parameters

Fig. 3 shows the AF and dSC order parameters obtained in CDMFT for a one-band dispersion appropriate to YBCO and three values of U (6, 8 and 12), as a function of electron density n (half-filling corresponds to $n = 1$). The left panels show the solutions obtained using the simple parametrization of Sect. II B and the right panels the solutions obtained using the general parametrization of Sect. II C. Even though YBCO is a hole-doped compound, we have obtained solutions on both hole- and electron-doped sides of the phase diagram.

Solutions were obtained either by allowing both orders to emerge simultaneously in microscopic coexistence, or by allowing only one order at a time, suppressing the other. For instance, in the simple parametrization, antiferromagnetism is suppressed by forcing the bath parameters illustrated in the lower panel of Fig. 1 to zero. Similarly, sup-

pressing superconductivity is done by setting to zero all bath pairing operators ($\Delta_{1,2}$ and $\pi_{1,2}$). Even when both orders are allowed, microscopic coexistence does not necessarily happen: one of the two orders (AF or dSC) may dominate, in which case the variational parameters of the other order (dSC or AF) reach zero by the end of the self-consistency loop. To construct our phase diagrams, we let the self-consistency procedure choose which phase is the right one, rather than comparing ground-state energy. We proceed this way because thermodynamic potentials are unreliable with a small finite bath.

In Figs. 3 and 4, dark symbols indicate the order parameter, blue for AF and red for dSC, in the microscopically coexistent or dominant solution. Pale symbols indicate subdominant solutions, i.e., solutions obtained by suppressing one order in the coexisting regime. Orange circles denote the average of the π -triplet operator of Eq. (21), which is nonzero in regions of microscopic AF-dSC coexistence.

One notices the following features:

1. Microscopic coexistence does not occur at $U = 6$, in both simple and general bath parametrizations. It occurs only at $U = 8$ and, in a wider range of doping, at $U = 12$.
2. In the general parametrization, microscopic coexistence only occurs on the electron-doped side, whereas it also occurs on the hole-doped (i.e. physical) side in the simple parametrization.
3. The pure antiferromagnetic solutions show many discontinuities, especially on the hole-doped side and at stronger coupling, and especially in the more general parametrization.
4. Where microscopic coexistence occurs with the general parametrization, the transitions from a pure phase to microscopic coexistence are of second order.
5. A small superconducting region can be seen around $n = 1.01$ at $U = 12$ with the general parametrization. This is a finite size effect due to a change in the number of particles in the AIM. On either side of this small dome, the AIM has a well defined number of particles. The small superconducting order parameter breaks particle number conservation and allows the change in the number of particles to happen smoothly over a finite range of doping, instead of abruptly as it would were particle number conservation enforced.
6. On the hole-doped side, the transition from superconductivity to antiferromagnetism is of first order, and the two solutions are separated in density. In principle, this leads to a macroscopic phase coexistence.

B. NCCO-like parameters

Fig. 4 shows the same quantities for band parameters adequate for NCCO and two values of U . One can make the following observations:

1. Microscopic coexistence occurs on both sides of the phase diagram, for both values of U considered.
2. On the hole-doped side, the transition from microscopic coexistence to pure SC (upon decreasing n) is discontinuous for $U = 5$; the two solutions (pure SC and microscopic coexistence) are separated in density, which leads in principle to macroscopic phase coexistence. Macroscopic coexistence between a pure SC phase and a microscopic SC-AF coexistence phase has been seen before in VCA for different band parameters [58].
3. On the hole-doped side, the transition from microscopic coexistence to pure AFM (upon increasing n) is discontinuous at $U = 6.55$ and continuous at $U = 5$.
4. On the electron doped (i.e. physical) side, the transition to microscopic coexistence is continuous for both values of U .

IV. DISCUSSION

On general grounds, the phase diagrams of Fig. 3 obtained with the general parametrization should be more representative of the result obtained with an infinite bath; in other words, closer to an accurate solution of the Hubbard model. Since we find that the results for this general parametrization are closer to the experimental phase diagram of cuprates, the appropriateness of the one-band Hubbard model for cuprate superconductors is reinforced.

On physical grounds, we can argue that the phase diagrams obtained with the general parametrization are more accurate. Consider U slightly below the critical value for the Mott transition, in our case at $U = 6$: the simple parametrization leads to a superconducting ground state at half-filling, whereas the general parametrization favors antiferromagnetism. The latter result is more sensible considering antiferromagnetism at half-filling can be obtained at the Hartree-Fock level while d -wave superconductivity is a dynamical effect. Another example is the reentrant behavior of superconductivity upon underdoping obtained with the simple parametrization at $U = 12$, between half-filling and 4% electron doping: it is inexplicable on physical grounds. This reentrant behavior is suppressed when using the general parametrization: there is a slight reduction in amplitude and it appears at lower electron doping, before 3%. It also becomes well separated from the superconducting dome. This distance from the dome allows for a meaningful analysis of the particle number of the AIM on each side of this reentrant feature and leads us to believe that it is a finite-size effect, as pointed out in section III A.

One can observe in Fig. 3 that, as U increases, the difference between the phase diagrams of the two parametrizations becomes more subtle, especially on the hole doped side. At $U = 12$, the results are qualitatively equivalent on the hole-doped side. We can only speculate on why this happens. As the general parametrization can reproduce any hy-

bridization function the simple one can generate, it is possible the converged hybridization functions produced by the two parametrizations are more similar at higher U values. This would mean that the additional constraints of the simple parametrization become less of an issue as the states become more localized. In other words, it could mean that some of the constraints of the simple parametrization are physically meaningful at strong coupling.

Let us note that even our “simple parametrization” has more variational parameters than what was used in previous ED-CDMFT studies [20, 21]. In these previous studies, the π -triplet had no associated variational parameter in the AIM Hamiltonian, even if its expectation value does not vanish in the microscopic coexistence phase. These additional degrees of freedom allow for slightly stronger d -wave superconductivity, although the overall qualitative shape of the phase diagram is unchanged. One should also note that Ref. 20 considers a particle-hole symmetric lattice, leading to notably different phase diagrams.

At intermediate coupling, the regime relevant for cuprates, details of the band structure, the value of t' in particular, are just as important as the interaction strength to determine the phase diagram, as noted in Ref. 21. Indeed, Figure 3, with band parameters relevant to YBCO, shows that electron-hole symmetry is strongly violated. In the general parametrization, microscopic coexistence between d -wave superconductivity and antiferromagnetism is confined to the electron-doped region. On the hole-doped side, the transition between antiferromagnetism and d -wave superconductivity is of first order for $U = 8$ and $U = 12$, for both parametrizations. Note that the wider range of doping for antiferromagnetism on the electron-doped side simply reflects the better nesting at the antiferromagnetic wave vector [19].

It is quite remarkable that the electron-doped side realizes a proposal by Sachdev [59] that the presence of d -wave superconductivity leads to a large displacement of the doping at which antiferromagnetism ends. This can be seen by comparing the end of the pale blue dots for $U = 8$ or 12 with the end of the dark blue dots in Fig. 3. However, Sachdev’s conjecture concerned the hole-doped compound where we do not observe this effect.

A continuous time QMC computation [44] of the antiferromagnetic phase with $t' = -0.1$ shows that it extends to 15% hole doping, like what we can see in Fig. 4. This suggests that, with these band parameters and coupling, the presence of superconductivity has very little effect on the antiferromagnetic phase. An FRG study of microscopic coexistence [22] at weaker coupling but similar band parameters finds a hole doped phase diagram strikingly similar to Fig. 4 at $U = 5$. This shows that those results are robust when long wavelengths and incommensurate orders are suppressed.

Our small clusters cannot sustain waves with periods longer than two unit cells, like the charge order seen in experiments [60] or the incommensurate spin-waves seen in both experiments [6–9, 61] and infinite lattice weak-coupling calculations [23, 62–64]. We expect that if we

could probe such orders, parts of our phase diagram would be different. Indeed, a VCA study [65] has found a charge density wave with a four-unit-cell period coexisting microscopically with superconductivity on the hole-doped side. Although magnetism disappears at small doping on the hole-doped side even when superconductivity is absent, we cannot exclude that spiral order could persist to large hole dopings. This is one of the explanations offered [62] for the abrupt change in the Hall effect when one enters the pseudogap regime at low temperature and in magnetic fields sufficiently strong to destroy superconductivity. Collinear incommensurate magnetism, however, cannot explain this Hall data [66]. It has been proposed that Seebeck measurements can tell apart the various phenomenological theories for this Hall data [67].

Comparing the two sets of band parameters, we observe that increasing second- and third-neighbour hopping reduces the regions of microscopic coexistence. This is understandable from the bare band structure that shows reduced nesting in that case [52], weakening antiferromagnetism. This effect is especially pronounced on the hole-doped side. The effect of U on the amplitude of the triplet order hints that microscopic coexistence is more stable the closer the system is to the Mott transition, as the triplet order is stronger there. Increasing U also increases the domain of filling that supports microscopic coexistence on the electron-doped side. The phase transitions are generally second order, except on the hole-doped side where the transition between antiferromagnetism and superconductivity is often first order. This reflects the weakness of antiferromagnetism away from half-filling on the hole-doped side.

V. CONCLUSION

Following the lead of Ref. [24–26], we used symmetry and gauge-invariance considerations to propose the most general parametrization of the bath for an exact-diagonalization CDMFT solution of the Hubbard model with a 4-site cluster hybridized with 8 bath orbitals. The parametrization must be chosen according to the phases that are put in competition, here antiferromagnetism and d -wave superconductivity. A simpler parametrization gives qualitatively correct results only when antiferromagnetism and d -wave superconductivity do not coexist. We found phase diagrams that are much closer to observations than previous results found with simpler parametrizations.

In particular, microscopic coexistence between antiferromagnetism and d -wave superconductivity is more robust for electron-doped compounds. For large U and $|t'|$, the filling where antiferromagnetism ends in the absence of superconductivity is much larger than in the presence of superconductivity.

Given the generality of the bath parametrization, our results are the most accurate that can be obtained with a finite bath and an exact diagonalization solver. They will be a useful guide for calculations that include an infinite bath but are performed with more resource-hungry continuous-time quantum Monte Carlo solvers.

ACKNOWLEDGMENTS

This work has been supported by the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) under grants RGPIN-2014-04584 and RGPIN-2015-05598, the Canada First Research Excellence Fund, by the Research Chair in the Theory of Quantum Materials and by the Fonds de recherche du Québec. Computing resources were provided by Compute Canada and Calcul Québec.

-
- [1] D. K. Pratt, W. Tian, A. Kreyssig, J. L. Zarestky, S. Nandi, N. Ni, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. I. Goldman, and R. J. McQueeney, "Coexistence of Competing Antiferromagnetic and Superconducting Phases in the Underdoped Ba (Fe_{0.953}Co_{0.047})₂As₂ Compound Using X-ray and Neutron Scattering Techniques," *Physical Review Letters* **103** (2009), 10.1103/PhysRevLett.103.087001.
- [2] R. H. Liu, X. G. Luo, M. Zhang, A. F. Wang, J. J. Ying, X. F. Wang, Y. J. Yan, Z. J. Xiang, P. Cheng, G. J. Ye, Z. Y. Li, and X. H. Chen, "Coexistence of superconductivity and antiferromagnetism in single crystals A_{0.8}Fe_{2-y}Se₂ (A=K, Rb, Cs, Tl/K and Tl/Rb): Evidence from magnetization and resistivity," *EPL (Europhysics Letters)* **94**, 27008 (2011).
- [3] G. Knebel, D. Aoki, D. Braithwaite, B. Salce, and J. Flouquet, "Coexistence of antiferromagnetism and superconductivity in CeRhIn₅ under high pressure and magnetic field," *Physical Review B* **74** (2006), 10.1103/PhysRevB.74.020501.
- [4] S. Kawasaki, T. Mito, Y. Kawasaki, G.-q. Zheng, Y. Kitaoka, D. Aoki, Y. Haga, and Y. Onuki, "Gapless Magnetic and Quasiparticle Excitations due to the Coexistence of Antiferromagnetism and Superconductivity in CeRhIn₅: A Study of In₁₁₅ NQR under Pressure," *Physical Review Letters* **91** (2003), 10.1103/PhysRevLett.91.137001.
- [5] N. P. Armitage, P. Fournier, and R. L. Greene, "Progress and perspectives on electron-doped cuprates," *Reviews of Modern Physics* **82**, 2421–2487 (2010).
- [6] K. Yamada, C. H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada, S. Wakimoto, S. Ueki, H. Kimura, Y. Endoh, S. Hosoya, G. Shirane, R. J. Birgeneau, M. Greven, M. A. Kastner, and Y. J. Kim, "Doping dependence of the spatially modulated dynamical spin correlations and the superconducting-transition temperature in La_{2-x}Sr_xCuO₄," *Physical Review B* **57**, 6165–6172 (1998).
- [7] S. Wakimoto, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. S. Lee, R. Erwin, P. M. Gehring, S. H. Lee, M. Fujita, K. Yamada, Y. Endoh, K. Hirota, and G. Shirane, "Direct observation of a one-dimensional static spin modulation in insulating La_{1.95}Sr_{0.05}CuO₄," *Physical Review B* **61**, 3699–3706 (2000).
- [8] S. Wakimoto, G. Shirane, Y. Endoh, K. Hirota, S. Ueki, K. Ya-

- mada, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. S. Lee, P. M. Gehring, and S. H. Lee, "Observation of incommensurate magnetic correlations at the lower critical concentration for superconductivity in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x = 0.05$)," *Physical Review B* **60**, R769–R772 (1999).
- [9] M. Fujita, K. Yamada, H. Hiraka, P. Gehring, S. Lee, S. Wakimoto, and G. Shirane, "Static magnetic correlations near the insulating-superconducting phase boundary in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$," *Physical Review B* **65** (2002), 10.1103/PhysRevB.65.064505.
- [10] Eugene Demler, Werner Hanke, and Shou-Cheng Zhang, "SO (5) theory of antiferromagnetism and superconductivity," *Reviews of Modern Physics* **76**, 909–974 (2004).
- [11] D. E. Almeida, R. M. Fernandes, and E. Miranda, "Induced spin-triplet pairing in the coexistence state of antiferromagnetism and singlet superconductivity: Collective modes and microscopic properties," *Physical Review B* **96** (2017), 10.1103/PhysRevB.96.014514.
- [12] A. Himeda and M. Ogata, "Coexistence of $d_{x^2-y^2}$ superconductivity and antiferromagnetism in the two-dimensional t - J model and numerical estimation of Gutzwiller factors," *Physical Review B* **60**, R9935–R9938 (1999).
- [13] S. Vèrret, M. Charlebois, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay, "Subgap structures and pseudogap in cuprate superconductors: Role of density waves," *Physical Review B* **95** (2017), 10.1103/PhysRevB.95.054518.
- [14] Patrick A. Lee, "Amperean Pairing and the Pseudogap Phase of Cuprate Superconductors," *Physical Review X* **4**, 031017 (2014).
- [15] M. R. Norman and J. C. Séamus Davis, "Quantum oscillations in a biaxial pair density wave state," *Proceedings of the National Academy of Sciences* **115**, 5389–5391 (2018).
- [16] M. H. Hamidian, S. D. Edkins, Sang Hyun Joo, A. Kostin, H. Eisaki, S. Uchida, M. J. Lawler, E.-A. Kim, A. P. Mackenzie, K. Fujita, Jinho Lee, and J. C. Séamus Davis, "Detection of a Cooper-pair density wave in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$," *Nature* **532**, 343–347 (2016).
- [17] Masahiko Inui, Sebastian Doniach, Peter Hirschfeld, and Andrei Ruckenstein, "Coexistence of antiferromagnetism and superconductivity in a mean-field theory of high- T_c superconductors," *Physical Review B* **37**, 2320–2323 (1988).
- [18] Bumsoo Kyung, "Mean-field study of the interplay between antiferromagnetism and d -wave superconductivity," *Physical Review B* **62**, 9083–9088 (2000).
- [19] David Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois, and A.-M. S. Tremblay, "Competition between Antiferromagnetism and Superconductivity in High- T_c Cuprates," *Physical Review Letters* **94** (2005), 10.1103/PhysRevLett.94.156404.
- [20] M. Capone and G. Kotliar, "Competition between d -wave superconductivity and antiferromagnetism in the two-dimensional Hubbard model," *Physical Review B* **74** (2006), 10.1103/PhysRevB.74.054513.
- [21] S. S. Kancharla, B. Kyung, D. Sénéchal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar, and A.-M. S. Tremblay, "Anomalous superconductivity and its competition with antiferromagnetism in doped Mott insulators," *Physical Review B* **77** (2008), 10.1103/PhysRevB.77.184516.
- [22] J. Reiss, D. Rohe, and W. Metzner, "Renormalized mean-field analysis of antiferromagnetism and d -wave superconductivity in the two-dimensional Hubbard model," *Physical Review B* **75** (2007), 10.1103/PhysRevB.75.075110.
- [23] Hiroyuki Yamase, Andreas Eberlein, and Walter Metzner, "Coexistence of Incommensurate Magnetism and Superconductivity in the Two-Dimensional Hubbard Model," *Physical Review Letters* **116** (2016), 10.1103/PhysRevLett.116.096402.
- [24] Erik Koch, Giorgio Sangiovanni, and Olle Gunnarsson, "Sum rules and bath parametrization for quantum cluster theories," *Physical Review B* **78** (2008), 10.1103/PhysRevB.78.115102.
- [25] Ansgar Liebsch and Ning-Hua Tong, "Finite-temperature exact diagonalization cluster dynamical mean-field study of the two-dimensional Hubbard model: Pseudogap, non-Fermi-liquid behavior, and particle-hole asymmetry," *Physical Review B* **80** (2009), 10.1103/PhysRevB.80.165126.
- [26] Ansgar Liebsch and Hiroshi Ishida, "Temperature and bath size in exact diagonalization dynamical mean field theory," *Journal of Physics: Condensed Matter* **24**, 053201 (2012).
- [27] Emanuel Gull, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer, and Philipp Werner, "Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models," *Reviews of Modern Physics* **83**, 349–404 (2011).
- [28] M. Jarrell, Th Maier, M. H. Hettler, and A. N. Tahvildarzadeh, "Phase diagram of the Hubbard model: Beyond the dynamical mean field," *EPL (Europhysics Letters)* **56**, 563 (2001).
- [29] Th. A. Maier, M. Jarrell, A. Macridin, and C. Slezak, "Kinetic Energy Driven Pairing in Cuprate Superconductors," *Physical Review Letters* **92** (2004), 10.1103/PhysRevLett.92.027005.
- [30] T. A. Maier, M. Jarrell, T. C. Schulthess, P. R. C. Kent, and J. B. White, "Systematic Study of d -Wave Superconductivity in the 2d Repulsive Hubbard Model," *Physical Review Letters* **95** (2005), 10.1103/PhysRevLett.95.237001.
- [31] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay, "Strong Coupling Superconductivity, Pseudogap, and Mott Transition," *Physical Review Letters* **108** (2012), 10.1103/PhysRevLett.108.216401.
- [32] Nan Lin, Emanuel Gull, and Andrew J. Millis, "Two-Particle Response in Cluster Dynamical Mean-Field Theory: Formalism and Application to the Raman Response of High-Temperature Superconductors," *Physical Review Letters* **109** (2012), 10.1103/PhysRevLett.109.106401.
- [33] Emanuel Gull, Olivier Parcollet, and Andrew J. Millis, "Superconductivity and the Pseudogap in the Two-Dimensional Hubbard Model," *Physical Review Letters* **110** (2013), 10.1103/PhysRevLett.110.216405.
- [34] E. Gull and A. J. Millis, "Energetics of superconductivity in the two-dimensional Hubbard model," *Physical Review B* **86** (2012), 10.1103/PhysRevB.86.241106.
- [35] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay, "c-axis resistivity, pseudogap, superconductivity, and Widom line in doped Mott insulators," *Physical Review B* **87** (2013), 10.1103/PhysRevB.87.041101.
- [36] E. Gull and A. J. Millis, "Superconducting and pseudogap effects on the interplane conductivity and Raman scattering cross section in the two-dimensional Hubbard model," *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/PhysRevB.88.075127.
- [37] Peter Staar, Thomas A. Maier, Michael S. Summers, Gilles Fourestey, Raffaele Solca, and Thomas C. Schulthess, "Taking a quantum leap in time to solution for simulations of high- T_c superconductors," in *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis on - SC '13* (ACM Press, Denver, Colorado, 2013) pp. 1–11.
- [38] P. Sémon, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay, "Ergodicity of the hybridization-expansion Monte Carlo algorithm for broken-symmetry states," *Physical Review B* **89** (2014), 10.1103/PhysRevB.89.165113.

- [39] E. Gull and A. J. Millis, “Pairing glue in the two-dimensional Hubbard model,” *Physical Review B* **90** (2014), [10.1103/PhysRevB.90.041110](#).
- [40] E. Gull and A. J. Millis, “Quasiparticle properties of the superconducting state of the two-dimensional Hubbard model,” *Physical Review B* **91** (2015), [10.1103/PhysRevB.91.085116](#).
- [41] L. Fratino, P. Sémon, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay, “An organizing principle for two-dimensional strongly correlated superconductivity,” *Scientific Reports* **6**, 22715 (2016).
- [42] A. Reymbaut, M. Charlebois, M. Fellous Asiani, L. Fratino, P. Sémon, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay, “Antagonistic effects of nearest-neighbor repulsion on the superconducting pairing dynamics in the doped Mott insulator regime,” *Physical Review B* **94** (2016), [10.1103/PhysRevB.94.155146](#).
- [43] L. Fratino, P. Sémon, M. Charlebois, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay, “Signatures of the Mott transition in the antiferromagnetic state of the two-dimensional Hubbard model,” *Physical Review B* **95** (2017), [10.1103/PhysRevB.95.235109](#).
- [44] L. Fratino, M. Charlebois, P. Sémon, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay, “Effects of interaction strength, doping, and frustration on the antiferromagnetic phase of the two-dimensional Hubbard model,” *Physical Review B* **96** (2017), [10.1103/PhysRevB.96.241109](#).
- [45] Shiro Sakai, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held, and Masatoshi Imada, “Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory,” *Physical Review B* **85** (2012), [10.1103/PhysRevB.85.035102](#).
- [46] Giulio Biroli and Gabriel Kotliar, “Cluster methods for strongly correlated electron systems,” *Physical Review B* **65** (2002), [10.1103/PhysRevB.65.155112](#).
- [47] K. Aryanpour, Th. A. Maier, and M. Jarrell, “Comment on ‘Cluster methods for strongly correlated electron systems,’” *Physical Review B* **71** (2005), [10.1103/PhysRevB.71.037101](#).
- [48] G. Biroli and G. Kotliar, “Reply to ‘Comment on ‘Cluster methods for strongly correlated electron systems’,’” *Physical Review B* **71** (2005), [10.1103/PhysRevB.71.037102](#).
- [49] J. Zaanen, G. A. Sawatzky, and J. W. Allen, “Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds,” *Physical Review Letters* **55**, 418–421 (1985).
- [50] O.K. Andersen, A.I. Liechtenstein, O. Jepsen, and F. Paulsen, “LDA energy bands, low-energy hamiltonians, t' , t , $t \perp (k)$, and $J \perp$,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **56**, 1573–1591 (1995).
- [51] B. Kyung, V. Hankevych, A.-M. Daré, and A.-M. S. Tremblay, “Pseudogap and Spin Fluctuations in the Normal State of the Electron-Doped Cuprates,” *Physical Review Letters* **93** (2004), [10.1103/PhysRevLett.93.147004](#).
- [52] R. S. Markiewicz, I. G. Buda, P. Mistark, and A. Bansil, “Entropic Origin of Pseudogap Physics and a Mott-Slater Transition in Cuprates,” *Scientific Reports* **7**, 44008 (2017).
- [53] Michel Caffarel and Werner Krauth, “Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity,” *Physical Review Letters* **72**, 1545–1548 (1994).
- [54] David Sénéchal, “Bath optimization in the cellular dynamical mean-field theory,” *Physical Review B* **81** (2010), [10.1103/PhysRevB.81.235125](#).
- [55] David Sénéchal, “Cluster Dynamical Mean Field Theory,” in *Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 171, edited by Adolfo Avella and Ferdinando Mancini (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012) pp. 341–371.
- [56] “See supplemental material at [url will be inserted by publisher] for phase diagrams made with other combinations of lattice and cluster averages and for comments on the differences between them,”.
- [57] Mathieu Guillot, *Compétition entre l’antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle et Hubbard appliqué aux cuprates.*, Thèses de l’Université de Sherbrooke - Sciences - Physique (2007).
- [58] M. Aichhorn, E. Arrighoni, M. Potthoff, and W. Hanke, “Antiferromagnetic to superconducting phase transition in the hole- and electron-doped Hubbard model at zero temperature,” *Physical Review B* **74** (2006), [10.1103/PhysRevB.74.024508](#).
- [59] Subir Sachdev, “Quantum criticality and the phase diagram of the cuprates,” *Physica C: Superconductivity and its Applications Proceedings of the 9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity*, **470**, S4–S6 (2010).
- [60] Riccardo Comin and Andrea Damascelli, “Resonant X-Ray Scattering Studies of Charge Order in Cuprates,” *Annual Review of Condensed Matter Physics* **7**, 369–405 (2016).
- [61] D. Haug, V. Hinkov, Y. Sidis, P. Bourges, N. B. Christensen, A. Ivanov, T. Keller, C. T. Lin, and B. Keimer, “Neutron scattering study of the magnetic phase diagram of underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$,” *New Journal of Physics* **12**, 105006 (2010).
- [62] Andreas Eberlein, Walter Metzner, Subir Sachdev, and Hiroyuki Yamase, “Fermi Surface Reconstruction and Drop in the Hall Number due to Spiral Antiferromagnetism in High- T_c Cuprates,” *Physical Review Letters* **117** (2016), [10.1103/PhysRevLett.117.187001](#).
- [63] Y. M. Vilk and A.-M. S. Tremblay, “Non-Perturbative Many-Body Approach to the Hubbard Model and Single-Particle Pseudogap,” *Journal de Physique I* **7**, 1309–1368 (1997).
- [64] H. J. Schulz, “Incommensurate antiferromagnetism in the two-dimensional Hubbard model,” *Physical Review Letters* **64**, 1445–1448 (1990).
- [65] J. P. L. Faye and D. Sénéchal, “Interplay between d -wave superconductivity and a bond-density wave in the one-band Hubbard model,” *Physical Review B* **95** (2017), [10.1103/PhysRevB.95.115127](#).
- [66] M. Charlebois, S. Verret, A. Foley, O. Simard, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay, “Hall effect in cuprates with an incommensurate collinear spin-density wave,” *Physical Review B* **96** (2017), [10.1103/PhysRevB.96.205132](#).
- [67] S. Verret, O. Simard, M. Charlebois, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay, “Phenomenological theories of the low-temperature pseudogap: Hall number, specific heat, and Seebeck coefficient,” *Physical Review B* **96** (2017), [10.1103/PhysRevB.96.125139](#).

Dans les sections suivantes, on décrit le travail fait dans les articles qui ne sont pas inclus dans cette thèse.

2.2 Calcul de la rigidité superfluide [22]

La rigidité superfluide est une propriété centrale des supraconducteurs. Il s'agit d'une conséquence directe de la cohérence de phase des paires de Cooper, nécessaire à la formation de courants sans dissipation. La rigidité nous renseigne aussi sur la stabilité du condensat : la cohérence de phase est plus facile à briser, et la supraconductivité détruite, dans un condensat moins rigide. Il s'agit possiblement du meilleur substitut de la température critique auquel on a accès à température nulle. Un premier objectif de cet article est de caractériser l'effet de la coexistence avec l'antiferromagnétisme sur la rigidité superfluide et à comparer l'importance de cet effet à celui de la proximité de l'isolant de Mott. Un second objectif est de tenter de déterminer s'il y a un régime de dopage où le supraconducteur est plus proche d'être conventionnel. Un dernier objectif est de caractériser l'effet de sauts entre les plans de cuivre-oxygène sur la rigidité.

Les calculs de l'article peignent une image assez différente pour le dopage en trous et le dopage en électrons. Du côté dopé aux trous, la physique de Mott semble jouer un rôle important dans l'affaiblissement de la supraconductivité à l'approche du demi-remplissage. Du côté dopé aux électrons, c'est plutôt la compétition avec l'antiferromagnétisme qui contrôle le dôme supraconducteur.

