

Le *crossover dimensionnel* dans la chaleur spécifique
du modèle de *Hubbard* demi-rempli

par

Charles Brillon

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

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 13 septembre 2007

III-1828



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 978-0-494-49467-7
Our file Notre référence
ISBN: 978-0-494-49467-7

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

Le 13 septembre 2007

le jury a accepté le mémoire de M. Charles Brillon dans sa version finale.

Membres du jury

M. André-Marie Tremblay
Directeur
Département de physique

M. Louis Taillefer
Membre
Département de physique

M. René Côté
Président-rapporteur
Département de physique

À Jessica, Polly, Quenotte, Horace, Sacha et Gizmo.

Sommaire

Un des modèles théoriques les plus susceptibles d'expliquer le fonctionnement des supraconducteurs à haute température critique (SHTC) est le modèle de *Hubbard*. On comprend de plus en plus ce qui se passe en une dimension (1D) puisque sa solution est connue. Cependant, les calculs de chaleur spécifique montrent que la nature des excitations du modèle en 1D et en 2D (deux dimensions) n'est vraisemblablement pas la même dans les régimes dits de fort et faible couplage. On peut observer ce qui se passe entre les régimes 1D et 2D en introduisant un paramètre d'anisotropie variant continûment, soit : une intégrale de saut interchaîne t_y , telle que $0 \leq t_y \leq t_x$; t_x représente ici l'intégrale de saut entre deux atomes voisins d'une même chaîne. On utilise ici la méthode Monte Carlo quantique développée par Blankenbecler, Scalapino et Sugar (MCQ) (BSS), combinée à une nouvelle technique de calcul de la chaleur spécifique dont l'idée de base est de calculer une dérivée aux différences finies en deux points assez peu éloignés l'un de l'autre, de telle sorte que l'on peut utiliser les mêmes configurations de champs de *Hubbard-Stratonovich* pour ces deux points et ainsi espérer réduire les effets des fluctuations statistiques. Si l'on se sert du nombre de bosses dans la chaleur spécifique comme critère pour discriminer les régime 1D et 2D (une bosse en 1D et deux bosses en 2D), on conclut que le *crossover* 1D-2D se situe entre $t_y \simeq 0.4t_x$ et $t_y \simeq 0.6t_x$.

Remerciements

Plusieurs personnes m'ont épaulé dans ce travail. Tout d'abord, je dois remercier le professeur André-Marie Tremblay pour sa grande patience et son humanité. Je suis encore bien jeune mais je le répète souvent : c'est un homme complet, dont les qualités humaines n'ont d'égales que sa grande culture et ses nombreuses connaissances de tout acabit. Merci M. Tremblay. Je vous souhaite un prix Nobel avant la fin votre carrière.

Les gens du D2-1056, pour leur aide, patience, amitié et pour les longues conversations philosophiques qu'on s'est tapées. Je remercie en particulier Sébastien Roy, de qui j'ai beaucoup appris autant au niveau de la physique qu'en tant qu'être humain. Bonne continuation à toi.

Les gens du CCS qui ont su répondre à toutes mes questions très intelligemment et rapidement. Je remercie tout particulièrement Michel Barrette, qui m'a dépanné plus souvent qu'à son tour.

Je remercie ma famille : ma mère Danielle, mes frères Mathieu et Philippe (et sa compagne Sylvie), ainsi que ma petite soeur Stéphanie et mon père Yvan. Je vous aime tous énormément. Vous rendez ma vie plus belle!

Je tiens à remercier mes amis de longue date, David et Yannick, d'être là pour moi dans les moments difficiles comme dans les moments plus gais.

Je remercie les gens du département de physique en général pour avoir rendu mon passage chez vous si agréable.

Je ne veux pas oublier Sophie Roy et Martin Vincent. Vous savez pourquoi ...

Finalement, je remercie Jessica pour son soutien, son amour et son coeur énorme. Merci de m'avoir enduré tout ce temps et d'être dans ma vie. Merci pour tous nos projets à venir. Je t'aime.

Table des matières

Sommaire	iv
Table des matières	vi
Liste des figures	ix
Introduction	1
Échec de la théorie des bandes : isolants de <i>Mott</i>	1
Le modèle de <i>Hubbard</i>	2
La chaleur spécifique du modèle de <i>Hubbard</i>	4
Plan du mémoire	5
1 Méthodologie	6
1.1 Le modèle de <i>Hubbard</i> sur réseau carré	6
1.2 Le Monte Carlo quantique (MCQ)	7
1.2.1 Avantages et inconvénients de la méthode	7
1.2.2 Manipulations préalables	9
1.2.3 Procédure d'évaluation MCQ	18
1.2.4 Corrélations dans le calcul des erreurs statistiques	21
1.2.5 Autres considérations à ne pas négliger	25
1.3 Chaleur spécifique	28
1.3.1 Méthode de Liu et Alhassid	30
1.3.2 Efficacité de la nouvelle méthode	33
1.3.3 Différences finies standards : régressions ou non ? Là est la question !	35
1.3.4 Explication des régressions linéaires différentes pour les deux méthodes	41
1.4 Exploration du modèle	41