2.3 Brisure de la symétrie de translation en CDMFT [24]

La CDMFT cause une brisure artificielle de l'invariance par translation. Malgré cela, il s'agit d'une méthode qui a démontré de grands succès dans l'étude des systèmes d'électrons fortement corrélés. Dans cette étude, on investigate en détail comment cette brisure de l'invariance par translation se manifeste. Ceci nous permet de démêler les effets de cette brisure des véritables conséquences des fortes corrélations dans les résultats CDMFT.

On observe des ondes de densité artificielles ayant la forme des amas dans tous nos résultats de CDMFT, ainsi qu'une onde de densité de paires dans l'état supraconducteur. On discute des limites des méthodes de périodisation cherchant à réduire ce problème et on présente des résultats de champ moyen reproduisant les résultats CDMFT à faible énergie dans l'état supraconducteur. Les résultats de champ moyen nous permettent d'identifier les attributs des spectres qui sont des conséquences des ondes de densité. On observe que ces ondes de densité artificielles améliorent l'accord de la CDMFT avec les spectres expérimentaux obtenus par microscopie à effet tunnel. Ce coup de chance suggère que les inhomogénéités spatiales sont un élément clé de la physique de basse énergie des cuprates supraconducteurs. Cet article approfondit notre compréhension de la CDMFT et identifie les signatures de la brisure de l'invariance par translation en présence de corrélations fortes.

Chapitre 3

Réseaux de tenseurs

L'obstacle principal dans l'obtention de solutions au problème à N-corps quantique est la croissance exponentielle de l'espace de Hilbert en fonction du nombre de degrés de liberté. Cette croissance rend rapidement impossible le traitement exact de la plupart des modèles et nous force à faire appel à des méthodes approximatives, parmi celles-ci les méthodes de réseaux de tenseurs [1, 4, 25, 26]. Un réseau de tenseurs est un *ansatz* variationnel pour la fonction d'onde d'un système défini sur un réseau. Une fois optimisé, le réseau de tenseurs est une *représentation compressée* de la fonction d'onde. Tout l'intérêt de ces méthodes vient du fait qu'avec un *ansatz* bien pensé, toute l'information physique est accessible sans effectuer une décompression de la fonction d'onde, donnant à ces méthodes un avantage substantiel sur les approches directes en temps de calcul et en espace de stockage [3, 27-32].

On se concentre ici sur un *ansatz* particulier pour la fonction d'onde, l'état en produit de matrices (*Matrix Product State* ou MPS) et son équivalent pour les opérateurs, l'opérateur en produit de matrices (*Matrix Product Operator* ou MPO). Ces deux réseaux de tenseurs sont possiblement les plus simples, et forment la base des méthodes développées ici pour calculer la fonction de Green de problèmes d'impureté.

Dans ce chapitre, on explique d'abord les principes de base des méthodes de réseaux de tenseur. On explique ensuite une méthode pour obtenir l'état fondamental d'un hamiltonien interagissant : le groupe de renormalisation de la matrice densité (*Density Matrix Renormalization Group* ou DMRG) et une variation de celle-ci qui permet de résoudre simultanément plusieurs états de faible énergie. Finalement, on explique un algorithme variationnel pour accomplir les opérations d'algèbre linéaire de l'algorithme de Lanczos.

3.1 Principes de base

Les tenseurs sont des objets existant dans un espace vectoriel qui est le produit tensoriel de plusieurs espaces vectoriels «élémentaires». Les états et opérateurs de la mécanique quantique en sont. En pratique, ils sont représentés par des tableaux multidimensionnels de données. Typiquement, on représente un état par un vecteur, un tenseur de rang 1, et un opérateur par un tenseur de rang 2, mais il s'agit d'un choix et non d'une obligation. En fait, pour le problème à N-corps sur un réseau cristallin, les états dans l'espace de Hilbert se prêtent assez naturellement à une représentation en tenseurs ayant un rang proportionnel au nombre de sites du réseau. Considérons, par exemple, un système de particules de spin 1/2 sur 4 sites : un état quelconque peut être décrit par

$$|\psi\rangle = \sum_{ijkl} \psi_{ijkl} |ijkl\rangle, \quad (3.1)$$

où ψ_{ijkl} sont les coefficients de chacun des états de base $|ijkl\rangle$ et chacun des indices i, j, k, l prend quatre valeurs : vide, un spin up, un spin down et deux particules de spin opposé. Dans cette base, cet état peut être interprété comme un tenseur de rang 4 dont les coefficients sont ψ_{ijkl} . Dans la notation graphique des réseaux de tenseurs, on l'illustre ainsi :

$$\psi_{ijkl} = \begin{array}{c} i \quad j \quad k \quad l \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \psi \\ \text{---} \\ | \\ \psi_{ijkl} \end{array} \quad (3.2)$$

Le tenseur est représenté par une forme avec autant de pattes qu'il y a d'indices. Un opérateur quelconque \mathbf{O} dans le même espace est décrit par

$$\mathbf{O} = \sum_{ijklmnop} O_{ijkl}^{mnop} |ijkl\rangle \langle mnop|. \quad (3.3)$$

Le tableau de coefficients O_{ijkl}^{mnop} est un tenseur de rang 8. Dans la notation graphique, on l'illustre ainsi :

$$O_{ijkl}^{mnop} = \begin{array}{c} i \quad j \quad k \quad l \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \mathbf{O} \\ \text{---} \\ | \\ m \quad n \quad o \quad p \end{array} \quad (3.4)$$

Le produit entre un opérateur et un état s'écrit comme une contraction de certains indices des tenseurs : la somme sur les indices partagés. Le produit de l'état $|\psi\rangle$ et de l'opérateur \mathbf{O} est

$$\mathbf{O}|\psi\rangle = \sum_{ijklmnop} O_{ijkl}^{mnop} \psi_{mnop} |ijkl\rangle. \quad (3.5)$$

On l'illustre ainsi :



Les indices contractés sont représentés par des pattes joignant les deux tenseurs, et leurs étiquettes (m, n, o et p) sont omises.

Il est possible d'effectuer une compression de l'information contenue dans un tenseur en le décomposant en un réseau de tenseurs. Une telle compression peut être faite à l'aide de la décomposition en valeurs singulières (*singular value decomposition* ou SVD). La SVD est un analogue de la décomposition en valeurs propres applicable aux matrices rectangulaires. Pour une matrice $[\mathbf{M}]_{m \times n}$ la SVD s'écrit ainsi :

$$\mathbf{M} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}. \tag{3.7}$$

La matrice \mathbf{D} est diagonale et contient les valeurs singulières : des nombres positifs ou nuls. Cette matrice est carrée, et sa dimension est dicté par le plus petit des deux côtés de \mathbf{M} , les deux cas sont illustrés à la fig. 3.1. Pour simplifier la discussion et sans perte de généralité, on peut supposer que $n < m$. Les colonnes de la matrice \mathbf{U} sont des vecteurs orthonormaux, tout comme les rangés de \mathbf{V} . Si certaines des valeurs singulières sont très petites ou nulles, on peut les tronquer. C'est-à-dire qu'on rejette les colonnes de \mathbf{U} et les rangés de \mathbf{V} associées à ces valeurs singulières négligeables. Après la troncation des valeurs singulières négligeables la taille de la matrice \mathbf{D} est réduite à l , un nombre inférieur à n . On peut reconstruire une approximation de \mathbf{M} en effectuant le produit $\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}$ après la troncation. La qualité de l'approximation est contrôlée par la taille des valeurs singulières rejetées. On a alors l'option de garder en mémoire les deux matrices $\mathbf{L} = \mathbf{U}\mathbf{D}$ et \mathbf{V} (ou encore \mathbf{U} et $\mathbf{R} = \mathbf{D}\mathbf{V}$) plutôt que la matrice \mathbf{M} elle-même. La décomposition nécessite moins de mémoire que la matrice si $l < \frac{mn}{m+n}$.

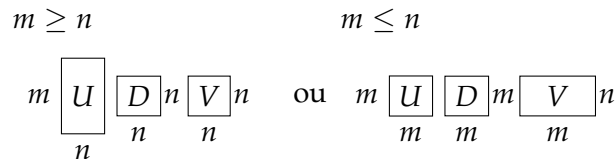
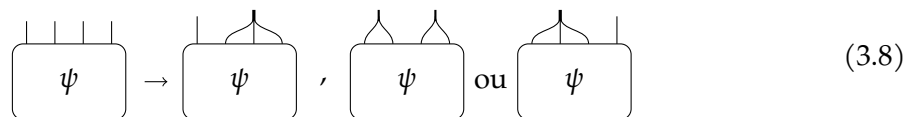


FIGURE 3.1 Schéma des dimensions des matrices de la décomposition aux valeurs singulières selon le côté le plus large de la matrice décomposée.

Pour effectuer la décomposition en valeurs singulières d'un tenseur, il faut d'abord le *remodeler* en une matrice, c'est-à-dire joindre des indices jusqu'à ce qu'il n'en reste que deux. Voici trois exemples de remodelage de l'état $|\psi\rangle$:



Pour les différents remodelages illustrés, l'état $|\psi\rangle$ devient une matrice 4×4^3 , $4^2 \times 4^2$ ou $4^3 \times 4$. Les autres remodelages en matrice possibles sur $|\psi\rangle$ nécessitent de changer l'ordre des indices ; on représente typiquement cette opération par des pattes qui se croisent. Une fois le choix de représentation matricielle fait, on peut procéder à la décomposition en valeurs singulière et ensuite inverser le remodelage :

$$\begin{aligned}
 \psi &= U_1 - D_1 - V_1 \\
 \psi &= U_1 - D_1 - V_1
 \end{aligned}
 \tag{3.9}$$

À la deuxième ligne, la décomposition est effectuée avec un remodelage implicite : seul le trait pointillé rouge indique le choix de représentation matricielle utilisé. Les indices à droite du trait pointillé deviennent les indices libres du tenseur V et celui à gauche du trait correspond à l'indice libre du tenseur U . Le côté droit de l'équation est une représentation en réseau de tenseurs de l'état $|\psi\rangle$. L'opération illustrée précédemment est la première étape pour calculer la représentation en MPS de l'état. Pour compléter le calcul de la représentation MPS, il faut d'abord contracter le tenseur D avec le tenseur V et ensuite effectuer une autre décomposition en valeurs singulières et continuer, ainsi de suite jusqu'à ce que tous les tenseurs n'aient qu'un seul indice libre :

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= U_1 - D_1 V_1 \\
 &= U_1 - U_2 - D_2 V_2 \\
 &= U_1 - U_2 - U_3 - C_4
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

La dernière ligne est un MPS de l'état $|\psi\rangle$ avec un centre d'orthogonalité au site 4. Un MPS avec un centre d'orthogonalité est dit *canonique*. Le centre d'orthogonalité est le seul tenseur du réseau qui ne peut être remodelé trivialement en une matrice de colonnes ou de rangées orthonormales. Le réseau contient un nombre d'indices contractés entre les tenseurs de chacun des sites ; on les nomme *liens*. Les indices libres sont les indices physiques du réseau de tenseurs. La dimension de ces liens quantifie la compression de la représentation.

Il est possible d'effectuer des transformations de jauge sur n'importe quel lien. Par

exemple, le centre d'orthogonalité peut être déplacé à l'aide de la SVD.

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= U_1 - U_2 - U_3 - C_4 \\
 &= U_1 - U_2 - U_3 - U_4 D_4 - V_4 \\
 &= U_1 - U_2 - C_3 - V_4
 \end{aligned}
 \tag{3.11}$$

À la première ligne, on signifie qu'on effectue une SVD sur le tenseur C_4 avec le trait pointillé rouge et à la deuxième on indique qu'on effectue la contraction des indices partagés de deux tenseurs en les encerclant d'un trait pointillé. Le résultat de cette contraction est le tenseur C_3 , le nouveau centre d'orthogonalité du réseau. La présence d'un centre d'orthogonalité dans un MPS est très utile pour calculer la valeur moyenne d'observables localisées à proximité du centre. À cause de la propriété d'orthonormalité des colonnes des U_i et des rangées des V_i , les calculs avec ces observables sont grandement simplifiés : lorsque l'indice physique de U_1 ou de V_4 est contracté avec l'indice physique de leur conjugués hermitiens respectifs, le résultat de la contraction est trivialement l'identité. Similairement, pour les tenseurs qui ne sont pas sur les bords, si on contracte le lien gauche et l'indice physique de U_i ou le lien droit et l'indice physique de V_i avec leur conjugués hermitiens respectifs, il en résulte trivialement l'identité. Conséquemment,

$$\langle \psi | O_3 | \psi \rangle = \text{Diagram}
 \tag{3.12}$$

où O_3 est un opérateur agissant seulement sur le site 3. Il n'est donc pas nécessaire de considérer explicitement les tenseurs U_i et V_i lors du calcul de telles valeurs, ce qui peut épargner une quantité considérable de temps lors d'un calcul numérique : cette simplification est indépendante de la taille du système. L'avantage est d'autant moins prononcé que l'opérateur agit loin du centre d'orthogonalité. Considérons

$$\langle \psi | O_2 | \psi \rangle = \text{Diagram}
 \tag{3.13}$$

où O_2 agit seulement sur le site 2. On doit alors faire le calcul explicite des contractions impliquant les tenseurs U_2 en plus des tenseurs C_3 .

Ces optimisations sont possibles grâce à l'indépendance par rapport à l'ordre des contractions du résultat d'une séquence de contractions. Bien que le résultat de la contraction ne dépende pas de l'ordre, le temps de calcul nécessaire à l'obtention du résultat en dépend. Il n'y a pas de solution parfaite pour déterminer l'ordre optimal de contraction d'un réseau. Une méthode habituellement rapide est de faire la contraction de deux tenseurs à la fois, en choisissant l'ordre des contractions de façon à construire des tenseurs du plus petit rang possible pour les étapes intermédiaires. La difficulté d'une contraction est mesurée en fonction du nombre de multiplications et d'additions effectuées. On obtient ce nombre en multipliant la dimension de chacun des liens présents dans la contraction d'une paire de tenseurs. Si, par exemple, on contracte les tenseurs U_2 et C_3 de l'équation précédente, le coût est $\mathcal{O}(l_{U_g} d^2 l_{U_d} l_{C_d})$ où l_{U_g} est la dimension du lien gauche de U_2 , l_{U_d} est la dimension du lien droit de U_2 et du lien gauche de C_3 , l_{C_d} est la dimension du lien droit de C_3 et d est la dimension des indices physiques, 4 pour cet exemple. Si on utilisait plutôt le tenseur (3.2) pour calculer la même valeur moyenne, le coût serait $\mathcal{O}(d^N)$ où N est le nombre de sites dans le réseau. Le premier est un polynôme indépendant de la taille du système alors que le deuxième est une fonction exponentielle.

3.1.1 Construction d'un MPO

La représentation en MPO d'opérateurs, souvent le hamiltonien d'un réseau ou des fonctions de celui-ci, est nécessaire dans pratiquement tous les algorithmes qui optimisent les MPS. Construire et manipuler des MPO est un sujet de recherche en soi [33-36]. Dans cette sous-section, on s'attarde à la construction du hamiltonien de l'impureté d'Anderson.

Il est souvent possible de construire les tenseurs d'un MPO par inspection de l'opérateur dans sa représentation en deuxième quantification. Considérons d'abord un modèle simple pour se familiariser avec la notation : le modèle d'Ising 1D avec un champ transverse,

$$\mathbf{H} = \sum_i J_i \mathbf{S}_{x,i} \mathbf{S}_{x,i+1} + h_i \mathbf{S}_{z,i}, \quad (3.14)$$

où $\mathbf{S}_{o,i}$ est l'opérateur de la composante o du spin ($o \in [x, y, z]$) au site i , J_i est l'échange entre les sites i et $i + 1$ et h_i l'amplitude du champ transverse au site i . On cherche à réécrire le hamiltonien sous la forme d'un MPO :

$$\mathbf{H} = \begin{array}{c} | \\ \text{---} \\ \boxed{M^{(0)}} \text{---} \boxed{M^{(1)}} \text{---} \boxed{M^{(2)}} \text{---} \dots \text{---} \boxed{M^{(N)}} \\ | \end{array} \quad (3.15)$$

On peut écrire le tenseur au site i du MPO sous la forme d'une matrice d'opérateurs :

$$\mathbf{M}^{(i)} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_i & 0 & 0 \\ \mathbf{S}_{x,i} & 0 & 0 \\ h_i \mathbf{S}_{z,i} & J_i \mathbf{S}_{x,i} & \mathbb{1}_i \end{bmatrix}. \quad (3.16)$$

Chaque élément de cette matrice est un opérateur local agissant sur le site i . Les indices de la matrice correspondent aux indices de liens du tenseur dans le MPO. Les indices physiques sont ceux des opérateurs qui servent d'éléments à la matrice. Le premier et dernier site de la chaîne sont des cas spéciaux : les tenseurs sont de rang 3, on peut donc les exprimer comme des vecteurs d'opérateurs. Le vecteur du premier site peut être obtenu en prenant la dernière rangée de la matrice précédente et celui du dernier site est obtenu en prenant la première colonne. Avec les tenseurs dans cette représentation de matrice et de vecteur d'opérateurs, le hamiltonien (3.14) est égal au produit matriciel des tenseurs, dans l'ordre des sites. À noter : on doit faire le produit tensoriel des éléments de matrice. Si on fait le produit de n'importe quelle paire de tenseurs voisins, on observe que le hamiltonien local aux deux sites se retrouve dans le coin inférieur gauche de la matrice résultante :

$$\mathbf{M}^{(i)}\mathbf{M}^{(i+1)} = \begin{bmatrix} & \mathbb{1}_i & & 0 & 0 \\ & \mathbf{S}_{x,i} & & 0 & 0 \\ h_i\mathbf{S}_{z,i}\mathbb{1}_{i+1} + h_{i+1}\mathbf{S}_{z,i+1}\mathbb{1}_i + J_i\mathbf{S}_{x,i}\mathbf{S}_{x,i+1} & & J_{i+1}\mathbf{S}_{x,i+1} & & \mathbb{1}_{i+1} \end{bmatrix}. \quad (3.17)$$

Cette accumulation du hamiltonien dans un coin de la représentation en matrice des tenseurs du MPO est la mécanique qu'on exploite souvent dans la construction par inspection d'un MPO résultant d'une somme d'opérateurs locaux.

Les fermions posent une difficulté supplémentaire par rapport au cas plus simple des spins localisés : les relations d'anticommuation des opérateurs de création et d'annihilation signifient que ceux-ci ne sont pas des opérateurs complètement locaux. En effet, l'action de l'opérateur de création à un site sur un état induit une phase qui dépend du nombre de particules à tous les sites précédents. Heureusement, les opérateurs de création et d'annihilation peuvent être décomposés en un produit tensoriel d'opérateurs locaux :

$$\mathbf{c}_{r\sigma} = \left(\prod_{i < r} \mathbf{F}_i \right) \tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}, \quad (3.18)$$

où \mathbf{F}_i et $\tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}$ sont des opérateurs locaux définis par les relations suivantes :

$$\mathbf{F}_r^2 = \mathbb{1} \quad (3.19)$$

$$\mathbf{F}_r^\dagger = \mathbf{F}_r \quad (3.20)$$

$$\{\tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}, \tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma'}\} = 0 \quad (3.21)$$

$$\{\tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}, \tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (3.22)$$

$$[\tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}, \tilde{\mathbf{c}}_{s\sigma'}] = 0 \quad \forall r \neq s \quad (3.23)$$

$$[\tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}, \tilde{\mathbf{c}}_{s\sigma'}^\dagger] = 0 \quad \forall r \neq s \quad (3.24)$$

$$\{\mathbf{F}_r, \tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}\} = 0 \quad (3.25)$$

$$[\mathbf{F}_r, \tilde{\mathbf{c}}_{s\sigma}] = 0 \quad \forall r \neq s \quad (3.26)$$

$$[\mathbf{F}_r, \mathbf{F}_s] = 0 \quad \forall r \neq s. \quad (3.27)$$

Il s'agit d'une décomposition parmi d'autres pour traiter les fermions avec des réseaux de tenseurs [4]. La propriété nécessaire est de faire en sorte que tous les opérateurs situés à des

sites différents commutent. Les termes de sauts font intervenir une chaîne d'opérateurs F_i :

$$\mathbf{c}_{i\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{j\sigma'} = \tilde{\mathbf{c}}_{i\sigma}^\dagger \left(\prod_{i \leq l < j} \mathbf{F}_l \right) \tilde{\mathbf{c}}_{j\sigma'} \quad (3.28)$$

où $i \leq j$. Notez que l'opérateur de densité est complètement local sans aucune transformation : $\mathbf{n}_{r\sigma} = \mathbf{c}_{r\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{r\sigma} = \tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}^\dagger \tilde{\mathbf{c}}_{r\sigma}$.

Le MPO que nous allons maintenant décrire représente l'impureté d'Anderson avec un choix particulier de base pour le bain : la géométrie en étoile (fig. 3.2 et 3.3). Plusieurs articles montrent que les états sont plus faciles à compresser dans cette géométrie que dans la géométrie en chaîne plus souvent utilisée dans le passé [5, 6, 37]. La représentation du bain utilisée dans la section 2.1 est une généralisation au problème d'impureté à plusieurs orbitales de la géométrie en étoile. Pour passer d'une représentation quelconque de l'impureté d'Anderson à la géométrie en étoile, il faut simplement diagonaliser le hamiltonien du bain. Comme cette fraction du hamiltonien complet ne contient que des termes à un corps, cette transformation peut être faite numériquement pour des systèmes extrêmement grands.

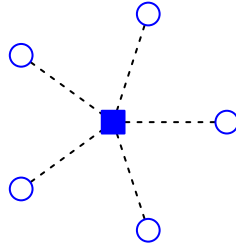


FIGURE 3.2 L'impureté d'Anderson dans la géométrie en étoile, avec cinq orbitales de bain. Toutes les orbitales du bain se couplent par un saut au site d'impureté et à aucun autre.

Le hamiltonien est

$$H_{\text{AIM}} = U \mathbf{n}_{0\uparrow} \mathbf{n}_{0\downarrow} - \mu (\mathbf{n}_{0\uparrow} + \mathbf{n}_{0\downarrow}) + \sum_{i \neq 0, \sigma} \left(\epsilon_i \mathbf{n}_{i\sigma} + \theta_i (\mathbf{c}_{0\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{i\sigma} + \mathbf{c}_{i\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{0\sigma}) \right). \quad (3.29)$$

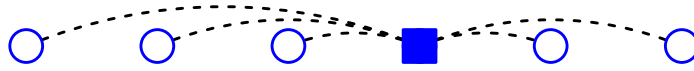


FIGURE 3.3 L'impureté d'Anderson placée sur un axe horizontal. L'ordre dans lequel les bains sont placés est arbitraire.

Pour construire le MPO, il faut assigner un ordre conventionnel aux orbitales. Lorsqu'on met toutes les orbitales sur le même axe, on crée un système $1d$ avec des sauts de particules sur des distances aussi grandes que le système (voir figure 3.3). Représenter un tel hamiltonien sous la forme d'un MPO n'est pas plus difficile que pour les hamiltoniens ayant seulement

des sauts au premier voisin : la dimension de lien est la même dans ce cas. Le MPO associé à ce hamiltonien a la structure suivante :

$$\mathbf{H}_{\text{AIM}} = \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{G^{(l_m)}} \text{---} \dots \text{---} \boxed{G^{(1)}} \text{---} \boxed{I^{(0)}} \text{---} \boxed{D^{(1)}} \text{---} \dots \text{---} \boxed{D^{(l_p)}} \\ | \\ \text{---} \end{array}, \quad (3.30)$$

où

$$D^{(l)} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_l & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_l \tilde{c}_{l\uparrow}^\dagger & \mathbf{F}_l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta_l \tilde{c}_{l\uparrow} & 0 & \mathbf{F}_l & 0 & 0 & 0 \\ \theta_l \tilde{c}_{l\downarrow}^\dagger & 0 & 0 & \mathbf{F}_l & 0 & 0 \\ \theta_l \tilde{c}_{l\downarrow} & 0 & 0 & 0 & \mathbf{F}_l & 0 \\ \epsilon_l(\mathbf{n}_{l\uparrow} + \mathbf{n}_{l\downarrow}) & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{1}_l \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

$$G^{(l)} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_l & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{F}_l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{F}_l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{F}_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{F}_l & 0 \\ \epsilon_l(\mathbf{n}_{l\uparrow} + \mathbf{n}_{l\downarrow}) & \theta_l \mathbf{F}_l \tilde{c}_{l\uparrow} & \theta_l \tilde{c}_{l\uparrow}^\dagger \mathbf{F}_l & \theta_l \mathbf{F}_l \tilde{c}_{l\downarrow} & \theta_l \tilde{c}_{l\downarrow}^\dagger \mathbf{F}_l & \mathbb{1}_l \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

$$I^{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{c}_{0\uparrow}^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{c}_{0\uparrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{c}_{0\downarrow}^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{c}_{0\downarrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ U\mathbf{n}_{0\uparrow}\mathbf{n}_{0\downarrow} - \mu(\mathbf{n}_{0\uparrow} + \mathbf{n}_{0\downarrow}) & \mathbf{F}_0 \tilde{c}_{0\uparrow} & \tilde{c}_{0\uparrow}^\dagger \mathbf{F}_0 & \mathbf{F}_0 \tilde{c}_{0\downarrow} & \tilde{c}_{0\downarrow}^\dagger \mathbf{F}_0 & \mathbb{1}_0 \end{bmatrix}. \quad (3.33)$$

Le tenseur $I^{(0)}$ contient les paramètres du site d'impureté, les tenseurs $G^{(l)}$ contiennent les paramètres des orbitales de bain qu'on a placées à gauche du site d'impureté et les tenseurs $D^{(l)}$ les paramètres des orbitales de bain qu'on a placées à droite du site d'impureté. Comme dans l'exemple du hamiltonien d'Ising, les tenseurs aux extrémités du MPO sont obtenus

en prenant la dernière rangée (au bord gauche) ou la première colonne (au bord droit) de la matrice du site concerné. L'ordre des sites est sans importance pour la construction du MPO, mais on peut se demander si le choix d'ordre à un effet sur la représentation en MPS des états propres du hamiltonien.

3.2 Groupe de renormalisation de la matrice densité

Le groupe de renormalisation de la matrice densité (*Density matrix renormalization group* ou DMRG) est une méthode pour obtenir l'état fondamental de systèmes unidimensionnels [1, 2, 25, 27]. Lorsqu'on exprime l'état sous la forme d'un MPS canonique et le hamiltonien sous la forme de MPO, la DMRG est une méthode variationnelle optimisant un MPS de sorte à minimiser l'énergie du hamiltonien.