1.4.1	Comparaison des dimensions : mise à l'échelle	42
2	Chaleur spécifique (1D)	45
2.1	Cas limites	45
2.1.1	$U = 0$	47
2.1.2	$t = 0$	49
2.2	U et t finis	50
2.2.1	Fort couplage	50
2.2.2	Faible couplage	53
3	Chaleur spécifique (2D)	55
3.1	Cas limites	55
3.1.1	$U = 0$	55
3.1.2	$t = 0$	57
3.2	U et t finis	57
3.2.1	Fort couplage	59
3.2.2	Faible couplage	61
4	Crossover 1D-2D	67
4.1	Cas limites	67
4.2	U et t finis	68
	Conclusion	73
	Annexe A Trace	76
A.1	Action de l'opérateur à N -particules sur un état à une seule particule . .	76
A.2	Action de l'opérateur à N -particules sur un état à plusieurs particules . .	78
A.3	Calcul de la trace	80
	Annexe B Fonction de Green de Matsubara à une particule	82
B.1	Calcul explicite	82
B.2	Formulation matricielle	85
	Annexe C Fonctions de Green de Matsubara	87
C.1	Calcul exact	87
C.2	Théorème de Wick	88

<i>Table des matières</i>	viii
C.3 Estimateurs	89
Annexe D Dérivée par rapport à la température	90
Bibliographie	94

Liste des figures

1	Représentation visuelle du modèle de <i>Hubbard</i> sur réseau carré.	3
1.1	Configuration \mathbf{K} de champs HS discrets.	14
1.2	Idée de base derrière la méthode Monte Carlo.	18
1.3	Temps de corrélation intégré τ_{int}	23
1.4	Différentes valeurs de $\Delta\tau$, puis régression linéaire pour la méthode de Liu <i>et al.</i>	33
1.5	Comparaison entre la méthode de Liu <i>et al.</i> et la dérivée aux différences finies.	34
1.6	Énergie totale d'une chaîne de 32 sites à $U = 8$, pour différents $\Delta\tau$	35
1.7	Chaleur spécifique pour différents rapports $\frac{\Delta T}{T}$, obtenue après régression linéaire en $(\Delta\tau)^2$, à partir des mêmes données qu'à la figure 1.6.	37
1.8	Valeur des différents $(\Delta\tau)^2$ en fonction de $\text{Log}_{10}T$, pour $\Delta\tau \simeq 0.1$	39
1.9	Chaleur spécifique pour différentes valeurs de $\Delta\tau$ (c.-à-d. sans régression linéaire en $(\Delta\tau)^2$).	40
1.10	Normalisation des échelles d'énergie pour $U = 0$ pour différents $t_{\hat{y}}$	44
2.1	Relations de dispersion de spinons et holons et <i>gap</i> pour les holons à demi-remplissage.	46
2.2	Chaleur spécifique 1D sans interactions, pour différentes tailles.	48
2.3	Chaleur spécifique 1D dans la limite atomique, pour différents U	49
2.4	Chaleur spécifique 1D pour les fort et faible couplages.	50
2.5	Positions des maximums en 1D pour différentes valeurs de U	51
2.6	Chaleur spécifique 1D pour $U = 6\sqrt{2}$, c.-à-d. fort couplage.	52
2.7	Chaleur spécifique 1D pour $U = \sqrt{2}$, c.-à-d. faible couplage.	54
3.1	Chaleur spécifique 2D sans interactions, pour différentes tailles.	56

3.2	Chaleur spécifique 2D pour les fort et faible couplages.	57
3.3	Positions des maximums en 2D pour différentes valeurs de U	58
3.4	Chaleur spécifique 2D pour $U = (2)6 = 12$, c.-à-d. fort couplage.	59
3.5	Chaleur spécifique cinétique pour deux sites.	60
3.6	Représentation schématique de l'évolution de la densité d'état $\rho(\epsilon)$ vs U	61
3.7	Chaleur spécifique 2D pour $U = 2$, c.-à-d. faible couplage.	62
3.8	Moment local $\langle (S_i^z)^2 \rangle$, pour différents U	63
3.9	Comportement de la chaleur spécifique potentielle à faible couplage et basse température, en fonction de la taille.	65
4.1	Coefficient γ du terme linéaire de chaleur spécifique à basse température, pour le cas $U = 0$	68
4.2	c_V vs \tilde{T} pour $t_{\tilde{y}} = 0.4$ et $t_{\tilde{y}} = 0.6$, sur réseau 6x6, pour différents \tilde{U}	69
4.3	Moment local vs \tilde{U} et $t_{\tilde{y}}$ pour différentes tailles de réseau.	70
4.4	c_V vs \tilde{T} pour $t_{\tilde{y}} = 0.4$ et $t_{\tilde{y}} = 0.6$, sur réseaux 4x10 et 4x8 respectivement, pour différents \tilde{U}	72

Introduction

De toutes les disciplines de la physique, la physique de la matière condensée est l'une des plus riches en termes de défis pour ceux qui l'étudient. En effet, pour bien la comprendre il faut faire appel à la physique quantique, développée au siècle dernier, et traiter du comportement d'un grand nombre de particules en interaction. À cela ajoutons un traitement nécessitant l'utilisation d'outils mathématiques puissants, qui restent à être inventés dans bien des cas. Du côté expérimental, les expériences à tenter sont souvent très complexes et demandent beaucoup d'ingéniosité et de doigté. Pour ces raisons donc, le chercheur doit souvent faire preuve d'humilité et de patience et se consacrer à des problèmes plus simples et plus facilement solubles que les réels problèmes envisagés de prime abord. Parfois pourtant, même ces modèles, qui semblent un peu trop naïfs, permettent de très bien expliquer certaines propriétés des matériaux étudiés.