Le problème aux valeurs propres $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ est équivalent au problème de minimisation suivant :

$$\min_{\langle\psi|,E} C_{\mathbf{H}}(\langle\psi|,|\psi\rangle,E) \equiv \min_{\langle\psi|,E} \langle\psi|\mathbf{H}|\psi\rangle + E(1 - \langle\psi|\psi\rangle) \quad (3.34)$$

où l'énergie propre E est un multiplicateur de Lagrange imposant la normalisation. La DMRG procède à la minimisation de cette fonction en optimisant un tenseur à la fois dans le MPS, et en balayant les tenseurs du MPS, un après l'autre. Lors du balayage, on déplace le centre d'orthogonalité du MPS vers le prochain site à optimiser. Toujours optimiser le centre d'orthogonalité simplifie grandement le problème de minimisation :

$$\begin{aligned} C_{\mathbf{H}}(\langle\psi|,|\psi\rangle,E) &= \begin{array}{ccccccccc} \boxed{U_0^\dagger} & \cdots & \boxed{U_{i-1}^\dagger} & \boxed{C_i^\dagger} & \boxed{V_{i+1}^\dagger} & \cdots & \boxed{V_n^\dagger} \\ \boxed{h_0} & \cdots & \boxed{h_{i-1}} & \boxed{h_i} & \boxed{h_{i+1}} & \cdots & \boxed{h_n} \\ \boxed{U_0} & \cdots & \boxed{U_{i-1}} & \boxed{C_i} & \boxed{V_{i+1}} & \cdots & \boxed{V_n} \end{array} + E \left(1 - \begin{array}{c} \boxed{C_i^\dagger} \\ \boxed{C_i} \end{array} \right) \\ &= \begin{array}{c} \boxed{R_{Gi}} \\ \boxed{C_i^\dagger} \\ \boxed{h_i} \\ \boxed{C_i} \\ \boxed{R_{Di}} \end{array} + E \left(1 - \begin{array}{c} \boxed{C_i^\dagger} \\ \boxed{C_i} \end{array} \right), \end{aligned} \quad (3.35)$$

où les h_i sont les tenseurs formant la représentation en MPO du hamiltonien et les U_i , V_i et C_i sont les tenseurs formant la représentation en MPS canonique de l'état qu'on optimise, tel que discuté à la sect. 3.1. Comme on optimise toujours le centre d'orthogonalité du MPS, la structure locale du problème est la même que sa structure globale : il s'agit d'un problème aux valeurs propres. La contraction $H_{Ri} = R_{Gi}h_iR_{Di}$ est un hamiltonien et C_i est l'état à déterminer. En principe, l'énergie propre et le tenseur local peuvent être obtenus avec n'importe quelle méthode pour résoudre le problème aux valeurs propres. Résoudre toutes les énergies et tous les vecteurs propres de cet hamiltonien local requiert un temps $\sim \mathcal{O}((\chi_{Gi}d\chi_{Di})^3)$ où χ_{Gi} et χ_{Di} sont les dimensions de lien du tenseur C_i et d est la dimension

de l'indice physique. Un seul de ces vecteurs propres est pertinent ; on accomplirait donc une quantité considérable de travail inutile en calculant tous les vecteurs propres. En pratique, on essaie de faire bon usage de l'information qu'on a déjà et d'éviter les efforts inutiles : on fait une amélioration incrémentale du tenseur C_i .

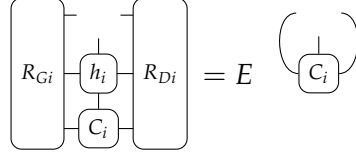


FIGURE 3.4 Problème aux valeurs propres pour la mise à jour du centre d'orthogonalité

On accomplit cette mise à jour du centre d'orthogonalité à l'aide d'une itération de l'algorithme de Lanczos avec le tenseur C_i comme état initial. La mise à jour du centre d'orthogonalité est donc la combinaison linéaire de C_i et $H_{Ri}C_i$ qui minimise l'énergie totale. Cette mise à jour prend un temps de calcul de l'ordre de $\mathcal{O}(\chi_D^2 dD\chi_G + \chi_D dD\chi_G^2)$ où D est la dimension de lien de h_i . Il existe certainement des mises à jour qui minimisent mieux l'énergie, mais elles ne méritent pas d'effort supplémentaire [38]. En effet, le résultat de la mise à jour est influencé par les tenseurs R_{Gi} et R_{Di} . Ceux-ci ont tout autant besoin d'amélioration, ce qui est accompli par le balayage des sites.

Après avoir fait la mise à jour du site i , on déplace le centre d'orthogonalité vers le prochain site et on tronque les valeurs singulières dont la somme des carrés est inférieure à une tolérance ϵ . On tronque le carré des valeurs singulières, car l'erreur sur l'énergie propre est proportionnelle à celle-ci. En effet, en tronquant sur le carré des valeurs singulières on introduit un terme d'erreur orthogonal à l'état exact :

$$|\psi\rangle = \sqrt{1 - \epsilon} |\psi_{\text{exact}}\rangle + \sqrt{\epsilon} |\psi_{\perp}\rangle. \quad (3.36)$$

L'erreur introduite dans l'énergie propre est alors d'ordre ϵ :

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \approx E_{\text{exact}} + \epsilon(2E_{\text{exact}} + \langle H \rangle_{\perp}). \quad (3.37)$$

Un ingrédient manque à la DMRG telle que décrite jusqu'ici : une façon d'augmenter les dimensions de lien dans le MPS si besoin est. En effet, avec la mise à jour naïve décrite ci-dessus, la dimension de lien du MPS peut seulement diminuer par rapport au MPS initial fourni à l'algorithme. Il existe plusieurs stratégies [39, 40] pour permettre la croissance de la dimension de liens des tenseurs, la plus simple étant de mettre à jour deux sites à la fois.

3.2.1 Effet de l'ordre des sites sur l'état MPS

On a observé précédemment que le MPO de l'impureté d'Anderson dans la géométrie en étoile n'impose pas d'ordre aux sites. Il faut donc se demander si l'ordre des sites a un effet sur les MPS des états propres. On observe à la figure 3.5 que la dimension de lien du MPS est affectée par l'ordre qu'on assigne aux orbitales de l'impureté. Les paramètres du

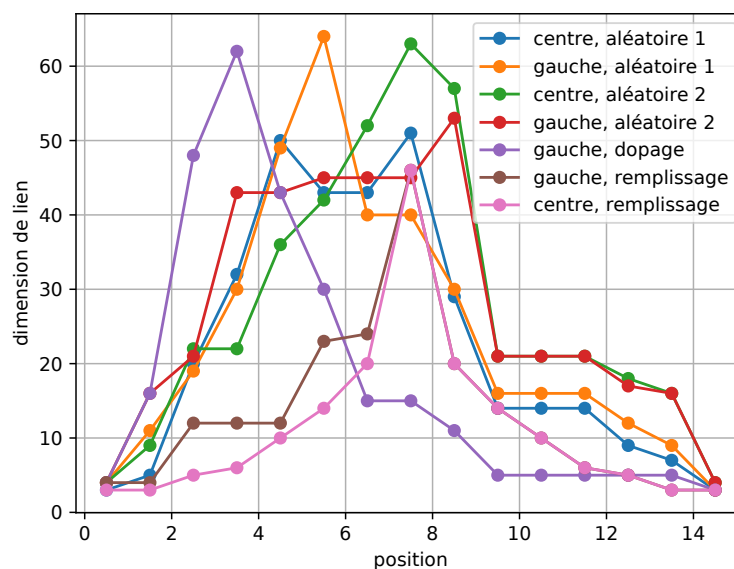


FIGURE 3.5 Dimensions de lien du MPS de l'état fondamental pour différents ordres des sites. Le site d'impureté est soit au centre du système, ou au bord gauche. Les orbitales du bain sont ordonnées aléatoirement, en ordre de dopage, ou en ordre de remplissage. "En ordre de dopage" signifie que les orbitales avec le nombre de particules le plus proche de 1 sont situées à gauche et les orbitales presque pleines ou presque vides sont à droite. "En ordre de remplissage" signifie que les orbitales sont en ordre décroissant du nombre de particules. Les états sont obtenus par DMRG avec 500 balayages du MPS et une troncation du carré des valeurs singulières inférieures à 10^{-12} .

hamiltonien sont à la table 3.1. L'ordre optimal pour les orbitales (site d'impureté inclus) semble être en ordre de remplissage : c'est cet ordre qui à la plus petite dimension de lien maximale et moyenne.

L'amplitude de l'hybridation joue certainement aussi un rôle dans la détermination de l'ordre optimal des orbitales, mais l'exemple considéré ici ne nous permet pas de déterminer leur influence indépendamment de celle des énergies de bain. Les paramètres du hamiltonien ont la structure typique des solutions DMFT qu'on obtient avec la méthode décrite au chapitre suivant : les amplitudes de l'hybridation diminuent rapidement avec l'augmentation de l'énergie de bain. On utilise donc cet ordre pour les calculs de champ moyen dynamique.

ϵ_n	-12.2296	-10.6199	-8.91215	-6.837	-4.52511	-3.14077	-1.7930
θ_n	0.0002140	0.001370	0.005014	0.02509	0.1458	0.4063	0.3551
ϵ_p	1.7930	3.1408	4.5251	6.8370	8.9121	10.6199	12.2296
θ_p	0.3551	0.4063	0.1458	0.0251	0.005114	0.001370	0.0002140
ϵ_0	0						
θ_0	0.6103						
μ	2						
U	4						

TABLE 3.1 Paramètres du hamiltonien

3.2.2 Optimisation simultanée de plusieurs états

On peut modifier la DMRG de façon à optimiser plus d'un état à la fois. Une nouvelle façon d'accomplir ceci est en instance de brevet [41]. Dans ces circonstances, il a été jugé préférable par plusieurs des auteurs du brevet que la description détaillée de cette approche soit omise de cette thèse.

À moins de contraindre le hamiltonien de façon similaire à ce qui est fait avec les solveurs d'impureté basés sur le groupe de renormalisation numérique de Wilson [42], le nombre d'états propres à l'intérieur d'une fenêtre d'énergie donnée augmente très rapidement avec le nombre d'orbitales du hamiltonien. Ces contraintes font en sorte que la résolution du poids spectral diminue très rapidement avec la fréquence, une conséquence qu'on souhaite éviter. Sans ces contraintes on ne peut pas calculer un nombre suffisant d'états propres pour avoir une approximation raisonnable de la fonction de Green avec la méthode décrite dans ce brevet.

Cette méthode est plus pratique lorsqu'un nombre restreint d'états est nécessaire à l'étude d'un système. Cette extension de la DMRG s'est avérée très utile dans l'étude numérique d'une architecture de qbit supraconducteur [43]. Dans le cadre de la DMFT, on utilise cette méthode pour détecter et traiter un état fondamental dégénéré.

3.3 Calcul de fonction de Green à l'aide de réseaux de tenseurs

Plusieurs méthodes de calcul de la fonction de Green ont été implémentées avec des méthodes de réseaux de tenseurs [5-7, 37, 44]. Celles qui ont démontré le plus de potentiel avec la DMFT sont des méthodes itératives assez similaires à l'algorithme de Lanczos décrit au chapitre 1 [5, 7] : l'évolution temporelle et les polynômes de Tchébyshev.

L'algorithme de Lanczos a été brièvement considéré dans [6] et les difficultés numériques associées y ont été jugé trop grandes. Les autres méthodes itératives souffrent du même problème, mais moins sévèrement : chaque état subséquent est plus difficile à représenter sous la forme d'un MPS que le précédent ; à précision constante, la dimension de lien croît avec le nombre d'itérations. Ceci impose une limite au nombre d'itérations qu'il est pratique de faire. Contrairement à la méthode de Lanczos, l'évolution temporelle et les polynômes de Tchébyshev construisent un modèle linéaire pour la fonction de Green en fréquences (une combinaison linéaire de sinusoides ou de polynômes de Tchébyshev, respectivement). Avec ces méthodes, il est possible de pallier le nombre limité de termes dans la représentation de la fonction de Green à l'aide d'un prédicteur linéaire [45-47]. L'usage d'un prédicteur linéaire suppose que les coefficients de la série convergent exponentiellement et les extrapole en conséquence. Cette hypothèse n'est pas universellement justifiée ; la présence de singularités dans le spectre fait en sorte que la décroissance des coefficients n'est pas si rapide.

Le nombre de coefficients qu'on est en mesure de calculer avec une précision suffisante est plus limité avec la méthode de Lanczos qu'avec les autres méthodes itératives, mais il s'agit d'un problème moins sévère qu'il semble au premier abord. Comme on l'explique au prochain chapitre, les fractions continues peuvent aussi être extrapolées et les quelques premiers coefficients sont très riches en information au sujet du comportement global de la fonction.

Expliquons d'abord une méthode pour accomplir l'algorithme de Lanczos avec des MPS et des MPO.

3.3.1 Calcul de la récurrence de Lanczos avec des MPS et MPO

Le calcul qu'on a à accomplir est le suivant :

$$|\tilde{\psi}_{i+1}\rangle = M_i|\psi_i\rangle - \beta_i|\psi_{i-1}\rangle \quad (3.38)$$

où $M_i = (H - \alpha_i \mathbb{1})$ est un MPO et les états $|\psi_i\rangle$ sont des MPS. Soustraire une matrice proportionnelle à l'identité d'un MPO n'est généralement pas difficile. Dans le cas où H est le hamiltonien de l'impureté d'Anderson en étoile, il faut soustraire $a_i \mathbb{1}_s$ au coin inférieur gauche d'un tenseur au site s . Concrètement, si l'on choisit le site d'impureté, le tenseur à ce

site devient

$$I^{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\mathbf{c}}_{0\uparrow}^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\mathbf{c}}_{0\uparrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\mathbf{c}}_{0\downarrow}^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\mathbf{c}}_{0\downarrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ U\mathbf{n}_{0\uparrow}\mathbf{n}_{0\downarrow} - \mu(\mathbf{n}_{0\uparrow} + \mathbf{n}_{0\downarrow}) - a_i\mathbb{1}_0 & \mathbf{F}_0\tilde{\mathbf{c}}_{0\uparrow} & \tilde{\mathbf{c}}_{0\uparrow}^\dagger\mathbf{F}_0 & \mathbf{F}_0\tilde{\mathbf{c}}_{0\downarrow} & \tilde{\mathbf{c}}_{0\downarrow}^\dagger\mathbf{F}_0 & \mathbb{1}_0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.39)$$

Étant donné ces deux MPS et ce MPO, l'objectif est de construire un MPS raisonnablement bien compressé pour l'état $|\tilde{\psi}_{i+1}\rangle$. On transforme donc l'équation (3.38) en un problème de minimisation qu'on va résoudre de façon similaire à celui de la DMRG : en effectuant des mises à jour du centre d'orthogonalité et en balayant le réseau de tenseurs. En minimisant

$$f(\langle\tilde{\psi}_{i+1}|, |\tilde{\psi}_{i+1}\rangle) = \langle\tilde{\psi}_{i+1}| \tilde{\psi}_{i+1}\rangle - \langle\tilde{\psi}_{i+1}| M_i | \psi_i\rangle + \beta_i \langle\tilde{\psi}_{i+1}| \psi_{i-1}\rangle \quad (3.40)$$

par rapport à $\langle\tilde{\psi}_{i+1}|$, on récupère l'équation (3.38). Au voisinage du centre d'orthogonalité j de $|\tilde{\psi}_{i+1}\rangle$ l'équation en réseau de tenseurs peut-être écrit sous la forme

$$f(\langle\tilde{\psi}_{i+1}|, |\tilde{\psi}_{i+1}\rangle) = \left(\begin{array}{c} \tilde{\psi}_{i+1,j}^\dagger \\ \tilde{\psi}_{i+1,j} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \tilde{\psi}_{i+1,j} \\ m_{ij} \\ \psi_{ij} \end{array} \right) G_{ij} D_{ij} + \beta_i \left(\begin{array}{c} \tilde{\psi}_{ij}^\dagger \\ \psi_{i-1,j} \end{array} \right) G'_{ij} D'_{ij}, \quad (3.41)$$

où les m_{ij} , ψ_{ij} et $\tilde{\psi}_{ij}$ sont les tenseurs au site j du MPO pour M_i et des MPS pour les états $|\psi_i\rangle$ et $|\tilde{\psi}_i\rangle$, respectivement. Le tenseur G_{ij} (D_{ij}) est obtenu en contractant tous les tenseurs situés à gauche (à droite) du centre d'orthogonalité dans $\langle\tilde{\psi}_{i+1}| M_i | \psi_i\rangle$. Le tenseur G'_{ij} (D'_{ij}) est obtenu en contractant tous les tenseurs situés à gauche (à droite) du centre d'orthogonalité dans $\langle\tilde{\psi}_{i+1}| \psi_{i-1}\rangle$. Les réseaux de tenseurs définissant G_{ij} et G'_{ij} sont illustrés à la figure 3.6.

La mise à jour du centre d'orthogonalité de $|\tilde{\psi}_{i+1}\rangle$ est obtenue en imposant que la dérivée de f par rapport au centre d'orthogonalité de $\langle\tilde{\psi}_{i+1}|$ soit nulle :

$$\left(\begin{array}{c} \tilde{\psi}_{i+1,j}^\dagger \\ \tilde{\psi}_{i+1,j} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \tilde{\psi}_{i+1,j} \\ m_{ij} \\ \psi_{ij} \end{array} \right) G_{ij} D_{ij} - \beta_i \left(\begin{array}{c} \tilde{\psi}_{ij}^\dagger \\ \psi_{i-1,j} \end{array} \right) G'_{ij} D'_{ij}. \quad (3.42)$$

Comme dans le cas de la DMRG, il faut adopter une stratégie pour permettre à la dimension de lien de croître et maintenir une bonne précision. Les mêmes techniques sont applicables ici.

Une fois $|\tilde{\psi}_{i+1}\rangle$ obtenu, sa norme donne β_{i+1} , et on le normalise pour obtenir $|\psi_{i+1}\rangle$. Il ne reste qu'à calculer $\alpha_{i+1} = \langle\psi_{i+1}| H | \psi_{i+1}\rangle$ et passer à l'état suivant.

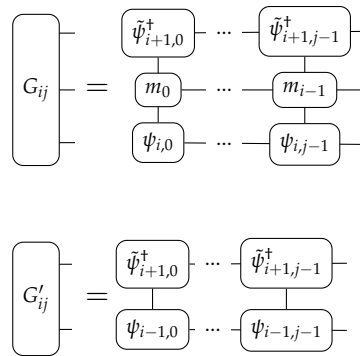


FIGURE 3.6 Définition des tenseurs G_{ij} et G'_{ij} .

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, on a exposé les principes de base des réseaux de tenseurs, notamment la contraction et la compression, et leur notation graphique.

Ensuite, on a présenté une formule pour les tenseurs de la représentation en MPO de l'impureté d'Anderson dans sa représentation avec un bain diagonal. On a montré que l'ordre qu'on assigne aux orbitales de bain affecte le niveau de compression possible dans la représentation en MPS de l'état fondamental. On a découvert qu'ordonner les sites selon leur nombre moyen de particules donne les meilleurs résultats.

On a expliqué les principes du groupe de renormalisation de la matrice de densité (DMRG) dans le cadre des réseaux de tenseurs, une méthode pour calculer les états propres d'un hamiltonien. Considérant un hamiltonien représenté sous la forme d'un MPO, la DMRG calcule son état fondamental sous la forme d'un MPS.

Finalement, on a montré comment exprimer les états obtenus par l'algorithme de Lanczos sous la forme de MPS.

Chapitre 4

Extrapolation de fractions continues

La théorie de la convergence des fractions continues nous apprend qu'il est possible de faire beaucoup plus avec les premiers coefficients du développement en fraction continue que ce qu'on fait typiquement en ED [8, 15]. C'est pour cela qu'il est possible d'appliquer la méthode de Lanczos en conjonction avec les réseaux de tenseurs malgré les difficultés notées par Wolf [6]. En effet, l'algorithme doit être effectué avec un degré de précision élevé sans quoi des composantes de haute énergie du spectre sont perdues avec chaque itération. On contourne ce problème à l'aide de la *méthode récursive* [8]. Cette méthode consiste à calculer un nombre fini et restreint de coefficients de la fraction continue et exploite la théorie de la convergence de ces objets pour extrapoler les coefficients connus vers la limite du nombre d'étages infini.

Dans ce chapitre, on discute d'abord de la convergence des fractions continues dans le contexte de fonctions de Green. Ensuite, on illustre leur convergence avec un exemple pratique et pertinent à la (C)DMFT, une impureté d'Anderson. Puis, on montre comment calculer la représentation en fraction continue d'une fonction échantillonnée numériquement. Après, on explique comment extrapoler le nombre d'étages d'une fraction continue vers l'infini. Finalement, on décrit comment mettre en application cette procédure d'extrapolation dans le contexte de la DMFT.

4.1 Convergence des fractions continues

Les fractions continues générées par l'algorithme de Lanczos sont de type *Jacobi*. Nous allons donc nous concentrer sur celles-ci malgré l'existence de plusieurs autres types de fractions continues. Une fonction respectant les relations de Kramers-Kronig (1.15) et ayant un poids spectral positif prend la forme

$$f(\omega) = \frac{\beta_0^2}{\omega - \alpha_0 - \frac{\beta_1^2}{\omega - \alpha_1 - \dots}}, \quad (4.1)$$

où les coefficients α_i et β_i sont réels. Cette même fraction continue peut être écrite à l'aide de la notation de Pringsheim,

$$f(\omega) \equiv \left| \frac{\beta_0^2}{\omega - \alpha_0} \right| - \left| \frac{\beta_1^2}{\omega - \alpha_1} \right| - \dots, \quad (4.2)$$

ou encore à l'aide d'un opérateur d'accumulation,

$$f(\omega) \equiv -\mathbf{K}_i \frac{-\beta_i^2}{\omega - \alpha_i}. \quad (4.3)$$

La fonction de Green d'un système de taille finie, même très grande, est la somme d'un nombre fini de pôles en fonction de la fréquence, alors que dans la limite thermodynamique on a plutôt une fonction continue. Il n'est pas évident qu'il est possible de converger la limite thermodynamique de la fonction de Green en calculant la solution d'un système fini, même très grand. À proximité de l'axe réel, cette convergence ne peut pas être définie «point par point».

En diagonalisation exacte, on ne considère typiquement pas la relation entre l'impureté finie et l'impureté dans sa limite thermodynamique. Conséquemment, la théorie des fractions continues n'y joue qu'un rôle mineur. La fonction de Green d'un système fini est toujours la somme d'un nombre fini de pôles, donc la représentation en fraction continue de la fonction possède un nombre fini d'étages. En pratique, on ne calcule pas tous les coefficients de la fraction continue. Quelques centaines sont généralement suffisants pour obtenir des résultats de bonne qualité pour les méthodes sur amas. En effet, l'essentiel de l'information se trouve dans les premiers étages. Une fois un nombre suffisant d'étages obtenu, chaque étage supplémentaire ne fait que modifier légèrement les positions et les amplitudes des pôles déjà présents, et ajoute de nouveaux pôles de très faibles amplitudes.

Qu'arrive-t-il à la représentation en fraction continue de la fonction de Green lorsqu'on s'approche de la limite thermodynamique ?

Dans la limite thermodynamique, la fraction continue a un nombre d'étages qui tend vers l'infini et elle doit être convergente. Le concept de convergence est considérablement

plus subtil pour les fractions continues que pour les séries de puissance. On peut consulter [15, 48] pour plus de détails à ce sujet. Nombre d'expressions connues liant des fractions continues à des fonctions de densité $f(\omega)$ nous permettent d'affirmer que la structure asymptotique des coefficients de la fraction continue est une conséquence des propriétés de $f(\omega)$, telles la présence de singularités, la présence d'un gap, sa largeur caractéristique, ainsi que l'exposant de la chute de la densité à haute fréquence. Les détails de la distribution sont encodés dans les variations des coefficients autour de la structure asymptotique.

Dans les systèmes finis, les coefficients des premiers étages de la fraction continue ont des valeurs proches de ceux du système dans sa limite thermodynamique. Au-delà de ces premiers étages, il n'y a pas de relation claire avec la solution dans la limite thermodynamique. Une formule empirique pour le nombre d'étages convergés dans les modèles couplés aux premiers voisins est $\frac{N^{1/d}-1}{2}$, où N est le nombre de sites du système et d est le nombre de dimensions [8]. Ceci nous suggère une stratégie pour s'attaquer à des réseaux infinis qui sont intraitables par une approche directe : résoudre un réseau fini juste assez grand pour que la fraction continue qu'on en extrait puisse être extrapolée. Il s'agit de l'approche proposée dans [8].

4.2 Impureté d'Anderson

L'impureté d'Anderson est le problème qu'un solveur d'impureté doit être en mesure de résoudre pour obtenir la solution (C)DMFT d'un modèle sur réseau infini. Dans cette section, on calcule les coefficients de la représentation en fraction continue de la fonction de Green pour une impureté d'Anderson située dans un métal en une dimension. Le hamiltonien de l'impureté est

$$H_{\text{imp}} = U n_{0,\uparrow} n_{0,\downarrow} - \frac{U}{2} (n_{0,\uparrow} + n_{0,\downarrow}) - t \sum_{i=-\infty, \sigma}^{\infty} \mathbf{c}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{i+1,\sigma} + \mathbf{c}_{i+1,\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{i,\sigma}. \quad (4.4)$$



FIGURE 4.1 Impureté d'Anderson en une dimension. Le carré bleu est le site d'impureté, le seul site sur lequel les électrons entrent en interaction. Les cercles bleus sont les sites sans interaction.

Le réseau correspondant à ce hamiltonien est illustré à la fig. 4.1. Il s'agit d'un modèle symétrique particule-trou. Conséquemment, le poids spectral de l'impureté a la propriété $A(\omega) = A(-\omega)$. Les coefficients α_i d'une fraction continue générant un tel poids spectral doivent tous être nuls. Avec la méthode présentée aux chapitres précédents, on doit calculer la contribution des fréquences positives indépendamment de la contribution des fréquences négatives. Pour observer explicitement cette propriété, il faut donc être en mesure d'exprimer en une seule fraction continue la somme de deux fractions continues. Un algorithme effectuant cette somme est décrit à l'annexe A.1

Pour résoudre ce système numériquement, on doit le tronquer de sorte qu'il ne comporte qu'un nombre fini d'orbitales. Pour maximiser la pertinence de chacune des orbitales du modèle, on effectue d'abord une transformation unitaire sur les orbitales du hamiltonien avant de le tronquer, de telle sorte que la chaîne soit semi-infinie, que le site d'impureté soit à l'extrémité et que tous les sauts soient uniquement aux premiers voisins (fig. 4.2). Pour ce faire, on écrit la partie à un corps du hamiltonien et on y applique l'algorithme de Lanczos avec l'état à un corps $|\psi_0\rangle_i = \delta_{i0}$. Utilisé de la sorte, l'algorithme de Lanczos transforme tous les sites à l'exception du site d'impureté. Ce dernier change seulement de position dans la chaîne. En conséquence, la fonction de Green locale à l'impureté, celle qui nous intéresse, est la seule qui n'est pas modifiée par cette transformation. Si on effectuait plutôt la transformation après avoir tronqué de façon à ce que l'impureté soit au milieu d'une chaîne finie, on constaterait que la moitié des orbitales est découplée du site interagissant, créant des difficultés inutiles pour le solutionneur. Cette procédure fait en sorte qu'aucune

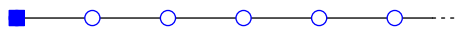


FIGURE 4.2 Réseau réorganisé en une chaîne semi-infinie avec l'algorithme de Lanczos. Le site d'impureté est amené à l'extrémité d'une chaîne semi-infinie et les sites non interagissants sont combinés linéairement de telle sorte que tous les sauts soient aux premiers voisins. Il ne reste qu'à tronquer à la taille souhaitée.

orbitale découplée ne demeure après la troncation, doublant la taille effective du système. Après troncation, la représentation en chaîne du modèle demeure simple : l'impureté, située à une extrémité de la chaîne, est couplée au premier site sans interaction avec une amplitude de saut $t_0 = \sqrt{2}$, les autres sites sont couplés à leur premier voisin avec une amplitude $t_i = 1$. Grâce à la symétrie particule-trou, aucun terme d'énergie locale $\mathbf{c}_{i\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{i\sigma}$ n'est créé. Pour caractériser nos algorithmes, on considère le cas particulier $U = 4$.