C'est ainsi que le calcul des structures de bandes électroniques dans les cristaux, nous permet de comprendre de façon remarquable ce qui se passe au niveau des propriétés de conduction des métaux, et ce, en négligeant des ingrédients qui semblent *a priori* importants, en l'occurrence : l'interaction électron-électron ($e-e$) (approximation des électrons indépendants)¹.

Échec de la théorie des bandes : isolants de *Mott*

Pour certains composés, la théorie des bandes, aussi sophistiquée soit-elle, n'arrive plus à rendre compte de ce qui se passe. En effet, dès 1937, elle montre ses limites : elle prédit un comportement métallique pour certains oxydes de métaux de transition, alors que l'expérience nous montre que ce sont en fait des isolants [1]. Dans la même année,

¹ En réalité, en général on peut inclure l'effet $e-e$, de sorte qu'on considère que la particule se meut dans un potentiel effectif renormalisé. Quand l'interaction devient trop grande cependant, cette technique ne suffit plus.

Sir Neville Mott [2] attribue les comportements exotiques trouvés dans ces matériaux, aux interactions électroniques qui ont été négligées lors du calcul des bandes. On appelle ces matériaux, les isolants de *Mott* (IM).

Grosso modo, dans les IM, quand l'énergie cinétique des électrons n'est pas assez grande en comparaison de l'énergie potentielle de Coulomb, pour deux électrons sur un même site², les électrons ne peuvent plus se déplacer et ont tendance à se localiser³.

Que se passe-t-il quantitativement ? Peut-on tracer un diagramme de phase à partir de vrais paramètres physiques ? Pour cela, il nous faut trouver un modèle mathématique qui rende compte de cette compétition entre l'énergie cinétique des électrons de valence et la force répulsive entre ces derniers. Cette construction existe : c'est le modèle de *Hubbard*.

Le modèle de *Hubbard*

En 1963, un modèle théorique est proposé par John Hubbard [3], qui cherche à expliquer les transitions de *Mott* (transitions *métal-isolant* émergeant de la compétition entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle des électrons dans un matériau). Si l'on choisit un hamiltonien \hat{K} (partie cinétique) qui décrit bien la bande dans laquelle devrait se produire la physique qui nous intéresse⁴, et qu'on lui adjoint une interaction de contact (deux électrons sur un même site) \hat{V} (partie potentielle), on arrive au modèle de *Hubbard* (voir figure 1) écrit dans le formalisme de la seconde quantification comme

$$\hat{H}_{\text{Hubbard}} \equiv \underbrace{- \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma})}_{\hat{K}} + U \underbrace{\sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}}_{\hat{V}}, \quad (1)$$

où les c_i^\dagger (c_i) sont les opérateurs de création (annihilation) au site i , t_{ij} est appelée *intégrale de saut* entre i et j (provient du recouvrement d'orbitales dans l'approximation des liaisons fortes)⁵, U est l'énergie d'interaction sur un site entre deux électrons et enfin $\hat{n}_{i,\sigma}$, « compte » le nombre d'électrons de spin σ au site i .

²En fait, la répulsion coulombienne peut se faire sentir entre sites voisins. La répulsion sur un même site étant la plus forte, on commence par étudier le modèle avec répulsion sur un site, puisque plus simple à résoudre *a priori*. Le modèle de *Hubbard* étendu se consacre à ces considérations.

³Les degrés de liberté de spin, eux, continuent d'interagir via un processus dit d'*échange*.

⁴Généralement, on utilise une bande de conduction obtenue dans l'approximation des *liaisons fortes*, c'est-à-dire où la conduction n'est assurée que par un léger recouvrement des orbitales atomiques en jeu.

⁵Le modèle ici présenté est en fait le modèle de Hubbard à une bande.

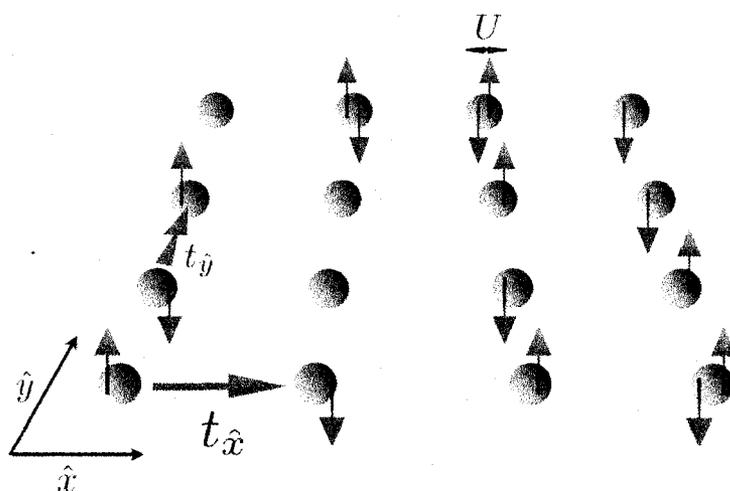


FIGURE 1: Représentation visuelle de l'équation (1.1), c.-à-d. du modèle de *Hubbard* sur réseau carré, avec sauts aux premiers voisins. Les flèches \uparrow et \downarrow représentent les électrons \uparrow et \downarrow . $t_{\hat{x}}$ est la valeur de l'intégrale de saut au premier voisin selon \hat{x} , $t_{\hat{y}}$ est la valeur de l'intégrale de saut au premier voisin selon \hat{y} et U est l'énergie associée à une double occupation (deux électrons sur un même site).