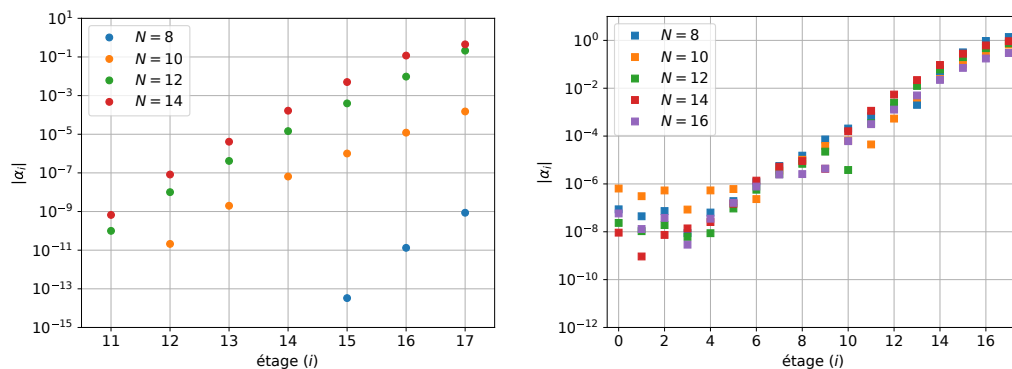


FIGURE 4.3 Coefficients α_i de la décomposition en fraction continue de la fonction de Green d'une impureté d'Anderson, pour plusieurs tailles. À gauche, les coefficients sont obtenus avec la diagonalisation exacte et à droite avec les méthodes de réseaux de tenseurs. La symétrie particule-trou entraîne que toute valeur non nulle des coefficients est une erreur provenant de la procédure numérique. Les calculs de réseaux de tenseurs sont faits avec une troncation à 5×10^{-16} , la dimension de lien est entièrement contrôlée par la troncation et toujours inférieure à 2000

À la figure 4.3, les 17 premiers coefficients α_i de la fonction de Green sont illustrés sur

une échelle logarithmique pour différentes longueurs de chaîne. Comme on peut l'observer, les coefficients α_i croissent exponentiellement et plafonnent aux environs de l'unité, plutôt que de rester négligeable comme attendu à cause de la symétrie particule-trou. Cette dérive par rapport à la valeur attendue est donc l'erreur absolue sur le coefficient α_i et comme β_i est calculé avec les mêmes quantités, il est raisonnable de supposer une erreur similaire dans ces derniers. Pour effectuer une extrapolation des coefficients, il faut que les coefficients soient plutôt fiables. Cette croissance de l'erreur avec le nombre d'itérations est donc le principal facteur qui limite le nombre de coefficients qu'il est utile de calculer avec une application directe de la récursion de Lanczos. Les calculs réalisés par diagonalisation exacte exhibent une croissance des coefficients α_i plus rapide lorsque la taille du système augmente, contrairement aux résultats calculés avec les réseaux de tenseur. Dans ces derniers, le rythme de croissance semble indépendant de la taille du système. *Dans la mesure où l'on se contente de peu de coefficients, on croit que la méthode de Lanczos sur réseaux de tenseurs peut être utilisée pour étudier des systèmes dont la taille dépasse ce qui est possible de faire avec la diagonalisation exacte.*

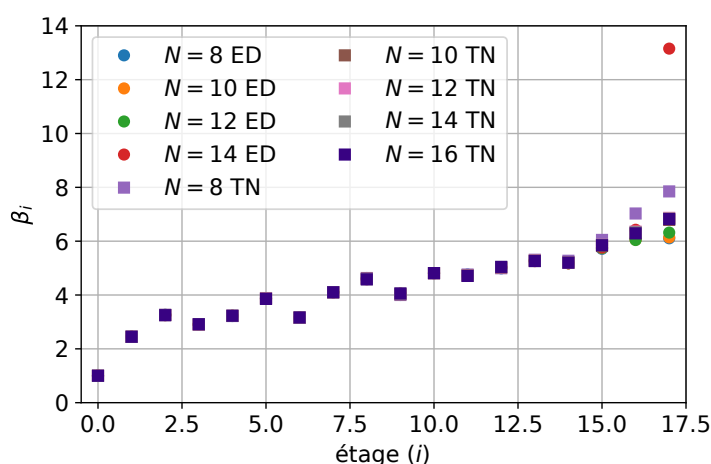


FIGURE 4.4 Les coefficients β_i de la fonction de Green en fonction de l'étage pour une impureté d'Anderson avec 8, 10, 12, 14 et 16 orbitales, obtenus par diagonalisation exacte (ED) ou par réseaux de tenseurs (TN).

À la figure 4.4, on voit les 17 premiers coefficients β_i de la fonction de Green de l'impureté d'Anderson, obtenue par ED et par TN. Aucun désaccord n'est visible entre les différentes méthodes et tailles de système avant le quinzième étage. À la figure 4.5, la différence absolue des coefficients β_i avec ceux des plus gros systèmes calculés est illustrée. On observe que la convergence semble uniforme jusqu'au quatorzième étage pour toutes les tailles. Ceci suggère que le problème d'impureté se prête mieux à la procédure d'extrapolation que les réseaux considérés dans [8], puisque qu'aucun effet de taille finie sévère ne semble se présenter avant l'explosion de l'erreur numérique. Dans l'application de la méthode de récursion à des modèles sur réseaux, les effets de taille finie se manifestent dans un comportement imprévisible des coefficients de la fraction continue après un nombre d'étages contrôlé par la taille du réseau, phénomène illustré à la figure 8-1 de [8]. On peut donc

espérer obtenir une mesure fiable d'environ 12 étages pour la DMFT. Pour la diagonalisation exacte, cette limite est due à l'usage de nombres à précision double (64bits) et à la taille de l'espace de Hilbert. Pour les réseaux de tenseurs, l'amplitude des valeurs singulières tronquées, en plus de la précision des nombres utilisé, controle cette limite.

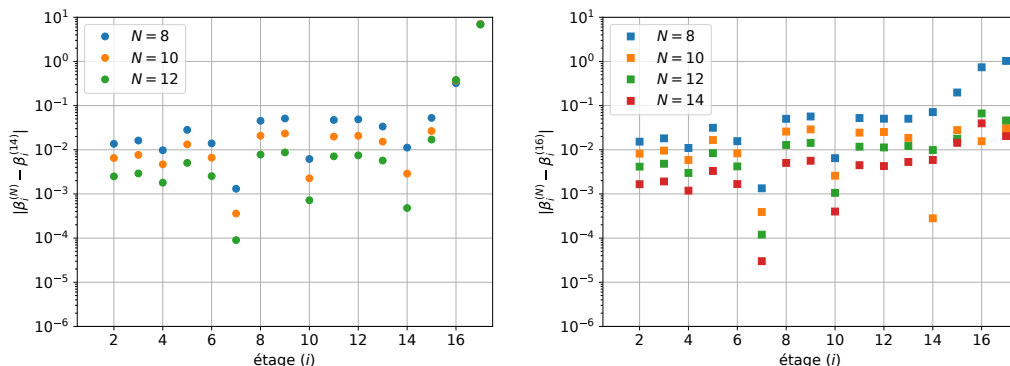


FIGURE 4.5 Convergence des coefficients β_i en fonction de la taille du système. À gauche, la différence des coefficients β_i avec ceux du système à 14 orbitales obtenus par diagonalisation exacte. À droite, la différence des coefficients β_i avec ceux du système à 16 orbitales obtenus par récursion sur réseau de tenseurs.

En ce qui concerne la CDMFT, l'évolution des coefficients α_i observée dans 4.3 donne confiance qu'il sera possible de calculer, avec une bonne précision, un nombre de coefficients similaire au cas de l'impureté d'Anderson à un seul site interagissant. La présence de plusieurs orbitales en interaction change presque certainement le rythme de convergence des coefficients en fonction de la taille du système. À priori, on s'attend à ce que la quantité à maintenir constante pour garder le nombre d'étages convergé constant soit le ratio du nombre d'orbitales de bain au nombre d'orbitales d'impureté. Si c'est le cas, obtenir suffisamment d'étages convergés pour procéder à une extrapolation est fermement hors d'atteinte des solveurs ED, mais tout à fait possible avec les méthodes de réseaux de tenseurs.

4.3 Développement numérique de fonctions en fractions continues

Le nombre de fonctions ayant un développement en fraction continue connu analytiquement est très limité. L'extrapolation d'une fraction continue compte à la fois sur notre connaissance de fonctions sous leur forme analytique et sur leur représentation en fraction continue. Pour pallier au nombre limité de formules analytiques disponibles, il faut être en mesure de calculer numériquement la fraction continue associée à un poids spectral connu.

Pour les fonctions positives qui n'ont pas de développement en fraction continue connu analytiquement, il est possible d'utiliser l'algorithme de Lanczos pour calculer les premiers

coefficients de la fraction continue numériquement. Pour ce faire, on doit écrire la fonction $f(\omega)$ sous une forme compatible avec la partie imaginaire de

$$F(z) = \langle \psi | [z - H]^{-1} | \psi \rangle. \quad (4.5)$$

On peut accomplir ceci en échantillonnant la fonction sur une grille de fréquences ω_i suffisamment serrée. Le vecteur $|\psi\rangle$ est la racine carrée des échantillons : $[|\psi\rangle]_i \propto \sqrt{f(\omega_i)}$. La matrice H est simplement une matrice diagonale ayant les fréquences de la grille comme valeurs : $[H]_{ii} = \omega_i$. Le ket $|\psi\rangle$ doit être normalisé de sorte que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\omega)}{\pi} d\omega = \langle \psi | \psi \rangle. \quad (4.6)$$

En principe, la grille de fréquence peut provenir de n'importe quel algorithme de quadrature pour lequel tous les poids sont positifs. En pratique, on trouve que la règle de Riemann (une grille de points équidistants) donne des résultats satisfaisants. La fonction $F(z)$ ainsi construite est une fonction causale dans la représentation de Lehmann. Une approximation de notre fonction originale peut être obtenue immédiatement en évaluant la partie imaginaire de $F(z)$ aux fréquences $\lim_{\eta \rightarrow 0^+} z = \omega - i\eta$. Plus la grille de fréquence est serrée, plus on peut utiliser une petite partie imaginaire pour récupérer la fonction originale directement de cet approximant. La représentation en fraction continue de la fonction $F(z)$ est obtenue en appliquant l'algorithme de Lanczos à la matrice H avec $|\psi\rangle$ comme vecteur initial.

Nous allons d'abord démontrer la qualité de cette approche numérique en calculant un grand nombre de coefficients de fonctions dont le développement en fraction continue est connu analytiquement. On trouve que cette méthode pour calculer la fraction continue donne des résultats de bonne qualité dans tous les cas testés. Ces fonctions connues analytiquement vont aussi servir à illustrer les relations entre les propriétés de la distribution et les coefficients de la fraction continue.

4.3.1 Distribution semi-elliptique

Considérons d'abord la distribution semi-elliptique :

$$f_e(\omega) = \text{Re} \left(\frac{\sqrt{r^2 - \omega^2}}{r} \right), \quad (4.7)$$

où r est la moitié de la largeur de bande de la distribution. La fonction de Green ayant ce poids spectral à la propriété récursive suivante :

$$G_e(\omega) = \frac{1}{\omega - \frac{r^2 G_e(\omega)}{4}}. \quad (4.8)$$

Une conséquence de l'éq. (4.8) est que sa représentation en fraction continue a les coefficients $\alpha_i = 0$ et $\beta_i = \frac{r}{2}$ pour tous les $i > 0$. Comme toujours, β_0 est fixé par l'aire sous la courbe. La distribution avec $r = 3$ ainsi que ses coefficients de fraction continue sont à la fig. 4.6. On y voit que les β_i ont précisément le comportement attendu.

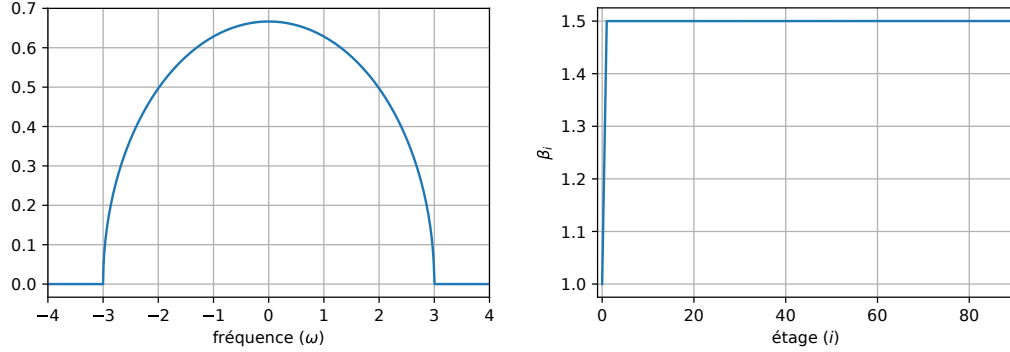


FIGURE 4.6 À gauche : la distribution semi-elliptique avec $r = 3$. À droite : les coefficients β_i obtenus en appliquant l’algorithme de Lanczos à la fonction échantillonnée sur une grille uniforme de 10000 points dans le domaine $[-5, 5]$. Seul le premier coefficient diffère de $\frac{r}{2}$, celui-ci est contrôlé par la surface de la fonction.

4.3.2 Distribution avec un gap

La seconde fonction qu’on considère est la suivante :

$$G_g(\omega) = \frac{1}{\omega - \frac{a^2}{\omega - b^2 G_g(\omega)}}. \quad (4.9)$$

La solution formelle [48] de cette équation récursive, obtenue en isolant $G_g(\omega)$, est

$$G_g^\pm(\omega) = \frac{\omega^2 + b^2 - a^2 \pm \sqrt{(\omega^2 - b^2 - a^2)^2 - 4a^2 b^2}}{2\omega b^2}, \quad (4.10)$$

où a et b sont des paramètres réels et le signe qu’on doit choisir pour la racine dépend de la fréquence de la façon suivante :

$$\text{signe} \left(1 - \left| \frac{\omega^2 - a^2 - \omega b^2 G_g^-(\omega)}{\omega^2 - a^2 - \omega b^2 G_g^+(\omega)} \right| \right). \quad (4.11)$$

Dans le cas où le ratio dans l’équation (4.11) est 1, il faut choisir la branche qui a une partie imaginaire négative. À noter que, dans la littérature mathématique [15, 48], les fractions continues sont dites «elliptiques divergentes» pour les fréquences réelles qui ont un poids spectral non nul. Ces divergences d’une fraction continue sont précisément ce qui nous intéresse : elle y possèdent deux solutions également bonnes, la fonction de Green retardée et la fonction de Green avancée.

Cette fonction possède quelques cas particuliers à considérer : si $a^2 = b^2$ elle est égale à la fonction semi-elliptique et si $a^2 < b^2$, il y a un delta de Dirac à $\omega = 0$. De façon générale, cette fonction a deux bandes séparées par un gap de largeur $2||a| - |b||$ centré à $\omega = 0$ et la largeur de bande totale est $2(|a| + |b|)$.

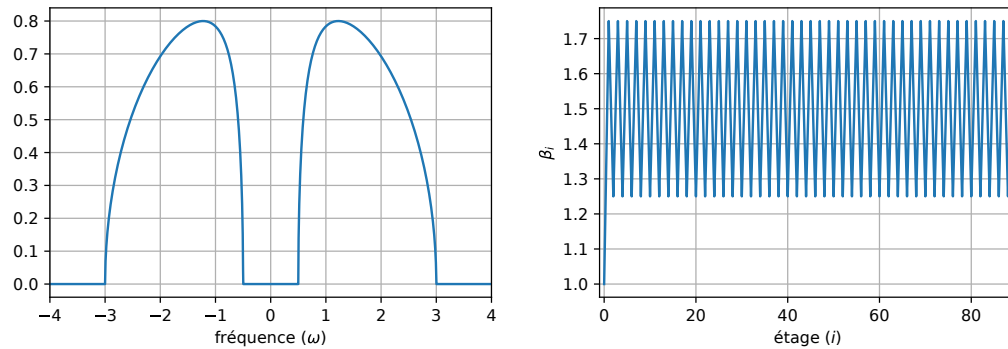


FIGURE 4.7 À gauche, une distribution à support fini ayant un gap. La fonction est égale à la partie imaginaire de l'éq. (4.10) avec $a = 1.75$ et $b = 1.25$. À droite, les coefficients β_i obtenus en appliquant l'algorithme de Lanczos à la fonction échantillonnée sur une grille uniforme de 10000 points dans le domaine $[-5, 5]$

Cette fonction nous suggère que les oscillations dans les coefficients de la fraction continue sont la conséquence de gaps et de singularités.

Le poids spectral de cette fonction de Green est illustré à la figure 4.7, encore une fois les coefficients calculés numériquement sont en accord avec le résultat attendu.

4.3.3 Distribution comportant des singularités

La prochaine fonction illustre l'importance des premiers coefficients de la fraction continue dans la densité résultante. Il s'agit de

$$f_T(\omega) = \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\sqrt{r^2 - \omega^2}} \right) \quad (4.12)$$

définie sur le domaine $[-r, r]$. La fonction de Green associée est

$$G_T(\omega) = \frac{1}{\omega - 2\left(\frac{r}{2}\right)^2 G_e(\omega)}. \quad (4.13)$$

Comme on peut le constater en inspectant l'éq. (4.12), les bords de la distribution divergent en $\omega^{-1/2}$. L'équation pour la fonction de Green générant ce poids spectral nous apprend que sa représentation en fraction continue diffère de celle de l'éq. (4.8) seulement par le coefficient β_1 . le simple changement du premier coefficient d'une fraction continue peut créer une distribution drastiquement différente.

Le poids spectral de cette fonction de Green est illustré à la figure 4.8. Encore une fois les coefficients calculés numériquement sont en accord avec le résultat attendu.

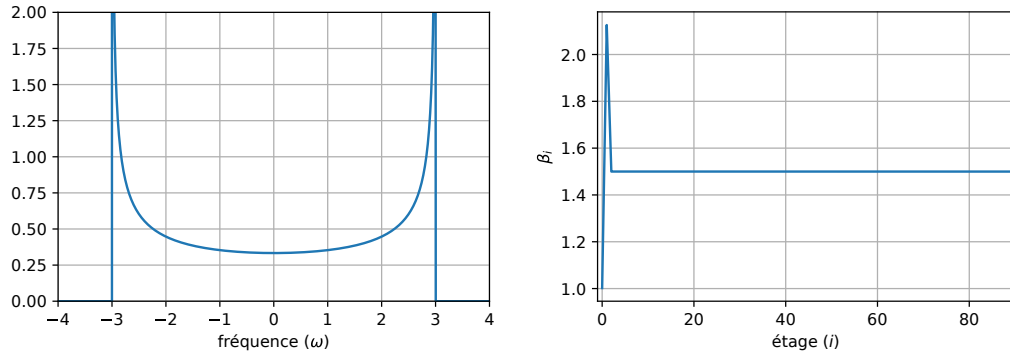


FIGURE 4.8 À gauche, une distribution avec des singularités en racine carrée aux bords . À droite, les coefficients β_i obtenus en appliquant l’algorithme de Lanczos à la fonction échantillonnée sur une grille uniforme de 10000 points dans le domaine $[-5, 5]$

4.3.4 Distribution normale

La distribution normale, aussi appelée *gaussienne* est définie comme suit :

$$f_G(\omega) = \frac{e^{-\frac{\omega^2}{\sigma^2}}}{\sqrt{\pi\sigma^2}}. \quad (4.14)$$

Contrairement aux distributions considérées précédemment, cette fonction est non nulle pour toutes les fréquences réelles. Les fonctions précédentes suggèrent que la moyenne des coefficients β_i dans leur régime asymptotique est contrôlée par la largeur du poids spectral. Comme ce poids spectral n’a pas une largeur finie, on peut supposer que les coefficients β_i croissent sans limite. La fraction continue générant ce poids spectral a les coefficients $\alpha_i = 0$ et $\beta_i = \sigma\sqrt{\frac{i}{2}}$ pour tous les i entiers supérieurs à zéro.

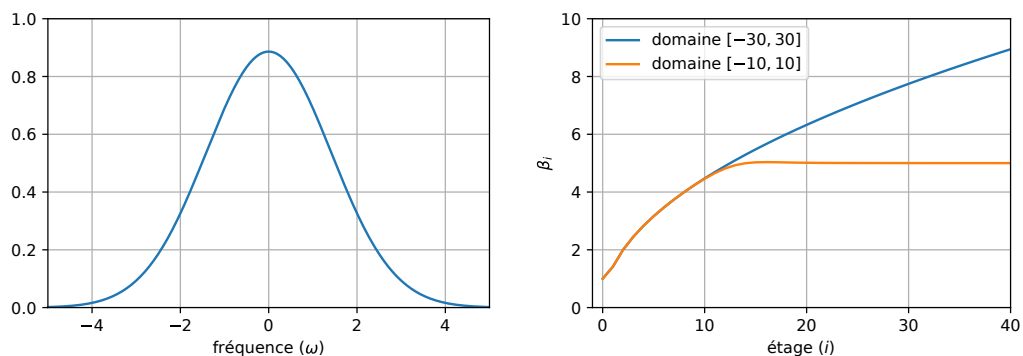


FIGURE 4.9 À gauche, une gaussienne avec une variance $\sigma^2 = 4$. À droite, les coefficients β_i obtenus en appliquant l’algorithme de Lanczos à la fonction échantillonnée sur une grille uniforme de 10000 points dans les domaines $[-10, 10]$ et $[-30, 30]$

Avec les fonctions à support infini, la fréquence maximale utilisée pour générer les

coefficients de la fraction continue peut avoir un impact important. En effet, le domaine échantillonné détermine la valeur maximale des β_i dans le régime asymptotique. Ce phénomène est illustré à la figure 4.9, où on voit qu'avec le domaine $[-10, 10]$, les coefficients β_i plafonnent à 5. C'est précisément la valeur de β_i attendue pour une distribution semi-elliptique occupant le même domaine. Un fait important : la représentation des nombres impose une taille effective à notre domaine qu'il n'est pas possible de dépasser. En effet, avec des nombres à virgule flottante à précision double, le plus petit nombre différent de zéro qui peut être représenté est de l'ordre de 10^{-300} . Lorsque la fonction est plus petite, elle est, en pratique, très exactement égale à zéro. Cette barrière peut se manifester surprenamment tôt dans les coefficients de la fraction continue.

Ce plafonnement des coefficients β_i peut s'avérer utile, puisque la séquence ainsi générée correspond à une approximation à support fini de la fonction originale : la fonction est tronquée pour se conformer au support utilisé.

4.3.5 La sécante hyperbolique

La sécante hyperbolique est une autre fonction ayant un support infini, mais celle-ci décroît plus lentement qu'une gaussienne. Son comportement à haute fréquence est $e^{-|\omega|}$. La fonction

$$f_s(\omega) = \frac{\pi}{\sigma} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi\omega}{\sigma}\right) \quad (4.15)$$

correspond à la fraction continue ayant les coefficients $\alpha_i = 0$ et $\beta_i = \frac{\sigma i}{2}$.

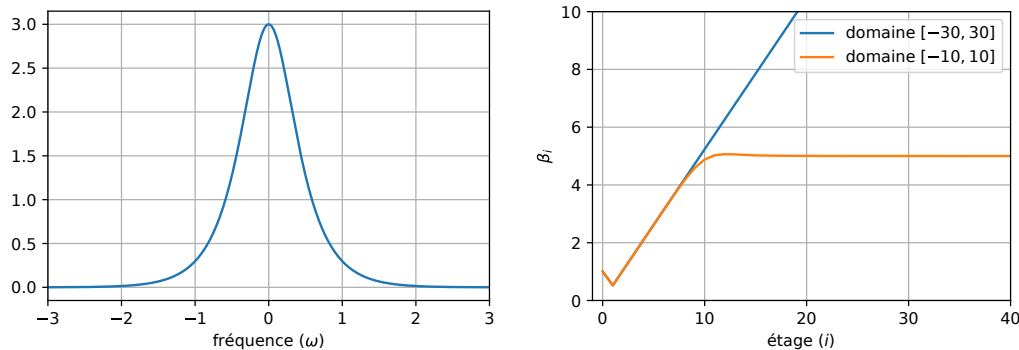


FIGURE 4.10 À gauche, une sécante hyperbolique avec une largeur caractéristique $\sigma = \frac{\pi}{3}$. À droite, les coefficients β_i obtenus en appliquant l'algorithme de Lanczos à la fonction échantillonnée sur une grille uniforme de 10000 points dans les domaines $[-10, 10]$ et $[-30, 30]$

Un exemple de la distribution avec $\sigma = \frac{\pi}{3}$ est illustré à la figure 4.10. Encore une fois, le domaine d'échantillonnage joue un rôle plus important que ce qu'une inspection visuelle de la fonction le suggère. Comme les coefficients β_i croissent plus vite que pour la gaussienne, il est encore plus important de s'assurer d'avoir un domaine suffisamment large pour obtenir le nombre désiré de coefficients.

4.3.6 La gaussienne avec un gap

Finalement, une fonction pour laquelle les coefficients de la fraction continue ne sont pas connus analytiquement est la gaussienne avec un gap :

$$f_{sG}(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } |\omega| < g \\ \exp\left(-\frac{(|\omega|-g)^2}{\sigma^2}\right) & \text{si } |\omega| \geq g \end{cases}, \quad (4.16)$$

où $2g$ est la largeur du gap.

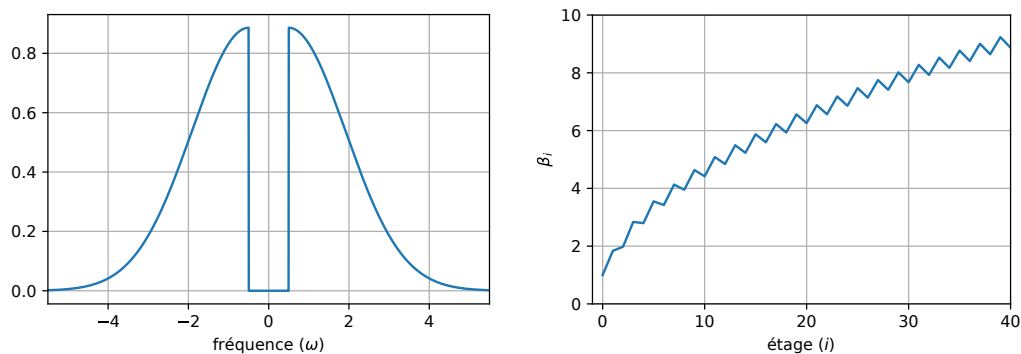


FIGURE 4.11 À gauche, la gaussienne avec une variance $\sigma^2 = 4$ et un gap $2g = 1$. À droite, les coefficients β_i obtenus en appliquant l'algorithme de Lanczos à la fonction échantillonnée sur une grille uniforme de 10000 points dans le domaine $[-30, 30]$

D'après notre expérience avec les fractions continues précédentes, on peut faire l'hypothèse suivante sur le comportement asymptotique des coefficients β_i : ils auront une croissance $\sigma\sqrt{\frac{i}{2}}$ et une oscillation d'amplitude g .

Comme on peut le voir à la figure 4.11, les coefficients β_i croissent effectivement comme une racine carrée et exhibent une oscillation. Pour vérifier quantitativement la prédiction, on calcule 350 étages de la fraction continue sur le domaine $[-200, 200]$ avec 40000 points équidistants. Comme on le voit à la figure 4.12, les deux séquences de coefficients β_i croissent au même rythme, et l'oscillation semble tendre vers une amplitude de 0.5. La différence entre les deux derniers points illustrés est 0.499472. C'est sans surprise qu'on observe que le régime initial diffère significativement de la prédiction, mais que le régime asymptotique y correspond bien.

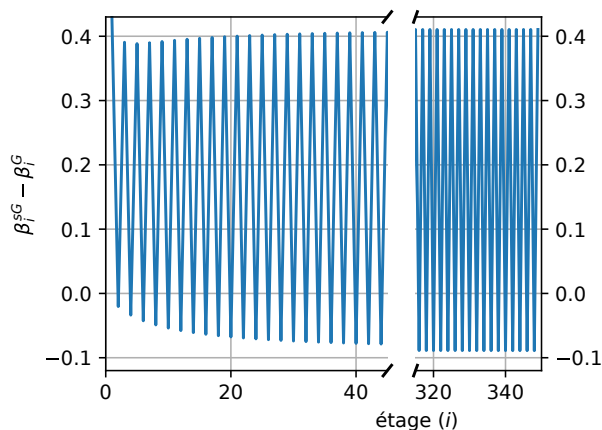


FIGURE 4.12 La différence entre les coefficients β_i de la gaussienne et ceux de la gaussienne avec un gap de largeur 1, les deux ayant la même variance. Calculé sur le domaine $[-200, 200]$ avec 40000 points équidistant.

4.3.7 Coefficients α_i – analyse d’erreur

Comme avec l’impureté d’Anderson à la section précédente, les coefficients α_i de toutes les fonctions présentées ici sont identiquement nuls avec une algèbre exacte. Toutes les déviations sont donc dues à l’erreur numérique qui se propage d’une étape à l’autre de l’algorithme. Comme démontré à la figure 4.13, l’algorithme de Lanczos est stable pour le calcul de la représentation en fraction continue de fonctions échantillonnées numériquement. *Ceci nous apprend que la source de l’erreur à chaque étape de l’itération est le produit matrice-vecteur dans l’espace de Hilbert.* Comme l’application de l’algorithme de Lanczos à des fonctions échantillonnées est faite dans un espace vectoriel de petite taille et avec une matrice diagonale, l’erreur croît substantiellement moins vite comparé à celui d’un amas quantique.