Malgré son apparente simplicité physique⁶, ce modèle reste difficile à résoudre et à comprendre. Pourtant, il est essentiel de l'étudier parce qu'on pense qu'il contient la clé du comportement des *supraconducteurs à haute température critique* (SHTC) [4, 5], des conducteurs organiques comme les sels de *Bechgaard* [6] et d'autres matériaux exotiques⁷ que les théories et méthodes conventionnelles ne peuvent expliquer, et où les corrélations électroniques ne sont pas négligeables. Dans ce travail pourtant, les températures traitées sont relativement élevées (la plus basse étant d'environ 100°K) en ce qui a trait aux SHTC par exemple ; la plupart de des matériaux « intéressants » auront subi des transitions de phase structurelles ou se seront tout simplement dégradés au-delà de quelques centaines de degrés *K*. Pour le pendant expérimental donc, il faut plutôt se tourner du côté des réseaux optiques [7], qui permettent de reconstruire le modèle de *Hubbard*, sans avoir à se soucier des contraintes imposées par le matériau, et de pouvoir faire varier ses paramètres (U , t , $t_{\hat{y}}$) continûment et aisément. L'avantage de ces systèmes est que la température n'est pas un paramètre limitant. Les températures étudiées ici sont petites par rapport à celles des réseaux optiques (en unités relatives à l'énergie de *Fermi*). Dans ces constructions donc, nous devrions pouvoir observer les conclusions qu'on aura tirées de ce travail.

La chaleur spécifique du modèle de *Hubbard*

La chaleur spécifique à volume constant (notée c_V) a toujours été une mesure de choix pour les expérimentateurs, parce que typiquement facile à obtenir à partir de la chaleur spécifique à pression constante c_P ⁸. Il semble donc judicieux d'en faire l'étude pour notre modèle afin de pouvoir établir un lien plus direct entre théorie et expérience⁹. Or, la chaleur spécifique du modèle de *Hubbard* demi-rempli, avec sauts aux premiers voisins, sur réseau carré montre un comportement différent selon que l'on étudie les cas *unidimensionnel* (1D) ($t_{\hat{y}} = 0$) [8, 9] ou *bidimensionnel* (2D) ($t_{\hat{y}} = 1$) [10, 11], à savoir l'apparition d'une bosse supplémentaire à faible U et basse température dans le cas 2D.

⁶C'est le modèle le plus simple qui tienne compte des fortes corrélations électroniques.

⁷On parle parfois de matériaux quantiques, même si c'est un abus de langage puisque tous les matériaux sont quantiques.

⁸En pratique, c'est c_P , la chaleur spécifique à pression constante qui est obtenue, mais on peut en extraire la chaleur spécifique à volume constant avec le coefficient de dilatation thermique (qui s'annule dans la limite $T=0$) et la compressibilité (formule de Robert-Mayer).

⁹Notons que dans le modèle de *Hubbard*, c'est la chaleur spécifique électronique qu'on mesure. Dans l'expérience, il faut soustraire la contribution à la chaleur spécifique provenant des phonons.

Plan du mémoire

Dans ce mémoire, nous présentons une étude du modèle de *Hubbard* sur réseau carré, avec sauts aux premiers voisins, du point de vue de la chaleur spécifique à remplissage fixe (demi-remplissage), en fonction de la température.

Dans le chapitre 1, nous présentons la méthode MCQ ainsi qu'une nouvelle technique de calcul de la chaleur spécifique, qui vise à réduire le bruit statistique obtenu avec les techniques conventionnelles de calcul. Nous comparons ensuite cette méthode aux méthodes déjà utilisées dans la littérature. De plus, nous traitons de quelques détails importants qu'il est nécessaire de connaître, lorsqu'on procède aux simulations elles-mêmes, mais aussi au moment de faire l'analyse des résultats recueillis.

Dans le chapitre 2, nous abordons le cas *unidimensionnel* et expliquons les structures présentes dans les divers régimes de paramètres étudiés.

Dans le chapitre 3, on étudie le cas *bidimensionnel* et on comprend pourquoi, en employant la règle de somme sur le *moment local* utilisée dans la technique *autocohérente à deux particules* (ACDP) [12], la présence du deuxième pic peut être attribuée au fait que la longueur de corrélation antiferromagnétique ξ_{AF} est plus grande que la longueur de corrélation de *de Broglie* pour les quasiparticules dans un liquide de *Fermi* conventionnel.

Dans le chapitre 4 finalement, on fait passer continûment le système d'un régime 1D à un régime 2D en faisant varier le paramètre d'anisotropie $t_{\hat{y}}$ de 0 à 1. On appelle *crossover* 1D-2D, le point $t_{\hat{y}}$ du diagramme de phase $t_{\hat{y}} - U$ où apparaît la deuxième bosse de la chaleur spécifique.

Chapitre 1

Méthodologie

1.1 Le modèle de *Hubbard* sur réseau carré

L'équation (1) est générale et ne nous dit rien quant à la dimensionnalité ou à la symétrie du réseau. Pour un réseau carré en deux dimensions avec intégrale de saut aux premiers voisins (et conditions aux limites périodiques), tel que représenté à la figure 1, on trouve

$$\hat{H} \equiv \underbrace{- \sum_{\substack{i,\sigma \\ \hat{e}=\hat{x},\hat{y}}}^{K} [t_{\hat{e}} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+\hat{e},\sigma} + c_{i+\hat{e},\sigma}^\dagger c_{i,\sigma})]} + U \underbrace{\sum_i [\hat{n}_{i,\uparrow} - \frac{1}{2}] [\hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{1}{2}]}_{\hat{V}}, \quad (1.1)$$

où $t_{\hat{e}}$ est l'intégrale de saut aux premiers voisins dans la direction $\hat{e} = \hat{x}, \hat{y}$ ^{1,2}. Notons ici que l'équation précédente diffère de l'équation (1) par un simple recalage du potentiel chimique. Le modèle de *Hubbard* sur réseau bipartite possède en effet la propriété d'être invariant sous transformation *particule-trou* (symétrie *particule-trou*), c.-à-d que les calculs de valeurs moyennes, effectués sur le système constitué d'électrons, donneront les mêmes résultats que le système où les trous et les électrons sont intervertis. On peut montrer que pour l'équation (1) (où le terme cinétique est le même que pour (1.1)), le demi-remplissage se situe à $\mu = \frac{U}{2}$ et dépend donc de la force d'interaction. En récrivant l'équation (1) comme (1.1), on opère seulement une translation du potentiel chimique, ce qui n'affecte en rien les propriétés thermodynamiques du système, mais nous permet

¹À partir d'ici, « modèle de *Hubbard* » désignera l'équation (1.1).

²À moins d'avis contraire, $t_{\hat{e}}$ est fixée à 1.

de fixer le demi-remplissage à $\mu = 0$.

On veut maintenant obtenir lesdites propriétés thermodynamiques du modèle, ce qui se traduit par la trace d'un opérateur \hat{O} et de la matrice densité dans le problème. Autrement dit, on veut résoudre l'équation suivante :

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{n})} \hat{O} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{n})} \right]}, \quad (1.2)$$

où $\beta = 1/k_B T$ (T étant la température du système et k_B la constante de Boltzmann)³, \hat{H} est le hamiltonien du système, \hat{n} est l'opérateur nombre qui « compte » le nombre de particules contenues dans un état en tout et partout et μ , enfin, est le potentiel chimique qui nous rappelle que nous travaillons dans l'ensemble grand canonique.

1.2 Le Monte Carlo quantique (MCQ)

Il existe aujourd'hui plusieurs méthodes théoriques (analytiques ou numériques) permettant d'obtenir diverses réponses aux problèmes que pose l'étude des électrons corrélés (voir entre autres la référence [13] à ce sujet). Celle que nous avons choisie est une méthode *Monte Carlo quantique*⁴ (MCQ), basée sur l'algorithme BSS du nom de ses inventeurs Blankenbecler, Sugar et Scalapino [14]⁵. L'algorithme a par la suite été adapté par Hirsch [15–17] (BSSH) pour être utilisé avec le hamiltonien de *Hubbard*.

1.2.1 Avantages et inconvénients de la méthode

Malheureusement, aucune méthode théorique n'est parfaite. Elles ont toutes leur forces et leur faiblesses. Le MCQ ne fait pas exception à la règle et ses particularités sont les suivantes :

³On choisit le système d'unités tel que $k_B = 1$ tout au long de la discussion.

⁴L'épithète « quantique » vient de ce qu'on travaille avec des fermions qui induisent des densités de probabilité parfois négatives qu'on ne retrouve pas dans les algorithmes de Monte Carlo conventionnels (classiques). Cette particularité est à l'origine du fameux *problème de signe*, dont on discutera à la page 25.

⁵On l'appelle souvent l'algorithme du *déterminant* (*Determinantal Quantum Monte Carlo*), pour des raisons qui deviendront claires dans la partie 1.2.2.

Avantages

- Le temps de calcul nécessaire pour obtenir une valeur acceptable d’une observable choisie est proportionnel à $N^3 N_\tau$ (N étant le nombre de sites du système étudié et N_τ , le nombre de tranches de temps imaginaire dans la décomposition de *Trotter-Suzuki*, dont on parlera plus tard.), comparativement à une croissance exponentielle pour ce qui est des diagonalisations exactes (DE).
- Le programme requiert peu de mémoire puisque, contrairement aux DE, il n’est pas nécessaire de mémoriser l’espace des états du système pour procéder aux calculs.
- La méthode est exacte⁶, mises à part les erreurs statistiques qui nous donnent une valeur d’incertitude sur la mesure que nous cherchons.

Inconvénients

- Hors demi-remplissage ($\langle \hat{n}_i \rangle = 1$), des problèmes surviennent (*problème de signe* qui croît exponentiellement avec l’inverse de la température et la taille. On veut dire ici qu’à mesure que ces paramètres augmentent, il faut accroître le nombre de mesures à prendre de manière exponentielle pour arriver aux mêmes résultats que pour des paramètres plus petits.) qui nous font perdre les avantages de croissance polynomiale propres au MCQ.
- Somme toute, les réseaux qu’on parvient à examiner sont assez petits. Pour T (température) et U (interaction sur un site) faibles, la limite thermodynamique n’est en général pas atteinte, c’est-à-dire que les valeurs calculées de certaines quantités intensives varient en fonction de la taille.