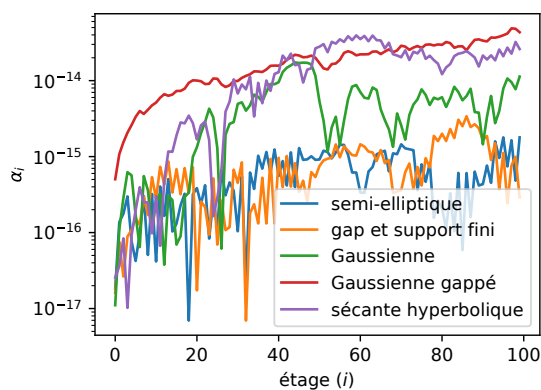


FIGURE 4.13 Les coefficients α_i des différentes fonctions présentés dans cette section sur une échelle logarithmique. Comme toutes les fonctions discutées ont un plan de symétrie miroir à $\omega = 0$, on sait que $\alpha_i = 0$ et toutes les déviations sont dues à l’erreur d’arrondi.

4.4 Extrapolation

Si on connaît les premiers étages d'une fraction continue, il est tentant de procéder à la reconstruction de la fonction complète grâce à une extrapolation des coefficients. En pratique, l'extrapolation est faite en introduisant une *fonction de terminaison* au dernier étage connu de la fraction continue. Cette fonction de terminaison est choisie de telle sorte que sa propre fraction continue extrapole la séquence de coefficients de la fonction d'intérêt.

La plupart du temps, il n'existe pas de fonction avec une fraction continue connue analytiquement ayant la bonne structure pour extrapoler la séquence calculée, surtout lorsqu'on a seulement une dizaine d'étages. On fait donc appel à des fonctions modèles qu'on construit manuellement, pour lesquelles on calcule la fraction continue numériquement avec l'algorithme de la section précédente. Une fois le modèle choisi et la fraction continue déterminée, on procède au calcul de la fonction de terminaison associée. La fonction de terminaison est alors placée au dernier étage de la fraction à extrapoler. Il en résulte alors un poids spectral correspondant à celui d'un système thermodynamique, c'est-à-dire de taille infinie. Dans cette approche, le modèle de poids spectral a seulement besoin d'être défini sur l'axe réel pour calculer le poids spectral sur l'axe réel. Si le modèle est défini sur tout le plan complexe, le résultat de l'extrapolation l'est aussi. Dans le cas contraire, la valeur de la fonction à une fréquence complexe peut être calculée avec la relation $F(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\omega)}{z-\omega} d\omega$ où ω est une fréquence réelle, z une fréquence complexe et $f(\omega)$ est un poids spectral ou une fonction de Green définie au moins sur l'axe réel.

La stratégie d'extrapolation qu'on adopte est donc la suivante :

- on calcule directement les M premiers coefficients de la fraction continue de la fonction de Green ;
- on extrait la tendance asymptotique de la fraction continue à l'aide d'un modèle de densité d'états qui est en mesure de reproduire autant de caractéristiques du régime initial que possible ;
- une fonction de terminaison reflétant les caractéristiques asymptotiques identifiées est utilisée à l'étage $M + 1$. Cette fonction de terminaison est extraite du modèle de densité utilisé.

Une fois le modèle de poids spectral choisi, il faut construire la fonction causale associée pour effectuer le calcul de la fonction de terminaison. Le modèle de poids spectral est proportionnel à la partie imaginaire du modèle de fonction causale qu'on cherche à construire, la partie réelle peut être obtenue grâce aux relations de Kramers-Krönig. Étant donné le modèle de poids spectral $\chi''(\omega)$, la partie réelle de la fonction causale est donnée par

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega}. \quad (4.17)$$

La fonction causale associée est alors

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega). \quad (4.18)$$

Comme l'intégrande est une fonction singulière, on doit recourir à un algorithme spécialisé pour obtenir une valeur fiable de $\chi'(\omega)$. En pratique, l'algorithme d'Ivanov [49] est un

bon compromis entre vitesse et précision. On peut ensuite procéder au calcul de χ_N , la fonction de terminaison à l'étage N . Le modèle de fonction causale $\chi(\omega)$ est la fonction de terminaison à l'étage 0, et étant donné la fonction de terminaison à l'étage i on peut calculer celle de l'étage suivant grâce aux coefficients a_i, b_i de la fraction continue de la fonction modèle :

$$\chi_i(\omega) = \frac{b_i^2}{\omega - a_i - \chi_{i+1}(\omega)}. \quad (4.19)$$

4.4.1 Exemple d'extrapolation

Pour donner une meilleure idée de la procédure d'extrapolation d'une fraction continue lorsqu'on a seulement accès à 12 étages, on explique en détail dans cette section comment le modèle d'extrapolation est choisi pour un exemple. La sélection du modèle d'extrapolation est un problème non trivial en soi, tout particulièrement lorsque peu d'étages de la fraction sont disponibles. Dans ce cas, les contributions asymptotiques sont mélangées avec les contributions provenant des détails de la fonction sous-jacente. Conséquemment, le modèle d'extrapolation doit tenter de reproduire ces détails, au moins partiellement, en plus du caractère asymptotique.

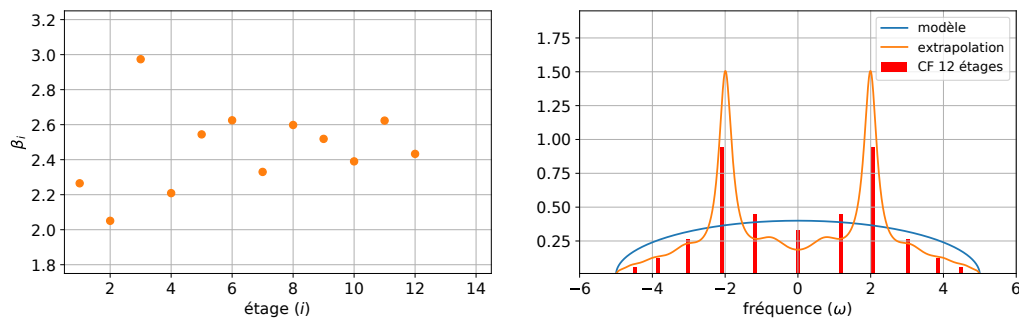


FIGURE 4.14 À gauche : les coefficients β_i d'une fraction continue tronquée; les coefficients α_i sont identiquement nuls. À droite : la distribution semi-elliptique avec une largeur de bande de 10 est utilisé comme premier modèle d'extrapolation de la fraction continue. Le résultat de cette extrapolation grossière informe les raffinements auxquels on procède. Les barres rouges sont situées à l'énergie des pôles de la fraction continue de 12 étages, la hauteur de chacune des bar est proportionnelles à la surface du pôle correspondant.

Les coefficients de la fraction continue tronquée dont on souhaite reconstruire la fonction originale sont illustrés sur le panneau gauche de la figure 4.14. Comme on peut le voir, la séquence de coefficients oscille avec une période non entière. Aucune des fonctions présentées précédemment n'est en mesure de générer une telle séquence de coefficients. On n'a donc pas grand-chose pour nous aider à choisir un modèle dans l'immédiat. La seule caractéristique qu'on peut extraire immédiatement est une largeur de bande finie d'environ 10 car les coefficients ne semblent pas croître et oscillent autour de ~ 2.5 . C'est pour cette raison qu'on commence avec le modèle d'extrapolation le plus simple auquel on

peut penser : la distribution semi-elliptique de largeur 10 :

$$M_0(\omega) = \operatorname{Re} \left(\sqrt{5^2 - \omega^2} \right). \quad (4.20)$$

La fonction résultant de cette extrapolation est illustrée dans le panneau droit de la figure 4.14. On peut observer dans la fonction résultante deux pics à $\omega = \pm 2$ et des oscillations un peu partout où la fonction est non-nulle. Comme les pics sont plutôt prononcés, il s'agit probablement d'une vraie caractéristique de la fonction, contrairement aux oscillations qui sont presque certainement un phénomène de Gibbs dû à un désaccord entre les caractéristiques singulières du modèle et la fonction à reconstruire. Dans ce cas-ci, il y a deux sources potentielles pour ce phénomène de Gibbs : les bords de la bande et les pics. On raffine donc le modèle d'extrapolation en incluant la présence de pics dans celui-ci et en donnant plus de liberté au bord de bande :

$$M_1(\omega) = \operatorname{Re} \left(A(W^2 - \omega^2)^a \left[\frac{1}{(\omega - f)^2 + l^2} + \frac{1}{(\omega + f)^2 + l^2} \right] \right). \quad (4.21)$$

Dans ce modèle, M_1 , A , W , a , f et l sont des paramètres qu'on optimise de sorte à reproduire au mieux la fraction continue. L'optimisation du modèle est réalisée en minimisant la somme des différences au carré des coefficients du modèle avec ceux de la fraction à extrapoler (on utilise pour cela la méthode du simplexe de Nelder-Mead). On démarre l'algorithme d'optimisation avec $A = 0.016$, $W = 5$, $a = 0.5$, $f = 2$ et $l = 0.1$. W et a caractérisent les bords de la bande et sont choisis de façon à être équivalent au modèle M_0 . f et l contrôlent la position et la largeur des pics, on utilise la position à laquelle les pics sont apparus avec l'extrapolation M_0 . A contrôle seulement l'aire sous la courbe ; on le choisit donc de façon à avoir $\beta_0 = 1$. L'optimisation propose les paramètres suivants : $A = 0.14$, $W = 4.95$, $a = -0.043$, $f = 1.97$, $l = 0.70$. La fonction résultant de l'extrapolation ainsi que les coefficients de fraction continue sont illustrés à la figure 4.15

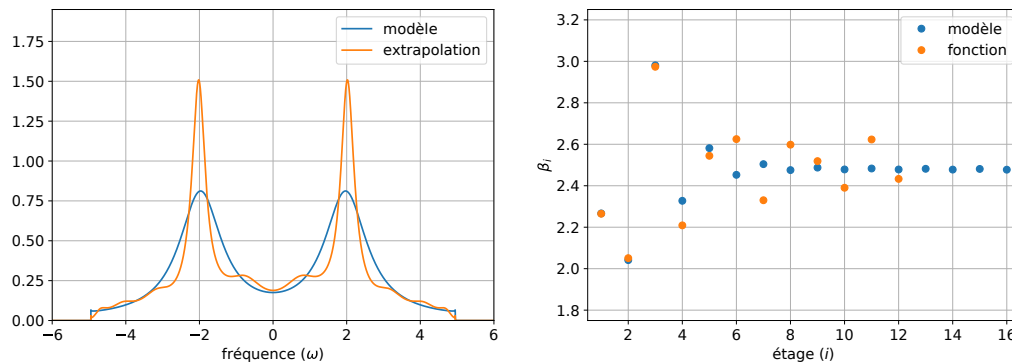


FIGURE 4.15 À gauche : extrapolation de la fraction continue avec le modèle $M_1(\omega)$. À droite : les coefficients β_i du modèle et de la fonction inconnue.

Comme on peut le voir, ce modèle explique bien les premiers coefficients, mais ne fait pas mieux que la simple distribution semi-circulaire pour les derniers. C'est le contraire

de ce qu'on souhaite accomplir avec une fonction modèle, ce sont les derniers coefficients qu'il faut reproduire fidèlement. Ce modèle n'est donc pas une amélioration par rapport à la distribution semi-elliptique.

Pour la prochaine tentative, on découple la surface des pics lorentziens de celle du support semi-elliptique :

$$M_2(\omega) = \operatorname{Re} \left(A_1 (W^2 - \omega^2)^a \left[1 + A_2 \left(\frac{1}{(w-f)^2 + l^2} + \frac{1}{(w+f)^2 + l^2} \right) \right] \right). \quad (4.22)$$

On optimise le modèle $M_2(\omega)$ avec $A_1 = 0.125$ et $A_2 = 0.565$ et les autres paramètres égaux au résultat de l'optimisation de $M_1(\omega)$. Les valeurs initiales des A_i sont choisies avec une optimisation grossière et manuelle de la fraction continue. Le résultat de l'optimisation est :

A_1	0.0256
A_2	2.796
W	4.906
a	-0.05
f	2.02
l	0.452

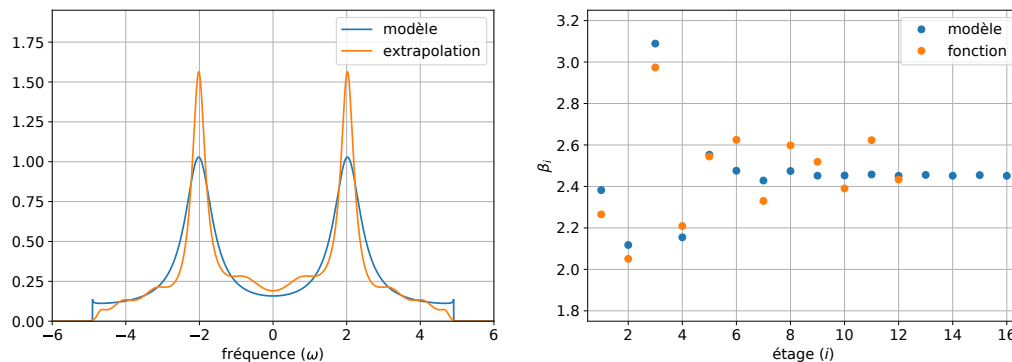


FIGURE 4.16 À gauche : extrapolation de la fraction continue avec le modèle $M_2(\omega)$. À droite : les coefficients β_i du modèle et de la fonction inconnue.

Le résultat de l'extrapolation avec ce modèle ainsi que les coefficients de fraction continue sont illustrés à la figure 4.16. On peut voir que la qualité d'extrapolation ne s'est guère améliorée. Malgré cela, la prochaine étape à suivre est maintenant un peu plus claire : la principale différence entre le modèle M_1 et le modèle M_2 , se trouve dans la largeur des pics, et on voit que l'amplitude d'oscillation des coefficients de la fraction continue décroît moins vite avec le nombre d'étages. Ceci suggère que des pics plus minces et plus hauts pourraient faire l'affaire. On va aller à l'extrême et utiliser des pics divergents :

$$M_3(\omega) = \operatorname{Re} [A(W^2 - \omega^2)^a (|\omega - f|^{-x} + |\omega + f|^{-x})] \quad (4.23)$$

avec les paramètres

	initiaux	optimisés
A	0.025	0.058
W	4.906	4.89
a	-0.05	-0.05
f	2.02	2.05
x	0.5	0.71

Le résultat, illustré à la figure 4.17, montre un accord nettement amélioré entre les fractions continues : l'oscillation est présente avec à peu près la bonne période et la bonne amplitude. On peut observer des oscillations qu'on pourrait attribuer à un phénomène de Gibbs localisé sur le bord de la bande dans la fonction extrapolée, ce qui suggère que le modèle laisse à désirer dans ces régions. Les derniers coefficients de fraction continue du modèle sont systématiquement inférieurs à ceux qu'on souhaite extrapoler, ce qui suggère que la largeur de la bande devrait être un peu plus grande.

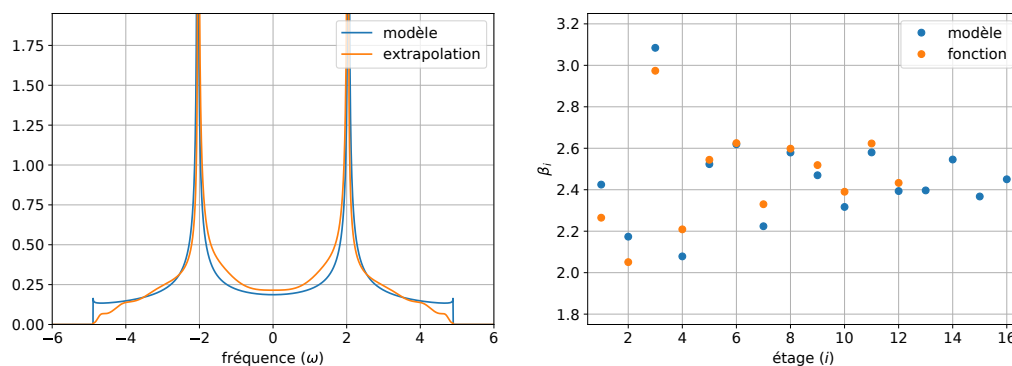


FIGURE 4.17 À gauche : extrapolation de la fraction continue avec le modèle $M_3(\omega)$ et la solution première solution trouvée. À droite : les coefficients β_i du modèle et de la fonction inconnue.

On va donc donner une poussée dans cette direction aux paramètres du modèle et procéder à une autre optimisation. Les paramètres en question sont :

	initiaux	optimisés
A	0.058	0.0158
W	5.2	4.990
a	1	0.416
f	2.05	1.987
x	0.71	0.654

L'extrapolation et les coefficients de fractions continues avec ce nouvel ensemble de paramètres optimisés sont illustrés à la figure 4.18. On n'observe aucune oscillation suspecte dans le résultat de l'extrapolation et l'accord des fractions continues est particulièrement bon pour les derniers coefficients connus ; il s'agit d'un résultat satisfaisant.

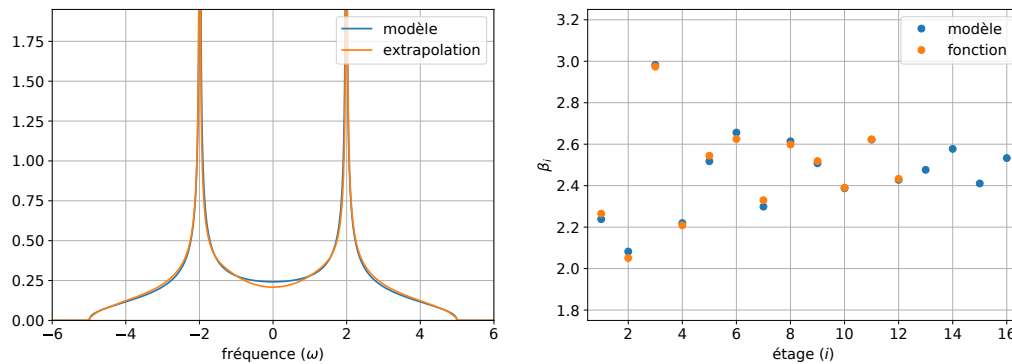


FIGURE 4.18 À gauche : extrapolation de la fraction continue avec le modèle $M_3(\omega)$ et la solution raffinés. À droite : les coefficients β_i du modèle et de la fonction inconnue.

Comme il s'agit seulement d'un exemple, la fonction générant la fraction continue qu'on a analysée est connue. Il s'agit de

$$f(\omega) = \operatorname{Re} \left(\sqrt{\frac{5^2 - \omega^2}{||\omega| - 2|}} \right). \quad (4.24)$$

Cette fonction n'est pas exactement la même que le modèle, mais elle est très similaire. On remarque que les exposants a et x n'ont pas convergé à $1/2$ comme dans la solution exacte au problème. La fonction discutée à la section 4.3.3 suggère que la valeur précise de l'exposant a est largement déterminée par les premiers étages de la fraction continue, l'identifier avec précision n'est donc pas critique à une extrapolation de bonne qualité. Il semble qu'il se produit un phénomène similaire avec l'exposant x . La figure 4.19 illustre cette fonction accompagnée du résultat de l'extrapolation ainsi que les coefficients des fractions continues jusqu'à l'étage 30. On voit que la fraction continue du modèle donne une bonne extrapolation de la fraction continue tronquée avec laquelle on l'a optimisé. L'accord n'est pas parfait, mais la structure générale est capturée par le modèle.

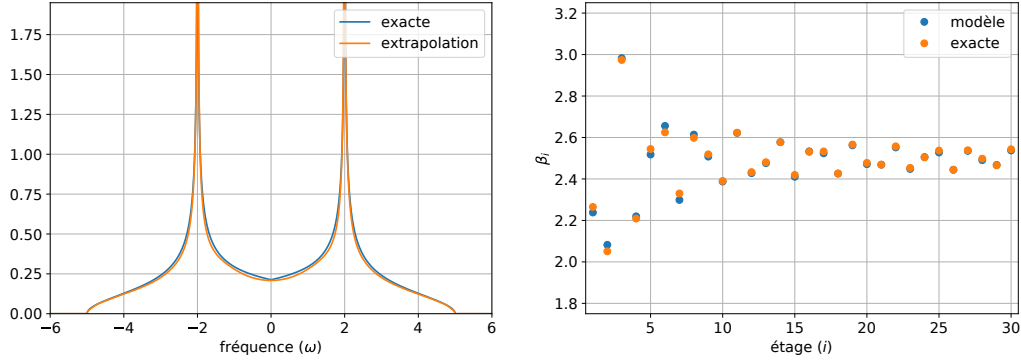


FIGURE 4.19 À gauche : extrapolation de la fraction continue avec le modèle $M_3(\omega)$ et la fonction qui a généré la fraction continue tronqué. À droite : les coefficients β_i du modèle et de la fonction.

4.5 Procédure DMFT

La procédure d'extrapolation nécessite une certaine mesure d'intervention humaine : il faut choisir un modèle de poids spectral. Ce choix est effectué en partie à l'aide des tendances observées dans les coefficients mesurés et à l'aide de propriétés physiques connues d'autres sources, telles les règles de sommes. La DMFT est une procédure itérative prenant le résultat d'un solveur d'impureté pour générer un nouveau modèle qu'on espère meilleur que le précédent. Il est possible de faire des dizaines d'itérations avant de trouver une bonne approximation d'un modèle autocohérent. Les tendances dans la séquence de coefficients peuvent changer significativement d'une itération de DMFT à l'autre et les bonnes propriétés physiques à donner au modèle de poids spectral sont inconnues avant de connaître la phase du système (métallique, isolante, supraconducteur, etc.). *Une solution est de modifier la procédure DMFT de sorte à converger les coefficients de la représentation en fraction continue de la fonction de Green. Une extrapolation ne modifie jamais la valeur de ces coefficients, il est donc possible d'en faire une très grossière sans modifier les résultats.*

La fonction de Green fournie par le solveur d'impureté est

$$G_I(\omega) = -\prod_{i=0}^M \frac{-\beta_i^2}{\omega - \alpha_i}, \quad (4.25)$$

où $\beta_0 = 1$ car $\{\mathbf{c}_i^\dagger, \mathbf{c}_j\} = \delta_{ij}$. La condition d'autocohérence (1.23) est

$$\bar{G}(\omega) = G_I(\omega), \quad (4.26)$$

où $\bar{G}(\omega)$ est la fonction de Green locale du réseau. Cette dernière est définie par l'intégrale sur les vecteur d'onde de la fonction de Green DMFT (1.22) :

$$\bar{G}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{1}{\omega - \mu - t(k) - \Sigma_I(\omega)} \quad (4.27)$$

où $\Sigma_I(\omega)$ est la self-énergie de l'impureté, $t(k)$ est la relation de dispersion du réseau, μ est le potentiel chimique et d la dimension du réseau. Le seul élément de l'impureté apparaissant explicitement dans la fonction de Green du réseau est sa self-énergie. Il s'agit donc de l'objet qu'on doit extrapoler. La self-énergie de l'impureté est définie par

$$\begin{aligned}\Sigma_I(\omega) &= \omega - \mu - G_I^{-1}(\omega) - \Gamma(\omega) \\ &= \alpha_0 - \mu - \prod_{i=1}^M \frac{-\beta_i^2}{\omega - \alpha_i} - \Gamma(\omega),\end{aligned}\tag{4.28}$$

où $\Gamma(\omega)$ est la fonction d'hybridation. À l'annexe A.2, on décrit et explique un algorithme nous permettant de représenter le résultat de la formule précédente sous la forme d'une fraction continue. *Sans un algorithme de soustraction de fractions continues, effectuer la DMFT sans extrapoler l'hybridation est impossible.* À chaque itération DMFT, on extrapole la self-énergie avec une distribution semi-elliptique ayant un rayon égal à deux fois le dernier coefficient β de la self-énergie, et centré sur la moyenne des coefficients α . Si l'on procédait plutôt à l'extrapolation de la fonction de Green de l'impureté, on serait forcé d'extrapoler la représentation en fraction continue de la fonction d'hybridation. Ce serait une occasion supplémentaire de commettre des erreurs et une extrapolation de bonne qualité serait alors critique. L'objectif de l'extrapolation de la self-énergie lors des itérations DMFT est seulement d'avoir un poids spectral continu sur l'axe réel, sans modifier les étages calculés de la fraction continue. On propose donc de mettre à jour les paramètres de l'impureté en évaluant sur l'axe réel la fonction de Green locale du réseau $\bar{G}(\omega)$ calculée avec la self-énergie extrapolée de l'impureté. En isolant l'hybridation $\Gamma(\omega)$ de (4.28) et (4.26), on obtient une nouvelle hybridation pour une impureté avec un bain infini. On construit un bain fini en calculant $N - 1$ étages de la représentation en fraction continue de l'hybridation, où $N - 1$ est le nombre d'orbitales dans le bain, en appliquant l'algorithme de Lanczos au poids spectral de la fonction d'hybridation. C'est pour réaliser cette étape de mise à jour de l'impureté que l'extrapolation de la self-énergie est nécessaire. Sans une forme quelconque d'élargissement, l'intégrale de (4.27) est numériquement impossible à calculer. Utiliser un élargissement lorentzien, en ajoutant une petite partie imaginaire à la fréquence, n'est pas une option : cela force le poids spectral à avoir une tendance en ω^{-2} à haute fréquence. Les seuls étages de cette nouvelle fonction d'hybridation affectés par l'extrapolation sont ceux situés à des niveaux plus profonds que ceux calculés explicitement dans la self-énergie. Avec cette approche, on parvient à mettre à jour le modèle d'impureté sans faire intervenir de fonction de poids, ce qui était nécessaire avec à la diagonalisation exacte.

On mesure le degré d'autocohérence par les variations des coefficients dans les M premiers étages de la représentation en fraction continue de l'hybridation, où M est le nombre d'étages calculés pour la self-énergie. On suppose ici que l'extrapolation n'a qu'un impact minimal sur l'autocohérence des M premiers étages. On peut montrer, grâce aux relations entre la représentation en fraction continue et la décomposition en moments (section 4-3 de [8]), que l'extrapolation n'a aucun effet sur la mise à jour des paramètres des M premières orbitales de bain. Le seul effet que cette extrapolation peut avoir est via son effet sur l'état fondamental de l'impureté si $N - 1 > M$.

Avec cette procédure, on demande à ce que la fonction de Green locale du réseau, lorsque

représentée sous la forme d'une fraction continue de $M + 1$ étages, soit égale à la fonction de Green de l'amas. Cette dernière est elle aussi une fraction continue de $M + 1$ étages.

Une fois la DMFT convergée, on peut procéder à une extrapolation plus rigoureuse de la self-énergie.

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, on a discuté des fractions continues de Jacobi et de leur relation avec des distributions de probabilité. On a montré que l'erreur commise dans l'algorithme de Lanczos implémenté avec des réseaux de tenseurs est différente des implémentations basées sur une algèbre linéaire classique : le rythme de croissance de l'erreur ne dépend pas de la taille du système.

On a aussi conçu un algorithme basé sur la méthode de Lanczos pour calculé numériquement la représentation en fraction continue d'une distribution échantillonnée en fréquence. On a utilisé cet algorithme pour montrer comment extrapoler une fraction continue à l'aide d'un exemple.

Finalement, on a expliqué comment adapter la DMFT à cette méthode de solution. L'idée centrale est d'isoler la self-énergie de l'amas en la représentant sous la forme d'une fraction continue avec un nombre fini d'étages et de ne considérer que les variations de ses coefficients dans l'équation d'auto-cohérence. Comme l'objet central de la (C)DMFT est la self-énergie, c'est celle-ci qu'on doit isoler et extrapoler.