On peut cependant réduire l’impact des inconvénients en nous limitant tout d’abord à l’examen du demi-remplissage (nous étudions strictement le demi-remplissage!). On s’affranchit de cette façon du *problème de signe*. Pour ce qui est de l’obtention de la limite thermodynamique, un calcul des quantités pour $U = 0$ nous donne une certaine idée de la taille que le système doit avoir pour que les quantités calculées deviennent indépendantes de cette dernière⁷. Des simulations MCQ pour différentes valeurs de N doivent être effectuées quand $U \neq 0$.

On se convainc donc ainsi que le MCQ est une méthode appropriée pour réaliser l’étude que nous voulons faire du modèle de *Hubbard*.

⁶Nous verrons qu’il survient aussi une erreur systématique (1.9), qui peut cependant être contournée (voir note de bas de page numéro 10 à la page 10).

⁷Bien sûr, la taille requise augmente quand on diminue la température.

1.2.2 Manipulations préalables

Avant de pouvoir appliquer l'algorithme BSSH, l'expression (1.2) doit subir quelques transformations qui la rendront concrètement utilisable.

Décomposition de Trotter

La première étape consiste en une simple réécriture de l'opérateur à *N-Corps*

$$e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})}, \quad (1.3)$$

qu'on retrouve dans l'équation (1.2). En effet, en définissant $\Delta\tau \equiv \frac{\beta}{N_\tau}$, on écrit⁸

$$e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})} = e^{-\frac{\beta}{N_\tau} \sum_{l=1}^{N_\tau} (\hat{H}-\mu\hat{n})_l} = e^{-\Delta\tau \sum_{l=1}^{N_\tau} (\hat{H}-\mu\hat{n})_l}. \quad (1.4)$$

Comme le hamiltonien commute avec lui-même, on peut finalement écrire

$$e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})} = \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau(\hat{H}-\mu\hat{n})_l}. \quad (1.5)$$

Si l'on écrit $(\hat{H} - \mu\hat{n})_l = \hat{K}_l + \hat{V}_l$, dans (1.5), où $[\hat{K}_l, \hat{V}_l] \neq 0$, on a

$$\prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau(\hat{H}-\mu\hat{n})_l} = \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau(\hat{K}_l + \hat{V}_l)} \quad (1.6)$$

et

$$\lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau(\hat{K}_l + \hat{V}_l)} = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau\hat{K}_l} e^{-\Delta\tau\hat{V}_l}. \quad (1.7)$$

Cette relation constitue une *décomposition de Trotter* [18], et elle est exacte quand $\Delta\tau$ tend vers 0. Quand $\Delta\tau \neq 0$ mais est quand même petit (N_τ suffisamment grand), la formule de *Zassenhaus* [19, 20] nous permet de dire que

$$e^{-\Delta\tau(\hat{K}_l + \hat{V}_l)} \simeq e^{-\Delta\tau\hat{K}_l} e^{-\Delta\tau\hat{V}_l} + O((\Delta\tau)^2). \quad (1.8)$$

En insérant l'expression (1.8) dans l'équation (1.5) et en substituant ce nouvel opé-

⁸La signification de l'indice l deviendra claire plus tard.

rateur à (1.3) dans l'équation (1.2), on peut montrer [21] que

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\text{Tr} \left[\prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau \hat{K}_l} e^{-\Delta\tau \hat{V}_l} \hat{O} \right]}{\text{Tr} \left[\prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau \hat{K}_l} e^{-\Delta\tau \hat{V}_l} \right]} + O(\Delta\tau^2). \quad (1.9)$$

Il est à noter que l'erreur d'ordre $O((\Delta\tau)^2)$ dans la dernière expression est la *seule* erreur systématique contenue dans le Monte Carlo quantique⁹ ! Même cette difficulté, pourtant, pourra être écartée en effectuant des simulations sur plusieurs valeurs différentes de $\Delta\tau$, et en procédant à une régression linéaire en $(\Delta\tau)^2$ ¹⁰.

Transformation de *Hubbard-Stratonovitch* (HS)

À partir d'ici nous devenons plus spécifiques et, introduisant l'équation (1.1), on écrit¹¹

$$\begin{aligned} (\hat{H} - \mu \hat{n})_l \equiv & \overbrace{\left(- \sum_{\substack{i,\sigma \\ \hat{e}=\hat{x},\hat{y}}} [t_{\hat{e}} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+\hat{e},\sigma} + c_{i+\hat{e},\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - \mu \hat{n}_{i,\sigma}] \right)}^{\hat{K}_l} \\ & + \underbrace{\left(U \sum_i \left[\hat{n}_{i,\uparrow} - \frac{1}{2} \right] \left[\hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{1}{2} \right] \right)}_{\hat{V}_l} \end{aligned} \quad (1.10)$$

⁹Ce résultat est surprenant. *A priori*, on serait tenté de croire que l'erreur systématique est en $(\Delta\tau)$ puisqu'il y a $N_\tau = \frac{\beta}{\Delta\tau}$ facteurs d'impliqués lorsqu'on utilise (1.5). Cependant, le terme linéaire en $\Delta\tau$ s'annule puisqu'il provient d'une trace faite sur un opérateur anti-hermitien (trace sur des termes diagonaux nuls). Pour la preuve détaillée, voir [21].

¹⁰ Cela dit, dans bien des contextes, on ne cherche pas à obtenir une très grande précision, mais plutôt une idée générale du résultat ; pour une courbe par exemple. Dans de tels cas, on se contente d'avoir une erreur statistique, c'est-à-dire dictée par le nombre de mesures prises, du même ordre de grandeur que l'erreur systématique.

¹¹Notons qu'on inclut le potentiel chimique dans le terme \hat{K}_l alors qu'il n'était pas présent dans l'équation (1.1).

Les exponentielles des deux opérateurs sont

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\tau\hat{K}_l} &= e^{-\Delta\tau\left(\sum_{i,\sigma}[-t_x(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+x,\sigma} + c_{i+x,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - t_y(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+y,\sigma} + c_{i+y,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - \mu\hat{n}_{i,\sigma}]\right)_l} \\
&= \prod_{\sigma=\pm} \underbrace{e^{-\Delta\tau\left(\sum_i[-t_x(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+x,\sigma} + c_{i+x,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - t_y(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+y,\sigma} + c_{i+y,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - \mu\hat{n}_{i,\sigma}]\right)_l}}_{e^{-\Delta\tau\hat{K}_{\sigma,l}}}
\end{aligned} \tag{1.11}$$

et

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\tau\hat{V}_l} &= e^{-\Delta\tau\sum_i \overbrace{\left(U\left[\hat{n}_{i,\uparrow} - \frac{1}{2}\right]\left[\hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{1}{2}\right]\right)}^{\hat{V}_{i,l}}}_l \\
&\equiv \prod_i^N e^{-\Delta\tau\hat{V}_{i,l}}
\end{aligned} \tag{1.12}$$

L'identité (1.12) est *quartique*¹² en opérateurs fermioniques. Une transformation dite de *Hubbard-Stratonovitch* (HS) nous permet de découpler ces opérateurs fermioniques en introduisant des variables supplémentaires ou champs « classiques »¹³.

Concrètement, on procède comme suit : On découple le terme quartique (1.12) en introduisant une fonction $P(x_\nu)$, choisie paire en x_ν , telle que^{14,15}

$$e^{-\Delta\tau\hat{V}_\nu} = \begin{cases} e^{-\Delta\tau\frac{|U|}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{x_\nu(\hat{n}_{i,\uparrow} - \hat{n}_{i,\downarrow})} P(x_\nu) dx_\nu, & U > 0 \\ e^{-\Delta\tau\frac{|U|}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{x_\nu(\hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow} - 1)} P(x_\nu) dx_\nu, & U < 0 \end{cases} \tag{1.13}$$

Cette fonction doit respecter les conditions obtenues en substituant, dans (1.13), les n_\uparrow et n_\downarrow correspondant à chacune des quatre configurations électroniques possibles sur un même site. On obtient alors

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x_\nu) dx_\nu = 1 \qquad \int_{-\infty}^{\infty} P(x_\nu) \cosh x_\nu dx_\nu = e^{\Delta\tau\frac{|U|}{2}}. \tag{1.14}$$

Un choix qui répond à ces critères et qui a l'avantage de bien se prêter aux calculs

¹²Qui contient 4 opérateurs.

¹³« Classiques », puisque ces variables commutent entre elles, contrairement aux opérateurs de champs fermioniques.

¹⁴ $\nu = i, l$ symbolisent les coordonnées d'espace et de temps imaginaire.

¹⁵On remarque à l'équation (1.13) qu'on passe le l , qui affectait notre exponentielle depuis le début, au seul champ x . En effet, l en tant qu'indice de n , ne sert à rien dans l'évaluation de la trace.

numériques est celui de Hirsch [15, 16], soit

$$P(x_\nu) \equiv \frac{1}{2} \sum_{k=\pm 1} \delta(x_\nu - k_\nu \lambda). \quad (1.15)$$

Ce qui donne pour λ :

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

De l'équation (1.16), on peut extraire λ et obtenir

$$\lambda = \ln \left[e^{\Delta\tau \frac{|U|}{2}} + \sqrt{e^{\Delta\tau |U|} - 1} \right]. \quad (1.17)$$

Donc, en substituant l'équation (1.17) dans (1.15) et finalement dans l'équation (1.13), on trouve

$$e^{-\Delta\tau \hat{V}_\nu} = \begin{cases} C_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{x_\nu(\hat{n}_{i,\uparrow} - \hat{n}_{i,\downarrow})} \sum_{k_\nu=\pm 1} \delta(x_\nu - k_\nu \lambda) dx_\nu, & U > 0 \\ C_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{x_\nu(\hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow} - 1)} \sum_{k_\nu=\pm 1} \delta(x_\nu - k_\nu \lambda) dx_\nu, & U < 0 \end{cases}, \quad (1.18)$$

où $C_0 \equiv \frac{e^{-\Delta\tau \frac{|U|}{4}}}{2}$. Refaire l'intégrale précédente et y substituer explicitement λ (équation (1.16)) fait disparaître les x_ν et nous redonne le terme quartique de départ.