Chapitre 5

Application au réseau de Bethe

Pour tester la procédure décrite à la fin du chapitre précédent, on choisit d'utiliser le réseau de Bethe avec un nombre de coordination $z \rightarrow \infty$. Le réseau de Bethe n'est pas un réseau de Bravais, mais un graphe connecté sans cycle (deux exemples sont illustrés à la figure 5.1). On choisit ce réseau parce que (i) la densité d'état sans interaction a une largeur de bande finie $W = 4t$ si l'amplitude de saut est $t^* = \frac{t}{\sqrt{z}}$ et (ii) le nombre de coordination infini fait en sorte que l'équation d'autocohérence de la DMFT n'est pas une approximation : la self-énergie est complètement locale dans cette limite [50-52]. On peut donc comparer nos résultats à ceux de la littérature en sachant que toutes les déviations proviennent du solveur d'impureté lui-même et non de l'effet d'une dimension spatiale finie. La densité d'états locale dans la limite sans interaction est

$$D_0(\omega) = \frac{\text{Re} \left(\sqrt{4t^2 - \omega^2} \right)}{2\pi}, \quad (5.1)$$

la fonction de Green associée est

$$\bar{G}_0(\omega) = \frac{\omega - \omega \sqrt{1 - \frac{4t^2}{\omega^2}}}{2t^2} \quad (5.2)$$

et le poids spectral local est

$$\bar{A}_0(\omega) = 2\pi D_0(\omega). \quad (5.3)$$

Comme le nombre de coordination est infini, l'équation d'autocohérence doit être transformée de manière à évacuer la présence des vecteurs d'ondes. On accomplit ceci en calculant analytiquement l'intégrale sur les vecteurs d'ondes $\bar{\mathbf{G}}$ définie par l'éq. (4.27). La fonction de Green du réseau est définie par l'équation de Dyson :

$$G(\omega, k) = [\omega - H_0(k) - \Sigma(\omega)]^{-1} = G_0(\omega - \Sigma(\omega), k), \quad (5.4)$$

où $G_0(\omega, k) = [\omega - H_0(k)]^{-1}$. Dans le cas où la self-énergie est scalaire, on peut interpréter l'équation de Dyson comme une transformation sur les fréquences qui fait le lien entre la

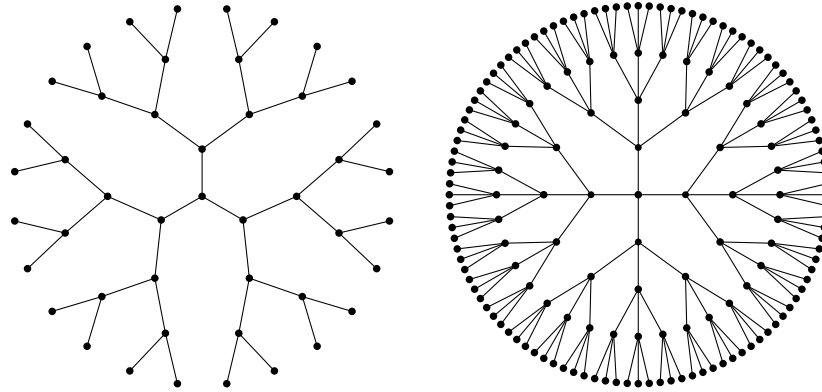


FIGURE 5.1 Deux exemples de réseaux de Bethe dont tous les sites sont placés dans un plan, avec un nombre de coordination fini. À gauche, les 46 sites les plus proches de l'origine avec $z = 3$. À droite, les 171 sites les plus proches de l'origine avec $z = 4$. Les sites sont représentés par les points noirs, le nombre de coordination est le nombre de premiers voisins de chacun des sites. Les sites du réseau de Bethe sont équidistants dans un espace hyperbolique, il ne s'agit pas d'un réseau possible dans un espace euclidien.

fonction de Green sans interaction et la fonction de Green avec interaction. On a donc

$$\begin{aligned}\bar{G}(\omega) &= \int_{\text{z.B.}} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G_0(\omega - \Sigma(\omega), k) \\ &= \bar{G}_0(\omega - \Sigma(\omega)).\end{aligned}\quad (5.5)$$

Cette identité n'est utile que si la fonction de Green locale du réseau sans interaction est connue sous la forme d'une fonction analytique sur le plan complexe, comme c'est le cas de l'éq. (5.2). Si ce n'est pas le cas on peut utiliser la relation entre $\bar{G}_0(\omega)$ et le poids spectral projeté :

$$\begin{aligned}\bar{G}_0(\omega, k) &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \frac{\bar{A}_0(\omega', k)}{\omega - \omega'} \\ \implies \bar{G}(\omega, k) &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \frac{\bar{A}_0(\omega', k)}{\omega - \Sigma(\omega) - \omega'}.\end{aligned}\quad (5.6)$$

La dernière ligne de l'éq. (5.6) peut être intégrée numériquement sur l'axe réel si $\bar{A}_0(\omega)$ est connu.

Dans ce chapitre, on analyse les résultats de simulations DMFT du modèle de Hubbard sur le réseau de Bethe au demi-remplissage et à plusieurs valeurs du couplage U . L'échelle d'énergie est définie par $t \equiv 1$. Comme notre objectif est de caractériser la méthode, on ne résout que des cas au demi-remplissage : la symétrie attendue des poids spectraux signifie que les valeurs numériques des coefficients α_i des fractions continues sont des mesures de l'erreur de la méthode. On ignore s'il existe une façon aussi simple d'évaluer l'erreur de la méthode sans la symétrie particule-trou. On tente d'abord de déterminer dans quelle mesure le choix du nombre d'étages de la représentation en fraction continue de la self-énergie et

du nombre de sites de bain dans l'impureté affecte la solution DMFT. Ensuite on observe les poids spectraux résultant des simulations, et l'effet de l'extrapolation sur ceux-ci. Finalement, on calcule l'occupation, la double occupation et le poids de quasi-particules.

5.1 Effet du nombre d'étages et d'orbitales sur la solution DMFT

Commençons par le comportement de l'erreur en fonction des paramètres de l'algorithme et de l'interaction. On peut observer les coefficients α_i des fractions continues convergées par DMFT à la figure 5.2. Comme dans le cas de l'impureté dans un milieu métallique étudié au chap. 4, l'erreur augmente rapidement avec le nombre d'étages calculés, mais il ne s'agit pas d'une exponentielle. Il s'agit d'une différence qui rend réaliste de calculer plus d'étages de fraction continue sur des impuretés plus grandes. On remarque que l'erreur à l'étage 0 de la self-énergie varie d'une série à l'autre. Cette valeur de l'erreur provient de la différence d'occupation entre les électrons de spin down et ceux de spin up sur le site d'impureté. On observe que cette contribution à l'erreur ne semble pas être amplifiée par la procédure de Lanczos. En effet, dans les cas avec un état fondamental moins précis, l'erreur est initialement légèrement décroissante, et suit le même comportement que les courbes ayant un état fondamental plus précis une fois qu'elles ont croisé ces courbes aux fondamentaux plus précis. On observe aussi que l'amplitude du couplage de Hubbard ne semble pas avoir d'effet sur la précision des résultats. Ceci nous encourage à penser que varier le potentiel chimique n'affectera pas la qualité des résultats non plus. Cela reste à confirmer dans des études futures.

La courbe $U6 M16N16$ est calculée avec une précision supérieure aux autres, et montre qu'en effectuant les efforts nécessaires, la méthode de Lanczos sur des MPS est en mesure d'évaluer plus de 13 étages d'une fraction continue. Comme les implémentations des algorithmes à notre disposition avaient un parallélisme très limité au moment d'effectuer les calculs, effectuer plusieurs calculs avec ce niveau de précision n'était pas réaliste. Il s'agit donc de la seule fraction continue calculée avec autant de précision. Ce calcul de DMFT à pris plus d'une journée à lui seul, et la procédure de DMFT n'a pas convergé avec un niveau de précision aussi élevé que les autres.

À la figures 5.3, on peut voir comment les solutions DMFT sont affectées par le choix de nombre d'étages calculés et par la taille du bain. Dans ces figures, on peut ignorer les coefficients β_0 de la self-énergie : ceux-ci ne dépendent que de l'interaction et du nombre de particules sur le site d'impureté. On sait intuitivement qu'augmenter le nombre d'orbitales de bain et que calculer le plus d'étages possible dans les fractions continues améliore la qualité de nos résultats. Les deux figures nous montrent que la convergence en fonction du nombre d'orbitales est exponentielle. La tendance en fonction du nombre d'étages calculés est un peu moins claire ; à $U = 8$ elle semble exponentielle, alors qu'à $U = 4$ la convergence stagne à onze et douze étages. Dans les deux cas, le coefficient du dernier étage calculé ne semble pas converger à une précision supérieure à $\approx 5^{-2}$, ceci peut-être dû à l'accumulation d'erreur dans l'algorithme. Ces figures suggèrent une convergence de l'ordre de 10^{-2} à

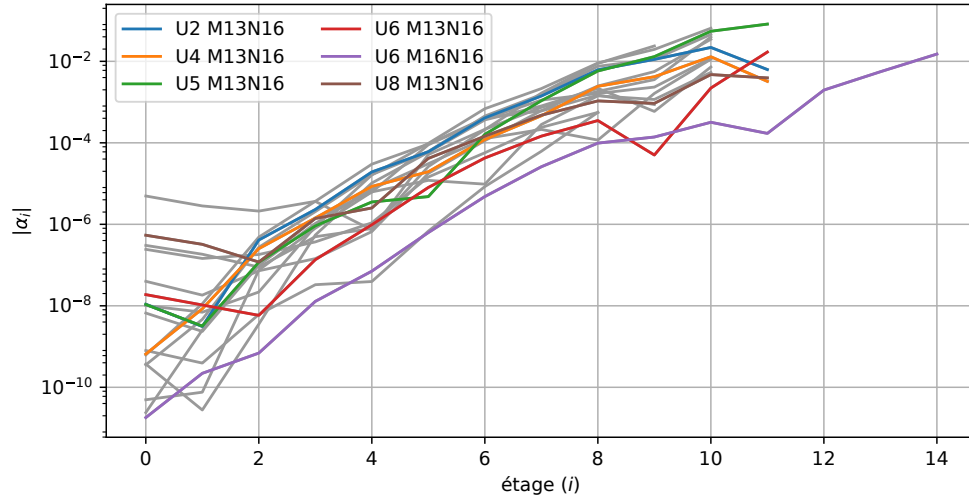


FIGURE 5.2 Coefficient α_i de la self-énergie pour l'ensemble des solutions présentées. M est le nombre d'étages calculés avec l'algorithme de Lanczos, N le nombre total d'orbitales électroniques du hamiltonien de l'impureté et U l'amplitude du terme de Hubbard. Les courbes grises ont été obtenues avec des valeurs de $M \in [10, 11, 12]$ et $N \in [12, 14, 16]$. Il y a 18 courbes au total. Tous les calculs exceptés $U6 M16N16$ ont été faits avec une troncation de 5×10^{-16} sur le carré des valeurs singulières des MPS lors des itérations de Lanczos. L'état fondamental est obtenu par DMRG avec une troncation du MPS à 1×10^{-18} . La série $U6 M16N16$ est calculée avec une troncation de l'ordre de 1×10^{-21} pour l'algorithme de Lanczos et 1×10^{-22} pour la DMRG.

$U = 4$ et de l'ordre de 10^{-3} à $U = 8$, par rapport à la limite infinie en nombre d'étages et orbitales de bain.

À la figure 5.4, on voit l'évolution de la dimension de lien maximale des états de l'algorithme de Lanczos en fonction du nombre d'itérations. La croissance est rapide : elle est comparable à $\exp(i^{5/9})$. Une croissance exponentielle comme celle-ci est trop rapide pour calculer un nombre d'étages très grand pour la fonction de Green. Les MPS tels qu'utilisés ici ne sont pas la voie à suivre pour calculer un grand nombre d'étages dans la représentation en fraction continue de la fonction de Green. Bien qu'il soit certainement possible de calculer plus d'étages que ce qui est fait ici, *cette croissance impose une limite sur ce qui est faisable en pratique avec les MPS.*

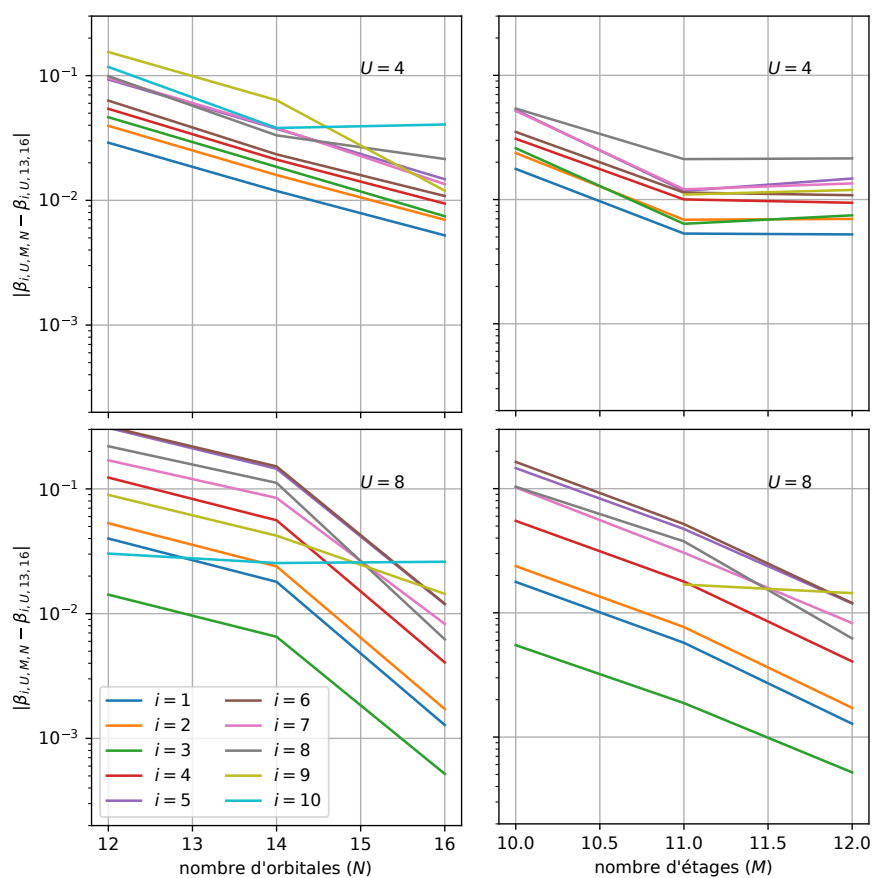


FIGURE 5.3 Variation des coefficients β_i en fonction du nombre d'étages ou d'orbitales, calculé à plusieurs étages i . À la rangée du haut, $U = 4$. À la rangée du bas $U = 8$. Dans la colonne de gauche, les variations sont en fonction du nombre d'orbitales N et avec $M = 12$ étages calculés. Dans la colonne de droite, les variations sont en fonction du nombre d'étages calculés M et avec $N = 16$ orbitales.

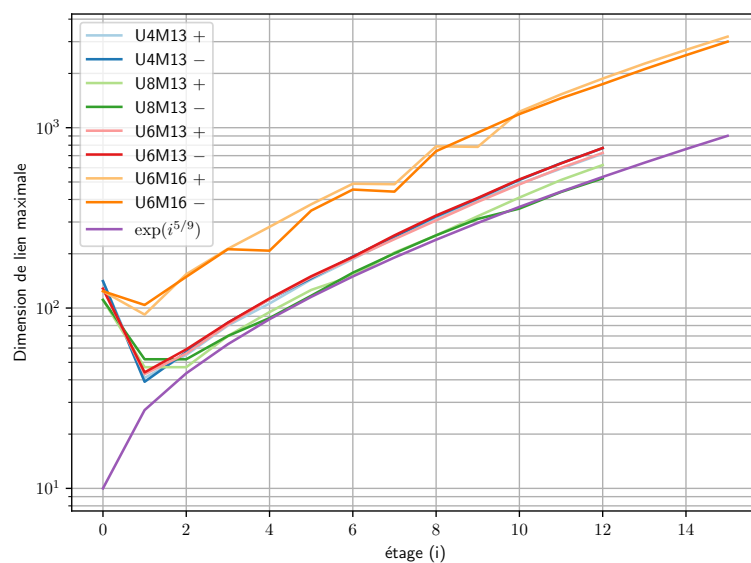


FIGURE 5.4 Dimension de lien maximale de la représentation MPS des états en fonction du nombre d'itérations de la méthode de Lanczos. Les séries de données sont identifiées par la valeur de l'interaction, le nombre d'étages utilisés lors de la DMFT et le signe des fréquences calculées. Par exemple $U4M13+$ est la dimension de lien maximale des MPS servant au calcul des fréquences positives de la fonction de Green à $U = 4$ et $M = 13$ étages.

5.2 Poids spectraux

On présente dans cette section les poids spectraux projetés du réseau de Bethe, obtenus par DMFT avec la méthode récursive comme solutionneur d'impureté. Les coefficients de la fraction continue sont convergés à 10^{-5} pour 15 orbitales de bain, la dimension de lien des MPS est contrôlée par une troncation du carré des valeurs singulières à 5×10^{-16} . Dans ces conditions, la simulation DMFT prend un peu moins de trois heures sur un macbook pro 2013 pour chaque valeur de U simulé. Ce portable est équipé d'un processeur Intel i5 ayant une horloge de 2.6GHz et de 8Gb de mémoire vive. À cause de la capacité limitée de notre implémentation à tirer avantage d'un grand nombre de processeurs, l'algorithme n'est pas en mesure de profiter pleinement d'un super-ordinateur. De plus, l'usage de cet ordinateur personnel illustre bien les avantages de la méthode par rapport à l'ED : ce calcul aurait été impossible en ED avec aussi peu de mémoire vive. Treize étages de la représentation en fraction continue de la fonction de Green sont calculés avec la récurrence de Lanczos sur des MPS pour une impureté d'un site avec quinze orbitales de bain. Des modèles de poids spectraux extrapolent les étages manquants.

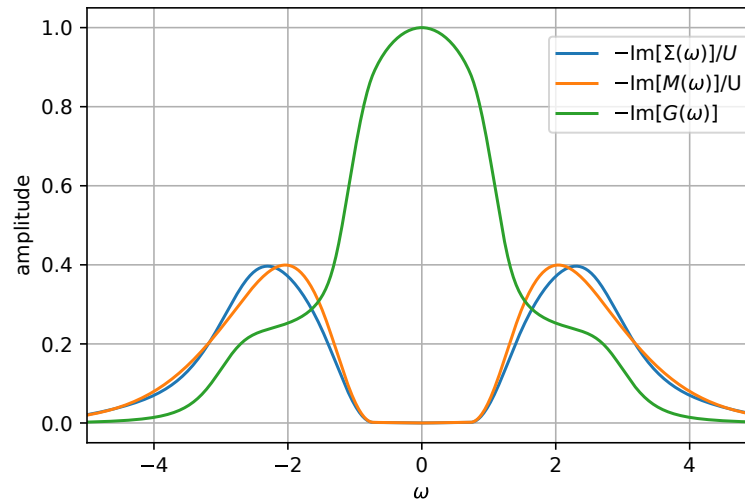


FIGURE 5.5 La partie imaginaire de la self-énergie Σ , du modèle d'extrapolation M_{mi} et de la fonction de Green G à $U = 2$ et avec 15 orbitales de bain.

Aux figures 5.5, 5.6 et 5.7 on peut observer le modèle de poids spectral pour la self-énergie, la self-énergie extrapolée et la fonction de Green projeté du réseau de Bethe dans la phase métallique. Pour les trois valeurs d'interaction U , les modèles ont la même forme fonctionnelle ; seuls les paramètres diffèrent. Les modèles pour les parties imaginaires des

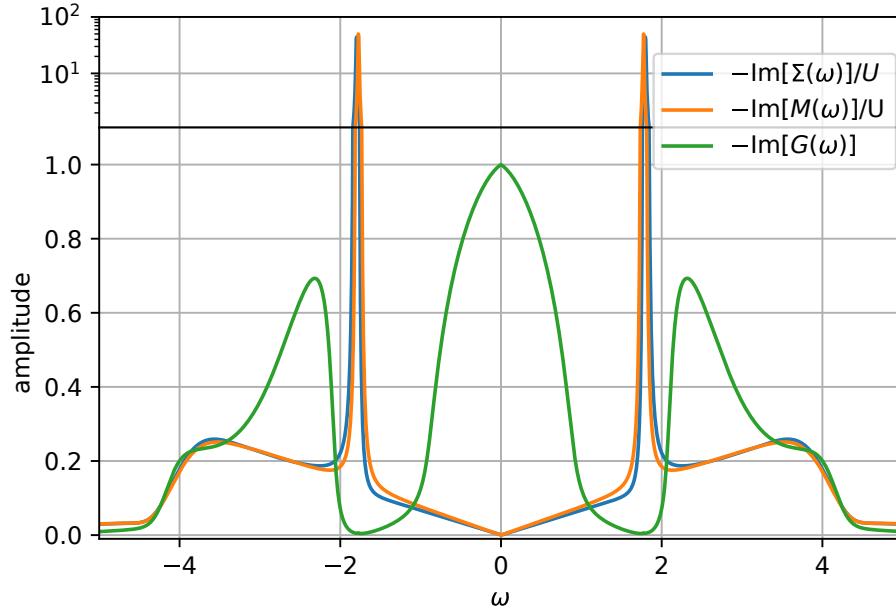


FIGURE 5.6 La partie imaginaire de la self-énergie Σ , du modèle d'extrapolation M_{mi} et de la fonction de Green G à $U = 4$. Le trait horizontal noir situé à 1.1 marque le passage d'une échelle linéaire à une échelle logarithmique.

self-énergies prennent la forme

$$M_{\text{fm}}(\omega) = |\omega| \left(\frac{D_1}{(\omega - D_2)^2 + D_3^2} + \frac{D_1}{(\omega + D_2)^2 + D_3^2} + D_{10} \right) \exp \left(\left| \frac{\omega}{D_4} \right|^{D_5} \right) + D_6 (|\omega| - D_7)^2 \theta(|\omega| - D_7) \text{sech} \left(\left| \frac{|\omega| - D_7}{D_8} \right|^{D_9} \right), \quad (5.7)$$

où les D_i sont les paramètres optimisés de sorte à reproduire les coefficients connus de la self-énergie. Ce modèle intègre la conséquence principale des règles de sommes de Luttinger (applicable au réseau de Bethe) et de Friedel (applicable au problème d'impureté) : la self-énergie doit être nulle à fréquence nulle dans la phase métallique [50, 53]. Les résultats des extrapolations respectent donc aussi ces règles de sommes : la partie imaginaire de la fonction de Green projetée est exactement 1 à fréquence nulle. Les valeurs utilisées apparaissent dans le tableau 5.1. Tel qu'attendu, la densité d'états a un pic de quasi-particule bien défini à $\omega = 0$ et des bandes de Hubbard se forment de part et d'autre du pic avec l'augmentation de l'interaction. On a construit la fonction servant à l'extrapolation de cette fonction seulement en analysant les coefficients de la fraction continue obtenue pour $U = 4$. On peut voir au panneau gauche de la fig. 5.10 qu'elle donne une extrapolation tout à fait raisonnable de la séquence connue, mais plus d'étages seraient utiles pour raffiner les détails du spectre, en particulier la largeur du pic de quasi-particules.

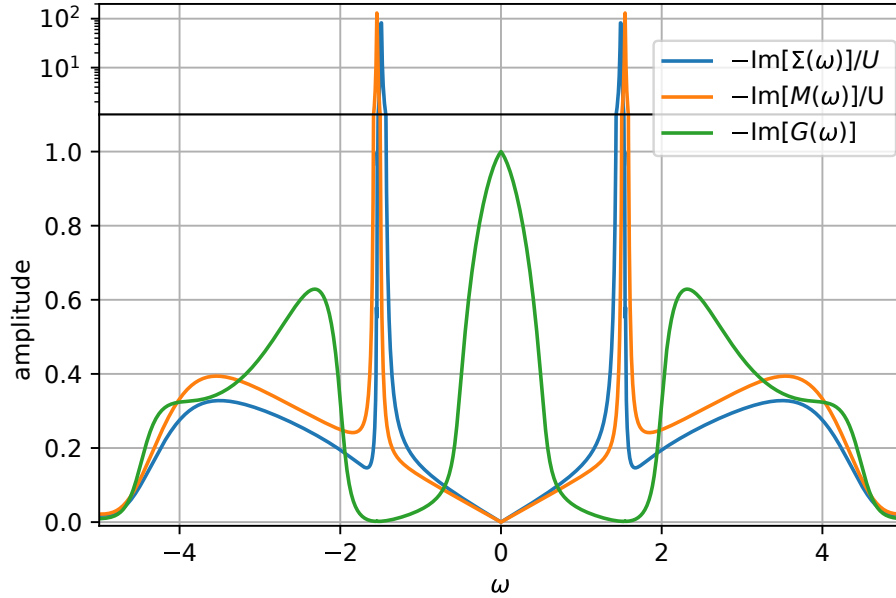


FIGURE 5.7 La partie imaginaire de la self-énergie Σ , du modèle d'extrapolation M_{mi} et de la fonction de Green G à $U = 5$. Le trait horizontal noir situé à 1.1 marque le passage d'une échelle linéaire à une échelle logarithmique.

À la figure 5.8, on voit le résultat DMFT à $U = 8$, fermement dans l'isolant de Mott. On y voit deux bandes piquées à $\pm \frac{U}{2}$. Dans ce cas-ci, le modèle d'extrapolation correspond à $\frac{1}{\omega - \Sigma(\omega)}$ plutôt qu'à la self-énergie elle-même. On fait cette transformation pour éviter d'avoir à manipuler numériquement une singularité à $\omega = 0$. La fonction modèle est

$$M_{\text{fi}}(\omega) = \left[D_1 \exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_2}\right|^{D_3}\right) + D_7 |\omega| \exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_8}\right|^{D_9}\right) \right] \Theta(|\omega| - D_5 + D_6) + D_4 D_{10}^2 |\omega| \left[\frac{\text{Re}\left(\sqrt{D_6^2 - (\omega - D_5)^2}\right)}{(\omega - D_{11})^2 - D_{10}^2} + \frac{\text{Re}\left(\sqrt{D_6^2 - (\omega + D_5)^2}\right)}{(\omega + D_{11})^2 - D_{10}^2} \right] \quad (5.8)$$

et les paramètres sont

$$\mathbf{D} = [3.553 \times 10^{-5}, 13.029, 7.8686, 0.023335, 3.1814, 2.7051, 3.5966 \times 10^{-8}, 9.7406, 2.6925, 1.1356, 3.8810]. \quad (5.9)$$

Malheureusement, dans ce cas-ci, treize étages calculés explicitement semblent ne pas être suffisants pour bien caractériser le spectre : on voit au panneau gauche de la figure 5.9 que les coefficients de fraction continue prédits par la fonction modèle ont un comportement plutôt différent des coefficients calculés. Il faut donc considérer ce résultat avec prudence : le vrai poids spectral est peut-être en réalité très différent, particulièrement la largeur du

U	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5
2	2.4572×10^{-4}	2.8507	0.27822	2.6640	15.887
4	0.0011237	3.5457	0.0051880	4.8514	16.923
5	0.0012461	3.0876	0.0033126	4.3254	12.757
U	D_6	D_7	D_8	D_9	D_{10}
2	0.44974	0.72610	0.79913	1.1751	9.2859×10^{-4}
4	0.056187	3.1377	0.89645	1.1407	0.095807
5	0.038900	3.9462	0.97940	1.1412	0.15281

TABLE 5.1 Valeurs des paramètres optimisés pour la fonction modélisant les fractions continues dans l'état métallique.

gap et la forme de la chute à haute fréquence. Dans ce cas-ci, plus d'étages dans la fraction continue sont nécessaires pour construire un modèle d'extrapolation de bonne qualité.

Les fonctions modèles présentées précédemment ont été construites en analysant les fractions continues à $U = 4$ pour la phase métallique et à $U = 8$ pour l'isolant. Dans le processus de conception des fonctions modélisant les fractions continues, quelques autres fonctions légèrement moins bonnes ont été découvertes avant celle utilisée aux figures 5.5-5.8. Les coefficients β_i de ces différents modèles, incluant le modèle final, ainsi que les poids spectraux projetés résultants sont illustrés aux figures 5.10 et 5.9, pour $U = 4$ et $U = 8$, respectivement. Les paramètres des modèles sont obtenus en minimisant le carré de l'erreur de prédiction du modèle. Pour toutes les courbes présentées, la moyenne de l'erreur au carré est inférieure à 0.4. Cette mesure de la qualité du modèle est bien imparfaite, et on peut conclure en observant le panneau de gauche de la fig. 5.9 que plus d'étages doivent être calculés dans le cas isolant, car la structure des coefficients de la fraction continue change drastiquement aussitôt que la séquence connue de l'impureté se termine. En d'autres mots, la structure asymptotique de la fraction continue n'est pas révélée par le nombre d'étages calculé pour l'impureté. En effet, l'oscillation des coefficients extrapolés de la fig. 5.9 a une enveloppe relativement compliquée et cette enveloppe n'est pas visible dans les coefficients calculés de la self-énergie. C'est l'enveloppe de cette oscillation qui fait la différence entre une self-énergie qui est nulle ou qui diverge (à $\omega = 0$ dans ce cas-ci). La présence du delta de Dirac à fréquence nulle est une caractéristique qu'on a imposée par le choix de fonction modèle. Le panneau droit de la figure 5.9 montre le poids spectral résultant de quatre modèles d'extrapolation différents. Les quatre modèles ont des erreurs de prédiction similaires, mais la courbe rouge est celle qui performe le mieux. Cette dernière est la même qu'on retrouve à la figure 5.8. Plus de détails concernant les modèles d'extrapolation sont fournis à l'annexe B. Comme on peut le voir, les différents modèles sont en désaccord quant à la largeur du gap, et l'un des modèles assigne une forme différente au bord des bandes. Les endroits où les différents modèles donnent des résultats différents sont ceux qu'on devrait considérer comme les plus incertains.

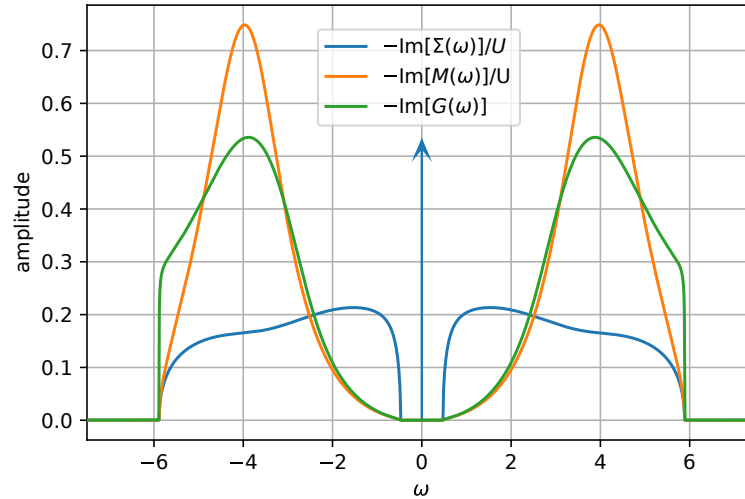


FIGURE 5.8 La partie imaginaire de la self-énergie Σ , du modèle d'extrapolation M et de la fonction de Green G à $U = 8$. La self-énergie est singulière à $\omega = 0$, le delta de Dirac contribue environ 70% de l'aire totale de la partie imaginaire de la self-énergie.

Dans le cas $U = 4$, la situation est moins critique. Néanmoins plus d'étages seraient nécessaires pour mieux caractériser les détails du spectre, principalement la forme du pic de quasi-particule, qui doit largement contribuer aux modulations dans l'amplitude de l'oscillation qu'on observe dans la séquence de coefficients β_i . Le panneau droit de la figure 5.10 montre le spectre à $U = 4$ avec plusieurs extrapolations de fraction continue différentes. La courbe verte est la même qu'on trouve à la figure 5.6. Les modèles d'extrapolation des trois courbes ont des erreurs de prédiction similaire sur les coefficients connus, le modèle de la courbe verte performant légèrement mieux. Plus de détails concernant les autres modèles d'extrapolation sont à l'annexe B. On peut voir que les trois spectres sont qualitativement similaires, mais ont des différences quantitatives significatives. Ces différences nous donnent une idée des caractéristiques les plus incertaines du spectre : la hauteur du pic au bord des bandes de Hubbard, l'épaule à $\omega = \pm 4$ et la largeur du pic de quasi-particule.

À la figure 5.11, on montre les spectres obtenus si on utilise une distribution semi-elliptique comme fonction de terminaison dans la self-énergie. On observe qu'avec cette extrapolation, la règle de somme de Luttinger n'est pas respectée dans la phase métallique : $-\text{Im}[G(\omega = 0)] \neq 1$. De plus, cette extrapolation suggère qu'à $U = 6$, le réseau est toujours dans la phase métallique, car il y a un petit pic à $\omega = 0$. La littérature [50, 52, 54] établit la valeur supérieure de la transition métal-isolant sur le réseau de Bethe à $U_c = 5.84 \pm 0.1$, une valeur légèrement inférieure à 6. On peut interpréter la présence de cette bosse comme un phénomène de Gibbs dû à la mauvaise qualité de l'extrapolation, mais ce résultat montre que le nombre d'étages calculés dans les fractions continues est insuffisant pour établir la phase du système par inspection du poids spectral à proximité de la transition. Si on porte attention à la courbe à $U = 8$, on voit que le poids spectral n'est pas nul à fréquence nulle :

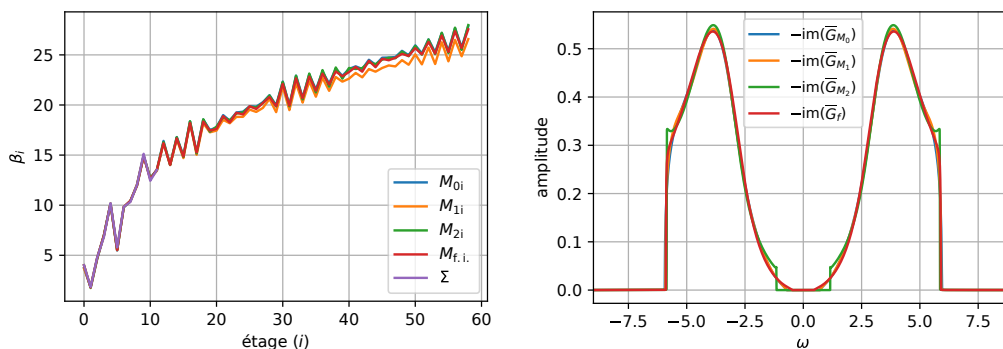


FIGURE 5.9 Résultats de plusieurs extrapolations différentes de la self-énergie à $U = 8$. À gauche : les coefficients β_i de la self-énergie des différents modèles. À droite : la partie imaginaire des fonctions de Green projeté résultantes.

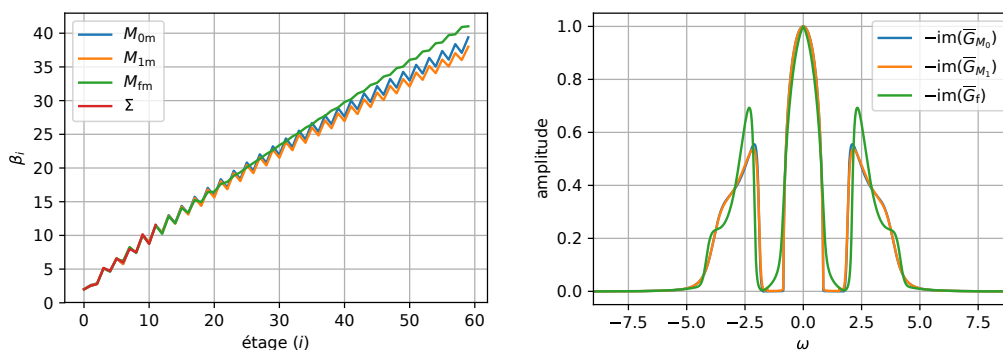


FIGURE 5.10 Résultats de plusieurs extrapolations différentes de la self-énergie à $U = 4$. À gauche : les coefficients β_i de la self-énergie des différents modèles. À droite : la partie imaginaire des fonctions de Green projeté résultantes.

on a un pseudogap plutôt qu'un vrai gap. Ceci est une conséquence générale de l'utilisation d'une terminaison semi-elliptique : il ne peut y avoir de gap ou de singularité avec ce modèle d'extrapolation. Il faut donc faire preuve de beaucoup de prudence dans l'interprétation des résultats avec cette fonction de terminaison, mais celle-ci est très facile à appliquer à n'importe quelle fraction continue.

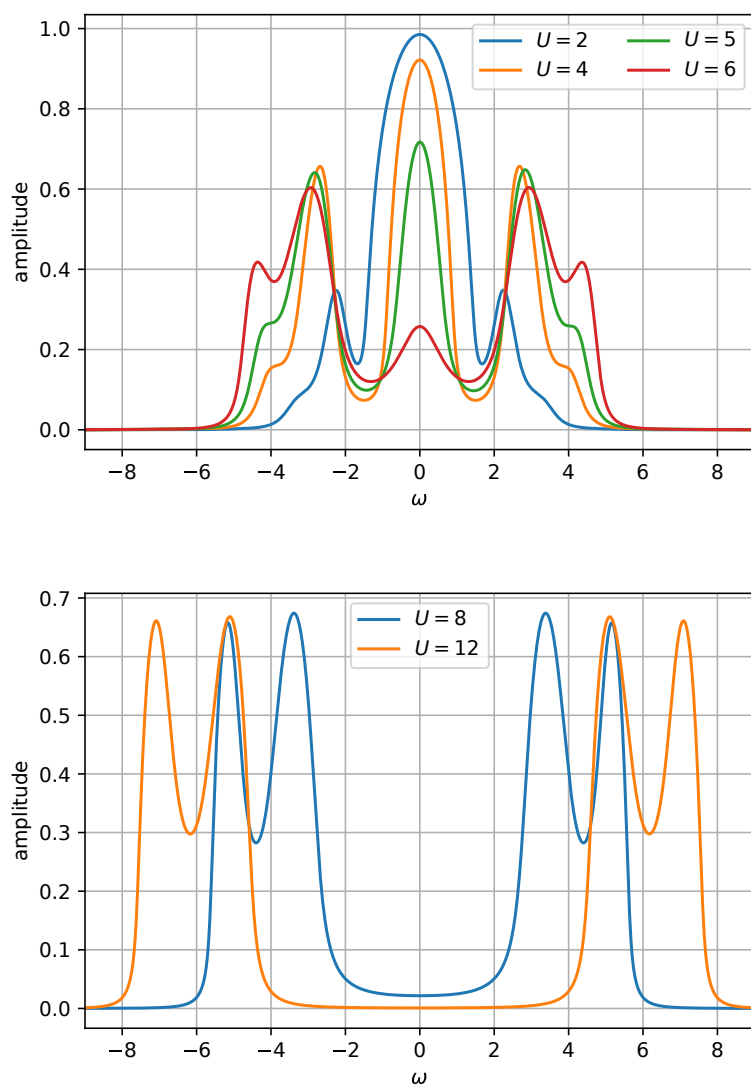


FIGURE 5.11 Poids spectral des fonctions de Green projetées du réseau de Bethe obtenues avec une fonction de terminaison semi-elliptique. En haut : solutions métalliques. En bas : solutions isolantes.

5.3 Valeurs moyennes

À la figure 5.12 on peut voir l'occupation de spin up sur un site. Comme tous les calculs sont faits au demi-remplissage en l'absence de symétrie brisée, la valeur exacte de cette observable est $\frac{1}{2}$. On voit dans cette figure qu'il y a très peu de fluctuations des résultats, en fonction de U et en fonction de la méthode de calcul utilisée. À priori, ceci est vrai pour toutes les observables à 1-corps : la procédure d'extrapolation ne devrait avoir à peu près aucun impact. Ces quantités sont contrôlées par l'aire du poids spectral aux fréquences négatives. En imposant que le modèle d'extrapolation reproduit les valeurs moyennes des observables à un corps de l'amas, on peut garantir l'équivalence entre le réseau et l'amas pour celles-ci.

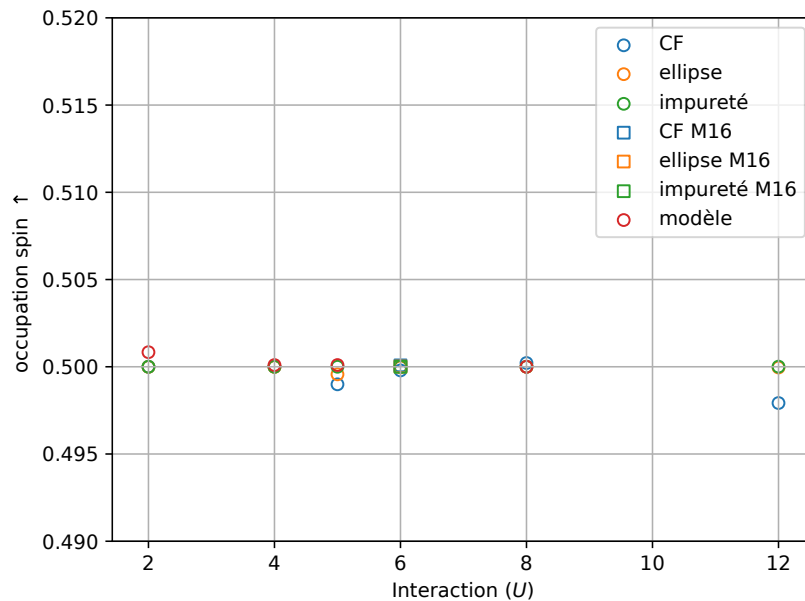


FIGURE 5.12 Densité d'électrons de spin up en fonction de U , calculée de plusieurs façons. La série "CF" est calculée avec la fraction continue sans aucune extrapolation, "ellipse" est calculée avec une fonction de terminaison semi-elliptique, "impureté" est calculée avec l'état fondamental de l'impureté, "modèle" est calculée avec les modèles de la section précédente. Les séries identifiées "M16" ont 16 étages calculés dans leur fraction continue, les autres ont 13 étages. Toutes les données à l'exception de celle identifiée "impureté" sont calculées sur le réseau de Bethe plutôt que sur l'impureté. Notez que l'échelle verticale est très serrée autour de 0.5.

La figure 5.13 illustre la double occupation en fonction de l'interaction. La double occupation réseau est calculée en intégrant $\Sigma(\omega)G(\omega)U^{-1}$ sur les fréquences négatives pour les fonctions extrapolées et le long de l'axe imaginaire pour les fonctions sans extrapolation. Cette quantité est égale à la double occupation, car il s'agit de la seule observable contribuant à l'énergie potentielle des électrons. On observe que l'extrapolation semi-elliptique donne généralement le meilleur accord avec les données de la littérature et que cet accord est le moins bon près de $U = 6$, à la transition métal-isolant. On explique le meilleur accord par

la présence de l'extrapolation semi-elliptique lors de la procédure DMFT. Bien qu'on n'en tienne pas compte pour déterminer l'autocohérence, il demeure que cette extrapolation détermine $N - M$ orbitales du bain lorsque celui est arrangé en une chaîne. À $U = 6$, on voit que le calcul de DMFT effectué avec $M = N = 16$ donne un meilleur accord avec les résultats d'ED sans extrapolation. Dans ce dernier cas, l'extrapolation n'a aucune influence sur la DMFT. On observe que 13 étages évalués dans les fractions continues est insuffisant pour avoir un accord quantitatif avec la littérature, particulièrement à proximité de la transition de phase. Le résultat à 16 étages est significativement meilleur que les autres, mais suggère tout de même qu'il faudrait calculer davantage de coefficients de fraction continue explicitement et donc augmenter la taille du bain. Notez que la double occupation calculée à l'aide de fractions continues extrapolées a un très bon accord avec les valeurs calculées sur l'impureté et avec la fraction continue, et que cette valeur sur l'impureté est plutôt éloignée des données de la littérature aux environs de la transition de phase. Combiné à l'amélioration significative de l'accord avec la littérature obtenu en calculant $M = N = 16$ étages dans la fraction continue, ceci indique deux choses : (1) qu'il est idéal de calculer un nombre d'étages dans la fraction continue égal au nombre d'orbitales de l'impureté et (2) qu'on doit concevoir les modèles d'extrapolation de sorte à conserver la valeur de double occupation de

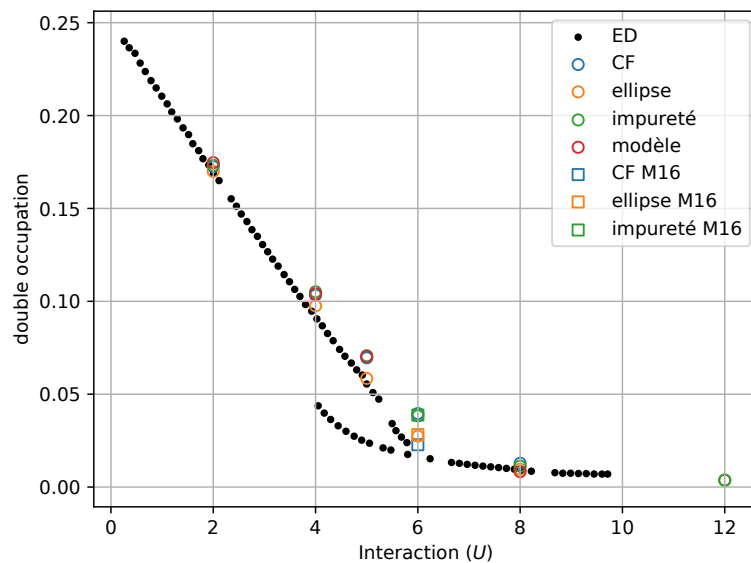


FIGURE 5.13 Double occupation en fonction de U , calculée de plusieurs façons. La série "CF" est calculée avec la fraction continue sans aucune extrapolation, "ellipse" est calculée avec une fonction de terminaison semi-elliptique, "impureté" est calculée avec l'état fondamental de l'impureté (un MPS), "modèles" est calculée avec les modèles de la section précédente, "ED" sont des résultats de diagonalisation exacte tirés de [50]. Les séries identifiées "M16" ont 16 étages calculés dans leur fraction continue, les autres ont 13 étages.

La figure 5.14 montre le poids de quasi-particules en fonction de U . Cette quantité est donnée par une dérivée de la self-énergie : $[1 - \frac{d\text{Re}(\Sigma(\omega))}{d\omega}]^{-1}$. Les quantités de ce genre sont très sensibles à l'extrapolation qu'on applique à la fraction continue ; comme on peut le voir,

le modèle d'extrapolation donne un résultat très différent de la terminaison semi-elliptique. De plus, on peut voir que le modèle à un poids de quasi-particule systématiquement plus élevé que les résultats de NRG, indiquant que le modèle donne une aire trop grande au pic de quasi-particule. La valeur calculée avec la fraction continue de 16 étages illustre bien la faiblesse de la terminaison semi-elliptique : les trois étages supplémentaires n'ont fait pratiquement aucune différence au poids de quasi-particule obtenue. Pour étudier des quantités locales en fréquences comme le poids de quasi-particules, il est important d'avoir une extrapol

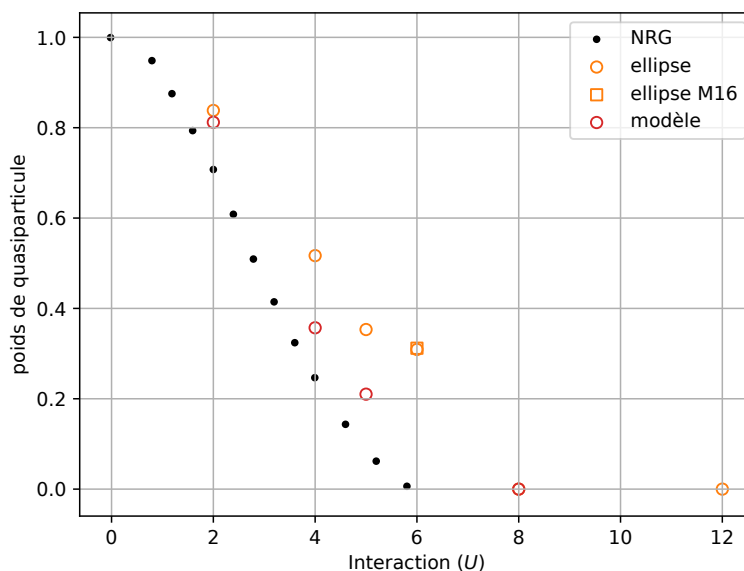


FIGURE 5.14 Poids de quasi-particule en fonction de U , calculé de plusieurs façons. La série "ellipse" est calculée avec une fonction de terminaison semi-elliptique, "modèle" est calculée avec les modèles de la section précédente. Les séries identifiées "M16" ont 16 étages calculés dans leur fraction continue, les autres ont 13 étages. Les données du groupe de renormalisation numérique (NRG) sont tirées de [54]

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre on a observé les résultats de calcul DMFT fait avec un solveur d'impureté basé sur la méthode récursive pour le modèle de Hubbard sur le réseau de Bethe avec un nombre de coordination infini.

On a d'abord regardé l'effet des paramètres de la simulation, le nombre d'étages calculé et la taille de l'impureté, sur la fraction continue convergée par DMFT et la dimension de lien des MPS. En observant les coefficients α_i , on observe que l'erreur ne croît pas aussi vite que dans le cas de l'impureté d'Anderson dans un milieu métallique. Ceci rend réalistes des calculs à beaucoup plus grande échelle que ce qui a été effectué dans cette thèse. L'évolution des coefficients β_i suggère une convergence rapide des coefficients par rapport au paramètre

de la simulation : *l'information obtenue par la méthode est de bonne qualité*. Malheureusement, la dimension de lien des MPS croît comme une exponentielle en fonction du nombre d'étages calculé. Ceci limite le nombre d'étages qu'on peut calculer en pratique.

Ensuite, on s'est penché sur les spectres résultants. Les spectres montrent que la quantité d'information à notre disposition ici est insuffisante pour bien caractériser le spectre à proximité de la transition de phase. Il faudrait calculer plus de 16 étages aux fractions continues dans cette région.

Finalement, on regarde quelques observables physiques. On y observe que la densité a un accord quantitatif avec les résultats attendus. On peut être confiant que ce résultat est généralisable à toute observable à un corps. Pour la double occupation, comme dans le cas des spectres, calculer plus d'étages semble nécessaire pour obtenir un accord quantitatif avec la littérature. La taille du désaccord suggère que quelques étages de plus seraient suffisants pour avoir un accord quantitatif. Le poids de quasi-particule montre que les quantités exprimées en fonction de la dérivée par rapport à la fréquence sont très sensibles à l'extrapolation de la fraction continue, contrairement aux valeurs moyennes.

Conclusion

Dans cette thèse, on a expliqué la théorie du champ moyen dynamique (sur amas) et comment calculer la densité spectrale et certains types d'observables à partir de la fonction de Green qu'on obtient avec cette théorie. On a expliqué comment calculer la fonction de Green à l'aide de l'algorithme de Lanczos avec une algèbre linéaire ordinaire, une méthode de diagonalisation exacte.

On a présenté trois articles utilisant la CDMFT et l'ED appliquées au modèle de Hubbard pour les cuprates. Ces résultats illustrent bien la puissance de la CDMFT ainsi que ses limites et celles de la diagonalisation exacte. Dans ces publications, la CDMFT permet l'étude de changements de phases, de la compétition entre phases et de la rigidité superfluide du supraconducteur. Le nombre d'orbitales limité a un impact sur la fidélité des résultats et l'usage d'amas impose la présence d'ondes de densité factices dans les solutions.

Dans le but d'améliorer la fidélité des résultats tout en gardant une approche permettant d'évaluer directement sur l'axe réel le poids spectral et la densité d'états, on a mis au point un solveur d'impureté basé sur la méthode récursive. Ce nouveau solveur exploite l'algèbre de fractions continues développée à l'annexe A pour isoler la self-énergie sous la forme d'une fraction continue et effectuer l'extrapolation directement sur celle-ci. Cette approche nécessite un bain plus grand que ce qui est faisable avec la diagonalisation exacte : on a donc implémenté l'algorithme de Lanczos sur des réseaux de tenseurs et utilisé la DMRG pour calculer l'état fondamental du système.

On a appliqué ce solveur au réseau de Bethe demi-rempli avec un nombre de coordination $z \rightarrow \infty$ afin d'évaluer sa performance. Les résultats obtenus démontrent le potentiel du solveur ainsi qu'un besoin d'algorithmes plus performants pour effectuer le calcul des fractions continues. En effet, la qualité des résultats n'est pas suffisante, particulièrement à proximité de la transition métal-isolant. L'évolution de la double occupation en fonction du nombre d'orbitales de bain et d'étages montre que quelques orbitales et étages de plus seraient suffisants pour obtenir une double occupation en accord avec la littérature.

En ce qui concerne les spectres, sans ajouter de contraintes supplémentaires au modèle d'extrapolation de fractions continues, il faudrait calculer plus d'étages. Une implémentation hautement parallélisée de l'algorithme de Lanczos sur tenseurs est une avenue possible pour remédier à ce problème. L'attrait principal de la méthode de Lanczos est qu'elle ne requiert de stocker que trois états et le hamiltonien pour effectuer l'entièreté du calcul. C'est

donc dire qu'elle est très bien adaptée aux forces et aux faiblesses de l'ED. Cette particularité est beaucoup moins attrayante lorsque les états sont représentés sous la forme de réseau de tenseurs : les états prennent alors relativement peu de mémoire et il est envisageable de les garder tous en mémoire. On pourrait envisager de développer une méthode de projection vers un sous-espace de Krylov mieux adapté aux forces et aux faiblesses des réseaux de tenseurs. On pourrait tenter d'adapter au MPS des méthodes développées pour des sommes de déterminants de Slater [55, 56].

Dans le contexte de cette thèse, la procédure d'extrapolation de fractions continues est ardue et compliquée. Avec plus d'étages calculés, cette procédure devrait devenir significativement plus aisée : le régime asymptotique de coefficients serait mieux caractérisé. Ce régime asymptotique est ce que l'on cherche à reproduire avec le modèle d'extrapolation. Avec suffisamment d'étages calculés, on serait en mesure de faire une extrapolation de bonne qualité avec des fonctions modèles générant un régime initial très différent de la fraction continue calculée, contrairement à ce qu'on a dû faire ici.

On a noté que la dimension de lien des MPS augmente trop vite pour permettre le calcul de beaucoup plus d'étages en un temps raisonnable. Plusieurs solutions s'offrent à nous. D'abord, on pourrait utiliser un autre réseau de tenseurs pour les états de Lanczos, comme *l'anzatz de renormalisation de l'enchevêtrement* [29, 32, 57] parce que le choix de réseau de tenseurs a beaucoup d'effet sur la dimension de liens nécessaire. Ensuite, des développements récents concernant la manipulation de MPO [35, 36] laissent croire que l'approche Liouvillienne de la méthode récursive [8] pourrait calculer un nombre d'étages supérieurs à ce qui est possible avec l'algorithme de Lanczos sur MPS : ils observent une croissance polynomiale de la dimension de lien des MPO en fonction du nombre d'itérations.

Annexe A

Algèbre des fractions continues

Dans cette annexe, on décrit les algorithmes pour effectuer les opérations algébriques de base sur des fractions continues de Jacobi ayant un nombre fini d'étages : l'addition, le produit, la soustraction et la division. Ces algorithmes sont tous exacts, il n'y a pas d'approximation, bien qu'une implémentation pratique sera certainement teintée d'erreur numérique, surtout s'il y a un grand nombre d'étages à calculer.

L'addition est l'algorithme le plus simple et évident, le premier qu'on présente. Les autres sont des problèmes un peu plus épineux et requièrent une classe de fraction continue un peu plus générale que celle acceptable pour les éléments diagonaux d'une fonction de Green. Considérons la soustraction de deux fractions continues $f(\omega) - g(\omega)$. Les poids spectraux de celles-ci sont deux sommes de deltas de Dirac, et toutes leurs amplitudes sont positives. Il est évident que s'il y a un seul delta de $g(\omega)$ qui n'est pas situé très exactement à la même position qu'un des deltas de $f(\omega)$, le résultat aura un poids spectral avec un poids négatif à certaines fréquences. Même si, pour des raisons physiques, le poids résultant de la soustraction devrait être partout positif, ceci est impossible à satisfaire en pratique. Une erreur numérique infinitésimale peut faire en sorte que les deltas ne se superposent pas parfaitement. Les algorithmes pour la soustraction, le produit et la division doivent donc produire une classe de fraction continue un peu plus générale : elles doivent être en mesure d'admettre des pôles de n'importe quel signe.

Cette nouvelle classe de fraction continue n'est pas très différente, au premier coup d'oeil, de celle discutée au Chapitre 4. Leur forme générale est

$$f(\omega) \equiv - \mathbf{K} \prod_i \frac{-\beta_i \delta_i}{\omega - \alpha_i}, \quad (\text{A.1})$$

où les α_i , β_i et δ_i peuvent être des nombres complexes. Comme on peut le voir, la définition diffère de l'éq. (4.1) par la présence de $\delta_i \beta_i$ plutôt que β_i^2 . Si tous les $\beta_i \propto \delta_i^*$, on peut définir $\delta'_i = \beta'_i = \sqrt{\beta_i \delta_i}$ et on retrouve une fraction continue de Jacobi ; le poids spectral est donc positif. Si le signe d'un des δ_i diffère de celui de β_i on peut alors supposer qu'il y aura des régions de poids spectral négatif à la fonction.

Dans la plupart des usages qu'on fait de ces opérations algébriques, le résultat attendu devrait être représenté par une fraction continue de Jacobi, avec un poids spectral partout positif. Malgré cela, on obtient en pratique des fonctions qui ont des régions de poids spectral négatif, en partie à cause de l'erreur numérique, mais surtout parce qu'on choisit typiquement de tronquer la fraction continue à un nombre restreint d'étages. Les coefficients à l'étage n du résultat est contrôlé par les coefficients situés aux étages $[1, n]$ des arguments de l'algorithme. Donc si les fractions continues données à l'entrée sont tronqué à N étages, seuls les N premiers étages du résultat reflètent de l'information qu'on a calculé; les étages additionnels reflètent plutôt les troncations effectuées à l'entrée, et peuvent être ignorés.

A.1 Addition

On peut procéder à l'addition de deux fractions continues à l'aide de la représentation matricielle de celles-ci. Considérons deux fractions continues $f(\omega)$ et $g(\omega)$:

$$\begin{aligned} f(\omega) + g(\omega) &= \langle \psi_f | [\omega - H_f]^{-1} | \psi_f \rangle + \langle \psi_g | [\omega - H_g]^{-1} | \psi_g \rangle \\ &= \left(\langle \psi_f | \quad \langle \psi_g | \right) \begin{pmatrix} \omega - H_f & 0 \\ 0 & \omega - H_g \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} | \psi_f \rangle \\ | \psi_g \rangle \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

À la deuxième ligne de (A.2) on réarrange la somme des deux inverses en l'inverse d'une seule matrice diagonale par blocs. On peut donc obtenir une fraction continue pour la somme en utilisant l'algorithme de Lanczos sur la matrice par bloc $H_f \oplus H_g$ avec l'état initial $|\psi_f\rangle \oplus |\psi_g\rangle$.

A.2 Soustraction

Comme pour l'addition, la première étape est de réécrire la différence de deux fonctions en termes d'une seule matrice par bloc.

$$\begin{aligned} f(\omega) - g(\omega) &= \langle \psi_f | [\omega - H_f]^{-1} | \psi_f \rangle - \langle \psi_g | [\omega - H_g]^{-1} | \psi_g \rangle \\ &= \left(\langle \psi_f | \quad \langle \psi_g | \right) \begin{pmatrix} \omega - H_f & 0 \\ 0 & \omega - H_g \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} | \psi_f \rangle \\ -| \psi_g \rangle \end{pmatrix} \\ &= \langle G | [\omega - \mathbf{A}]^{-1} | D \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

L'expression en fonction d'une seule matrice est très similaire à celle construite pour l'addition, avec une différence très importante : dans le ket $|D\rangle$, $|\psi_g\rangle$ apparaît avec un signe opposé au bra : le résultat n'est pas un élément diagonal de matrice. Comme les états de part et d'autre de l'inverse ne sont pas les mêmes, il n'est plus possible d'utiliser l'algorithme de Lanczos tel que présenté au chap.1. Une variation de celui-ci est adaptée à notre problème : l'algorithme de bi-orthonormalization de Lanczos [58]. Il est important de noter que l'algorithme fonctionne uniquement si $\langle G | D \rangle \neq 0$. Cet algorithme est normalement

utilisé pour résoudre un état $|x\rangle$ dans un système d'équations linéaires $|b\rangle - \mathbf{A}|x\rangle = 0$ ou \mathbf{A} est une matrice potentiellement non-hermitienne. L'algorithme procède en effectuant une projection oblique de la matrice de sorte que celle-ci devient tridiagonale.

$$\mathbf{T} = \mathbf{W}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{V} \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{W}^\dagger \mathbf{V} = \mathbf{I} \quad (\text{A.5})$$

Les colonnes des matrices de la projection oblique \mathbf{W} et \mathbf{V} sont définies par les états $|w_i\rangle$ et $|v_i\rangle$, respectivement. Ces états sont déterminés par les équations :

$$\delta_{i+1}|v_{i+1}\rangle = \mathbf{A}v_i - \alpha_i v_i - \beta_i |v_{i-1}\rangle, \quad (\text{A.6})$$

$$\beta_{i+1}^* |w_{i+1}\rangle = \mathbf{A}^\dagger w_i - \alpha_i^* w_i - \delta_i^* |w_{i-1}\rangle, \quad (\text{A.7})$$

$$\alpha_i = \langle w_i | \mathbf{A} | v_i \rangle, \quad (\text{A.8})$$

$$\beta_i \delta_i \text{ tel que } \langle w_i | v_i \rangle = 1. \quad (\text{A.9})$$

avec $|v_{-1}\rangle = |w_{-1}\rangle = 0$ et $\delta_0 |v_0\rangle = \mathbf{A} |x_0\rangle - |b\rangle$, $|x_0\rangle$ et $|w_0\rangle$ sont au choix. La solution $|x\rangle$ du système d'équations est

$$|x\rangle = |x_0\rangle + \mathbf{V} \mathbf{T}^{-1} \mathbf{W}^\dagger |v_0\rangle \delta_0. \quad (\text{A.10})$$

Pour la construction de la fraction continue résultant d'une soustraction, le problème est de faire en sorte que $\langle G | [w - \mathbf{A}]^{-1} | D \rangle$ soit égal au premier élément de l'inverse d'une matrice tridiagonale. Pour ce faire, il faut choisir $|x_0\rangle = 0 \implies \delta_0 |v_0\rangle = |D\rangle$ et $\beta_0 |w_0\rangle = |G\rangle$ et ensuite appliquer l'algorithme de bi-orthogonalisation à la matrice \mathbf{A} définie par éq. (A.3). Ayant fait ceci,

$$\begin{aligned} \langle G | [w - \mathbf{A}]^{-1} | D \rangle &= \langle G | \mathbf{V} [w - T]^{-1} \mathbf{W}^\dagger | D \rangle \\ &= \beta_0 \delta_0 \langle e_0 | [w - T]^{-1} | e_0 \rangle \\ &= - \mathbf{K}_i \frac{-\beta_i \delta_i}{\omega - \alpha_i}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Notons que cette variation de l'algorithme de Lanczos peut être utilisée pour calculer la représentation en fraction continue des éléments hors diagonale de la fonction de Green ou toute autre valeur moyenne dépendant du temps de la forme $\langle A(t)B(t') \rangle$. Le poids spectral de ces fonctions n'a pas à être positif.

A.3 Produit

Pour effectuer le produit, on utilise la représentation de Lehmann pour réécrire le produit en une soustraction équivalente. Une fraction continue $f(\omega) = \langle \psi_f | [\omega - \mathbf{H}_f]^{-1} | \psi_f \rangle$ ayant un nombre fini d'étages peut être réécrite dans sa représentation de Lehmann en diagonalisant la matrice $\mathbf{H}_f = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{E} \mathbf{U}$. Dans cette base

$$f(\omega) = \sum_i \frac{f_i f_i^*}{\omega - e_i} \quad (\text{A.12})$$

où $e_i = [E]_{ii}$ et $f_i = [\mathbf{U} | f \rangle]_i$. Une fois les fonctions qu'on désire multiplier écrites dans cette représentation, il est possible de réécrire leur produit sous la forme d'une soustraction en effectuant une décomposition en fractions partielles :

$$\begin{aligned} f(\omega)g(\omega) &= \sum_i \frac{f_i f_i^*}{\omega - e_i} \sum_j \frac{g_j g_j^*}{\omega - \epsilon_j} \\ &= \sum_{ij} \left\{ \frac{f_i f_i^* g_j g_j^*}{(e_i - \epsilon_j)(\omega - e_i)} - \frac{f_i f_i^* g_j g_j^*}{(e_i - \epsilon_j)(\omega - \epsilon_j)} \right\} \\ &= \sum_i \frac{h_i}{\omega - e_i} - \sum_j \frac{b_j}{\omega - \epsilon_j} \\ &= h(\omega) - b(\omega) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

où $h_i \equiv \sum_j \frac{f_i f_i^* g_j g_j^*}{(e_i - \epsilon_j)}$ et $b_j \equiv \sum_i \frac{f_i f_i^* g_j g_j^*}{(e_i - \epsilon_j)}$.

Nous avons donc deux nouvelles fonctions dont la soustraction est égale au produit des fonctions originales. Dans le but d'appliquer l'algorithme de soustraction décrit à la section précédente, nous devons faire deux chose : (1) ajouter un terme faisant en sorte qu'il y a une contribution en $\frac{1}{\omega}$ à la fonction, sans quoi la fonction ne peut être exprimée sous la forme d'une fraction continue d'un des types qu'on considère. (2) réécrire le tout sous la forme d'un élément de matrice. La matrice sur laquelle appliquer l'algorithme de biorthogonalisation est donc définie par :

$$\begin{aligned} f(\omega)g(\omega) + \frac{a}{\omega} &= \langle a | [\omega]^{-1} | a \rangle + \langle b_g | [\omega - H_b]^{-1} | b_d \rangle + \langle h_g | [\omega - H_d]^{-1} | h_d \rangle \\ &= \left(\langle a | \quad \langle b_g | \quad \langle h_g | \right) \begin{pmatrix} \omega & 0 & 0 \\ 0 & \omega - H_b & 0 \\ 0 & 0 & \omega - H_d \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} | a \rangle \\ | b_d \rangle \\ | h_d \rangle \end{pmatrix} \\ &= \langle G | [z - \mathbf{A}]^{-1} | D \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

où

$$[|a\rangle]_i = \sqrt{a}\delta_{i0}, \quad (\text{A.15})$$

$$[|b_d\rangle]_i = \sqrt{|b_i|}, \quad (\text{A.16})$$

$$[|b_g\rangle]_i = \text{signe}(b_i)\sqrt{|b_i|}, \quad (\text{A.17})$$

$$[|h_d\rangle]_i = \sqrt{|h_i|}, \quad (\text{A.18})$$

$$[|h_g\rangle]_i = \text{signe}(h_i)\sqrt{|h_i|}, \quad (\text{A.19})$$

$$[H_b]_{ij} = \delta_{i,j}\epsilon_j \quad \text{et} \quad (\text{A.20})$$

$$[H_h] = \delta_{ij}e_i. \quad (\text{A.21})$$

A.4 Division

Pour la division de fractions continues, on peut aisément la transformer en un produit. Considérons $\frac{g(\omega)}{f(\omega)}$, où les deux fonctions sont des fractions continues. Explicitement pour f , $f(\omega) = \frac{b_0^2}{\omega - a_0 - f_r(\omega)}$, où $f_r(\omega)$ est aussi une fraction continue. Il en résulte que

$$\begin{aligned} \frac{g(\omega)}{f(\omega)} &= \frac{g(\omega)(\omega - a_0 - f_r(\omega))}{b_0^2} \\ &= b_0^{-2}(\omega g(\omega) - a_0 g(\omega) - g(\omega)f_r(\omega)). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Le produit de g avec f_r peut être décomposé en la différence de deux autres fonctions, comme on l'a montré à la section précédente et le terme $a_0 g(\omega)$ peut être combiné sans problème aux autres termes pour créer la matrice sur laquelle on agit avec l'algorithme de soustraction. Il ne reste qu'à décider quoi faire avec $\omega g(\omega)$. Avec un peu de travail, on peut transformer ce terme en la somme d'une constante avec une fonction de la fréquence. Cette dernière peut être combinée aux autres pour ne former qu'une seule fraction continue. La première étape pour préparer le terme $\omega g(\omega)$ est encore une fois d'utiliser la représentation de Lehmann.

$$\begin{aligned} \omega g(\omega) &= \omega \sum_i \frac{g_i g_i^*}{\omega - \epsilon_i} \\ &= \sum_i \frac{\omega g_i g_i^* - (\omega - \epsilon_i) g_i g_i^*}{\omega - \epsilon_i} + \sum_i g_i g_i^* \\ &= \sum_i \frac{\epsilon_i g_i g_i^*}{\omega - \epsilon_i} + \sum_i g_i g_i^* \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

On combine tout ceci en une seule équation :

$$\sum_i \frac{g_i g_i^*}{b_0^2} + b_0^{-2} \left(\sum_i \frac{\epsilon_i g_i g_i^*}{\omega - \epsilon_i} - a_0 g(\omega) - g(\omega) f_r(\omega) \right). \quad (\text{A.24})$$

La partie dépendante de la fréquence peut être combinée en une fraction continue avec l'algorithme de biorthogonalisation et les transformations décrites dans la section précédente.

Annexe B

Autres modèles d'extrapolation

Dans cette annexe, on donne plus d'information au sujet des modèles d'extrapolation de fractions continues. L'erreur de prédiction des différentes fonctions est au tableau B.1. Les meilleurs modèles, M_{fm} et M_{fi} , sont définis au chapitre 5. Les autres sont définis par les équations suivantes :

	M_{0m}	M_{1m}	M_{fm}	M_{0i}	M_{1i}	M_{2i}	M_{fi}
Erreur	0.2400	0.2204	0.1860	0.3537	0.2828	0.2760	0.2130

TABLE B.1 Erreur de prédiction des différents modèles : la somme des différences au carré entre les coefficients de fraction continue calculés à partir de l'impureté et ceux générés par le modèle.

$$M_{0m}(\omega) = \omega^2 \exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_4}\right|^{D_5}\right) \left\{ D_1 \left[\text{lor}\left(\omega - \frac{D_2}{2}, D_3\right) + \text{lor}\left(\omega + \frac{D_2}{2}, D_3\right) \right] + D_{10} \right\} \\ + D_6 \text{gap}(\omega, D_7) \text{sech}\left(\left|\frac{|\omega| - D_7}{D_8}\right|^{D_9}\right), \quad (\text{B.1})$$

$$M_{1m}(\omega) = |\omega| \exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_4}\right|^{D_5}\right) \left\{ D_1 \left[\text{lor}\left(\omega - \frac{D_2}{2}, D_3\right) + \text{lor}\left(\omega + \frac{D_2}{2}, D_3\right) \right] + D_{10} \right\} \\ + D_6 \text{gap}(\omega, D_7) \text{sech}\left(\left|\frac{|\omega| - D_7}{D_8}\right|^{D_9}\right), \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned}
M_{0i}(\omega) = & D_1 \left[\exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_2}\right|^{D_3}\right) + D_7 \exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_8}\right|^{D_9}\right) \right] \text{gap}(\omega, D_5 + D_6) \\
& + D_4 |\omega| \left[\text{ell}(\omega - D_5, D_6) D_{10}^2 \text{lor}(w - D_5, D_{10}) \right] \\
& + D_4 |\omega| \left[\text{ell}(\omega + D_5, D_6) D_{10}^2 \text{lor}(w + D_5, D_{10}) \right]
\end{aligned} \tag{B.3}$$

$$\begin{aligned}
M_{1i}(\omega) = & D_1 \left[\exp\left(-\left|\frac{|\omega| - D_{11}}{D_2}\right|^{D_3}\right) + D_7 \exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_8}\right|^{D_9}\right) \right] \text{gap}(\omega, D_5 - D_6) \\
& + D_4 |\omega| \left[\text{ell}(\omega - D_5, D_6) D_{10}^2 \text{lor}(w - D_5, D_{10}) \right] \\
& + D_4 |\omega| \left[\text{ell}(\omega + D_5, D_6) D_{10}^2 \text{lor}(w + D_5, D_{10}) \right]
\end{aligned} \tag{B.4}$$

$$\begin{aligned}
M_{2i}(\omega) = & D_1 \left[\exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_2}\right|^{D_3}\right) + D_7 \exp\left(-\left|\frac{\omega}{D_8}\right|^{D_9}\right) \right] \text{gap}(\omega, D_5 - D_6) \\
& + D_4 |\omega| \left[\text{ell}(\omega - D_5, D_6) D_{10}^2 \text{lor}(w - D_{11}, D_{10}) \right] \\
& + D_4 |\omega| \left[\text{ell}(\omega + D_5, D_6) D_{10}^2 \text{lor}(w + D_{11}, D_{10}) \right]
\end{aligned} \tag{B.5}$$

où

$$\text{ell}(\omega, W) = \text{Re} \left(\sqrt{W^2 - \omega^2} \right), \tag{B.6}$$

$$\text{lor}(\omega, \gamma) = \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} \text{ et} \tag{B.7}$$

$$\text{gap}(\omega, W) = \theta(|\omega| - W). \tag{B.8}$$

Les paramètres des différentes fonctions sont au tableau [B.2](#)

M	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	
0i	3.00751×10^{-5}	13.2040	8.2668	0.027541	3.3331	
1i	3.12693×10^{-5}	13.025	7.7729	0.027720	3.3176	
2i	3.37171×10^{-5}	13.026	7.8517	0.048276	3.5034	
0m	3.5935×10^{-5}	3.4127	4.7377×10^{-4}	5.4737	2.9122	
1m	6.0832×10^{-4}	3.3539	0.0032415	6.6896	3.6172	
M	D_6	D_7	D_8	D_9	D_{10}	D_{11}
0i	2.6076	9.6546×10^{-4}	9.7889	2.6888	0.99934	
1i	2.5924	1.2876×10^{-7}	9.7269	2.7831	1.0005	2.1890
2i	2.3496	3.1863×10^{-8}	9.7538	2.6889	0.9998	4.1150
0m	0.47443	1.7577	1.4998	1.2853	4.4585×10^{-4}	
1m	0.45987	1.5397	1.6109	1.3162	9.8967×10^{-4}	

TABLE B.2 Valeurs des paramètres optimisés pour les différents modèles d'extrapolation de fractions continues. $U = 8$ Pour les modèles M_{xi} et $U = 4$ pour les modèles M_{xm} .

Bibliographie

- [1] R. Orús, “A practical introduction to tensor networks : matrix product states and projected entangled pair states”, [Annals of Physics](#) **349**, 117 (2014).
- [2] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups”, [Physical Review Letters](#) **69**, 2863 (1992).
- [3] G. Evenbly et G. Vidal, “Tensor network renormalization”, [Physical Review Letters](#) **115**, 180405 (2015).
- [4] R. Orús, “Advances on tensor network theory : symmetries, fermions, entanglement, and holography”, [The European Physical Journal B](#) **87**, 280 (2014).
- [5] F. A. Wolf, I. P. McCulloch, O. Parcollet et U. Schollwöck, “Chebyshev matrix product state impurity solver for dynamical mean-field theory”, [Physical Review B](#) **90**, 10 . 1103/PhysRevB.90.115124 (2014).
- [6] F. A. Wolf, “Solving dynamical mean-field theory using matrix product states”, thèse de doct. (Ludwig-Maximilians-Universität München, 2015).
- [7] M. Ganahl, M. Aichhorn, H. G. Evertz, P. Thunström, K. Held et F. Verstraete, “Efficient DMFT impurity solver using real-time dynamics with matrix product states”, [Physical Review B](#) **92**, 155132 (2015).
- [8] V. S. Viswanath et G. Müller, *The recursion method : application to many-body dynamics*, Lecture notes in physics m23 (Springer-Verlag, Berlin ; New York, 1994), 259 p.
- [9] G. Green, “An Essay on the Application of mathematical Analysis to the theories of Electricity and Magnetism”, [arXiv :0807.0088 \[physics\]](#) (2008).
- [10] J. Schwinger, “The Greening of Quantum Field Theory : George and I”, [arXiv :hep-ph/9310283](#) (1993).
- [11] A.-M. S. Tremblay, *The Many-Body problem, from perturbation theory to dynamical-mean field theory*, Notes de cours (PHY807), université de Sherbrooke ().
- [12] A. A. Abrikosov, L. P. Gor’kov et I. E. Dzialoshinskiï, *Methods of quantum field theory in statistical physics*, Rev. English ed (Dover Publications, New York, 1975), 352 p.
- [13] A. M. Zagoskin, *Quantum theory of many-body systems : techniques and applications*, Graduate texts in contemporary physics (Springer, New York, 1998), 229 p.
- [14] A. L. Fetter et J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems* (Dover Publications, Mineola, N.Y, 2003), 601 p.

- [15] H. S. Wall, *Analytic theory of continued fractions* (American Mathematical Society, Providence, R.I, 1948), 433 p.
- [16] D. Sénéchal, "An introduction to quantum cluster methods", [arXiv :0806.2690 \[cond-mat\]](#) (2010).
- [17] D. Sénéchal, "Cluster Dynamical Mean Field Theory", in *Strongly Correlated Systems : Theoretical Methods*, sous la dir. d'A. Avella et F. Mancini (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012), p. 341-371.
- [18] M. Potthoff, "Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons", [The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems](#) **32**, 429 (2003).
- [19] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*, 2nd ed (SIAM, Philadelphia, 2003), 528 p.
- [20] A. Foley, S. Verret, A.-M. S. Tremblay et D. Sénéchal, "Coexistence of superconductivity and antiferromagnetism in the Hubbard model for cuprates", [Physical Review B](#) **99**, 184510 (2019).
- [21] S. Verret, "Couplage interplan et compétition de phases dans le modèle de Hubbard des cuprates", Mémoire de maîtrise (Université de Sherbrooke, 2014).
- [22] O. Simard, C.-D. Hébert, A. Foley, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay, "Superfluid stiffness in cuprates : effect of mott transition and phase competition", [Physical Review B](#) **100**, 094506 (2019).
- [23] O. Simard, "Rigidité superfluide et température critique en présence d'une autre phase", Mémoire de maîtrise (Université de Sherbrooke, 2019).
- [24] S. Verret, J. Roy, A. Foley, M. Charlebois, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay, "Intrinsic cluster-shaped density waves in cellular dynamical mean-field theory", [Physical Review B](#) **100**, 224520 (2019).
- [25] U. Schollwöck, "The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states", [Annals of Physics](#) **326**, 96 (2011).
- [26] T. E. Baker, S. Desrosiers, M. Tremblay et M. P. Thompson, "Méthodes de calcul avec réseaux de tenseurs en physique", [arXiv :1911.11566 \[cond-mat, physics :quant-ph\]](#) (2019).
- [27] U. Schollwoeck, "The density-matrix renormalization group", [Reviews of Modern Physics](#) **77**, 259 (2005).
- [28] G. Evenbly et G. Vidal, "Algorithms for entanglement renormalization", [Physical Review B](#) **79**, 10.1103/PhysRevB.79.144108 (2009).
- [29] G. Vidal, "Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated", [Physical Review Letters](#) **101**, 110501 (2008).
- [30] G. Vidal, "Entanglement renormalization", [Physical Review Letters](#) **99**, 220405 (2007).
- [31] L. Tagliacozzo, G. Evenbly et G. Vidal, "Simulation of two-dimensional quantum systems using a tree tensor network that exploits the entropic area law", [Physical Review B](#) **80**, 235127 (2009).

- [32] P. Corboz et G. Vidal, "Fermionic multiscale entanglement renormalization ansatz", *Physical Review B* **80**, 165129 (2009).
- [33] C. Hubig, I. P. McCulloch et U. Schollwöck, "Generic construction of efficient matrix product operators", *Physical Review B* **95**, 035129 (2017).
- [34] M. P. Zaletel, R. S. K. Mong, C. Karrasch, J. E. Moore et F. Pollmann, "Time-evolving a matrix product state with long-ranged interactions", *Physical Review B* **91**, 165112 (2015).
- [35] D. E. Parker, X. Cao et M. P. Zaletel, "Local matrix product operators : canonical form, compression, & control theory", [arXiv :1909.06341 \[cond-mat, physics :quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/1909.06341) (2019).
- [36] D. E. Parker, X. Cao, A. Avdoshkin, T. Scaffidi et E. Altman, "A universal operator growth hypothesis", *Physical Review X* **9**, 041017 (2019).
- [37] F. A. Wolf, J. A. Justiniano, I. P. McCulloch et U. Schollwöck, "Spectral functions and time evolution from the chebyshev recursion", *Physical Review B* **91**, 115144 (2015).
- [38] Miles Stoudenmire, *Tensor Network*, http://tensornetwork.org/mps/algorithms/dmrg/#toc_refs.
- [39] C. Hubig, I. P. McCulloch, U. Schollwöck et F. A. Wolf, "Strictly single-site DMRG algorithm with subspace expansion", *Physical Review B* **91**, 155115 (2015).
- [40] S. R. White, "Density matrix renormalization group algorithms with a single center site", *Physical Review B* **72**, 180403 (2005).
- [41] A. Foley, T. E. Baker, A. Di Paolo et D. Sénéchal, "COMPUTER-IMPLEMENTED METHOD OF SOLVING A HAMILTONIAN", brev. provisoire, application 62/942,868 (SOCPRA, 3 déc. 2019).
- [42] R. Bulla, T. A. Costi et T. Pruschke, "Numerical renormalization group method for quantum impurity systems", *Reviews of Modern Physics* **80**, Publisher : American Physical Society, 395 (2008).
- [43] A. Di Paolo, T. E. Baker, A. Foley, D. Sénéchal et A. Blais, "Efficient modeling of superconducting quantum circuits with tensor networks", [arXiv :1912.01018 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/1912.01018) (2019).
- [44] E. Jeckelmann, "Dynamical density-matrix renormalization-group method", *Physical Review B* **66**, 045114 (2002).
- [45] J. Makhoul, "Linear prediction : a tutorial review", *Proceedings of the IEEE* **63**, 561 (1975).
- [46] J. Makhoul, "Spectral linear prediction : properties and applications", *IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing* **23**, 283 (1975).
- [47] W. H. Press, "Linear Prediction Numerical recipes", in *Numerical recipes : the art of scientific computing* (Cambridge University Press, Cambridge, UK; New York, 2007).
- [48] A. Cuyt, W. B. Jones, V. B. Petersen, B. Verdonk et H. Waadeland, *Handbook of continued fractions for special functions* (Springer Science+Business Media B.V., Dordrecht, 2008).

- [49] G. A. Gazonas, "The numerical evaluation of cauchy principal value integrals via the fast fourier transform", [International Journal of Computer Mathematics](#) **18**, 277 (1986).
- [50] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth et M. J. Rozenberg, "Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions", [Reviews of Modern Physics](#) **68**, 13 (1996).
- [51] R. Bulla, A. C. Hewson et T. Pruschke, "Numerical renormalization group calculations for the self-energy of the impurity anderson model", [Journal of Physics : Condensed Matter](#) **10**, 8365 (1998).
- [52] N.-H. Tong, S.-Q. Shen et F.-C. Pu, "Mott-Hubbard transition in infinite dimensions", [Physical Review B](#) **64**, 235109 (2001).
- [53] D. C. Langreth, "Friedel sum rule for anderson's model of localized impurity states", [Physical Review](#) **150**, 516 (1966).
- [54] R. Bulla, "Zero temperature metal-insulator transition in the infinite-dimensional hubbard model", [Physical Review Letters](#) **83**, 136 (1999).
- [55] Y. Lu, M. Höppner, O. Gunnarsson et M. W. Haverkort, "Efficient real-frequency solver for dynamical mean-field theory", [Physical Review B](#) **90**, 10.1103/PhysRevB.90.085102 (2014).
- [56] C. Lin et A. A. Demkov, "Efficient variational approach to the impurity problem and its application to the dynamical mean-field theory", [Physical Review B](#) **88**, 035123 (2013).
- [57] P. Corboz, G. Evenbly, F. Verstraete et G. Vidal, "Simulation of interacting fermions with entanglement renormalization", [Physical Review A](#) **81**, 010303 (2010).
- [58] Y. Saad, "The lanczos biorthogonalization algorithm and other oblique projection methods for solving large unsymmetric systems", [SIAM Journal on Numerical Analysis](#) **19**, 485 (1982).