Après toutes ces opérations, on peut donc écrire¹⁶

$$e^{-\Delta\tau(\hat{H} - \mu\hat{n})l} \simeq e^{-\Delta\tau \hat{K}} e^{-\Delta\tau \hat{V}_l} \simeq \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}_l g(\mathbf{x}_l) S(\mathbf{x}_l) \prod_{\sigma=\pm} \hat{B}^\sigma(\mathbf{x}_l) \quad (1.19)$$

avec

$$g(\mathbf{x}_l) = C \sum_{\mathbf{k}_l} \delta(\mathbf{x}_l - \mathbf{k}_l \lambda), \quad (1.20)$$

$$\hat{B}^\sigma(\mathbf{x}_l) \equiv \begin{cases} e^{-\Delta\tau \hat{K}_\sigma} e^{\sigma \mathbf{c}_\sigma^\dagger \cdot \text{diag}\{\mathbf{x}_l\} \cdot \mathbf{c}_\sigma}, & U > 0 \\ e^{-\Delta\tau \hat{K}_\sigma} e^{\mathbf{c}_\sigma^\dagger \cdot \text{diag}\{\mathbf{x}_l\} \cdot \mathbf{c}_\sigma}, & U < 0 \end{cases} \quad (1.21)$$

et

$$S(\mathbf{x}_l) \equiv \begin{cases} 1, & U > 0 \\ e^{-\text{Tr}[\text{diag}\{\mathbf{x}_l\}]}, & U < 0 \end{cases} \quad (1.22)$$

¹⁶Nous avons retiré la dépendance en l sur l'opérateur \hat{K} , puisque c'est un opérateur à un corps non affecté par la transformation HS. Cet opérateur reste le même pour toutes les tranches de temps.

Sous cette nouvelle forme, nous avons introduit $C \equiv (C_0)^N$, $\mathbf{x}_l \equiv (x_{1,l}, x_{2,l}, \dots, x_{N,l})$, un vecteur contenant les valeurs des champs HS, à chaque site d'espace i , pour une tranche de temps donnée l (même chose pour \mathbf{k}_l); $\text{diag}\{\mathbf{x}_l\}$ est une matrice diagonale telle que $(\text{diag}\{\mathbf{x}_l\})_{i,i} = (\mathbf{x}_l)_i$; et σ , enfin, est un indice de spin pouvant prendre les valeurs « + » ou « - » (spin \uparrow ou \downarrow).^{17,18}

On retrouve l'opérateur original en faisant le produit sur les l de l'expression (1.19), de sorte que

$$e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})} \simeq \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left[\prod_{l'=1}^{N_\tau} d\mathbf{x}_{l'} \right]}_{\equiv d\mathbf{X}} \underbrace{\left[\prod_{l''=1}^{N_\tau} g(\mathbf{x}_{l''}) \right]}_{\equiv g(\mathbf{X})} \underbrace{\left[\prod_{l'''=1}^{N_\tau} S(\mathbf{x}_{l'''}) \right]}_{\equiv S(\mathbf{X})} \prod_{\sigma=\pm} \underbrace{\left[\prod_{l=1}^{N_\tau} \hat{B}^\sigma(\mathbf{x}_l) \right]}_{\equiv \hat{U}_\sigma[N_\tau;0](\mathbf{X})}, \quad (1.23)$$

où nous avons découpé les opérateurs appartenant à chaque valeur de spin (\uparrow et \downarrow) puisqu'ils commutent entre eux. De plus, nous avons introduit une nouvelle variable \mathbf{X} , telle que $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_l, \dots, \mathbf{x}_{N_\tau})$, correspond à la configuration totale des champs HS pour toutes les tranches de temps simultanément.

Plus important encore, nous avons fait appel à un nouvel opérateur $\hat{U}_\sigma[N_\tau;0](\mathbf{X})$, qu'on nomme opérateur d'évolution dans le *temps imaginaire* du temps $\tau = 0$ au temps $\tau = N_\tau$, pour un spin σ et une variable \mathbf{X} donnés.

Identification de la valeur moyenne

En insérant l'expression finale de l'opérateur (1.23) dans l'expression (1.9), on a

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(\mathbf{X}) \prod_{\sigma=\pm} \text{Tr}_\sigma \left[[\hat{U}_\sigma[N_\tau;0](\mathbf{X})] \hat{O}^\sigma \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(\mathbf{X}) \prod_{\sigma=\pm} \text{Tr}_\sigma \left[\hat{U}_\sigma[N_\tau;0](\mathbf{X}) \right]}, \quad (1.24)$$

où la trace a été passée à l'intérieur de l'intégration puisque les opérateurs se trouvent à la fin de l'équation seulement. Nous avons aussi découpé les traces sur les spins \uparrow et \downarrow puisque les opérateurs correspondants commutent. En réarrangeant l'équation précé-

¹⁷La notation vectorielle utilisée est $\mathbf{c}_\sigma^\dagger = (c_{1,\sigma}^\dagger, c_{2,\sigma}^\dagger, \dots, c_{N,\sigma}^\dagger)$ ($\mathbf{c}_\sigma = (c_{1,\sigma}, c_{2,\sigma}, \dots, c_{N,\sigma})$)

¹⁸ Nous avons défini l'identité $\prod_i \sum_{k_{i,l}=\pm 1} \delta(x_{i,l} - k_{i,l}\lambda) \equiv \sum_{\mathbf{k}_l} \delta(\mathbf{x}_l - \mathbf{k}_l\lambda)$, pour expliciter le produit des deltas de *Dirac* dans (1.19).

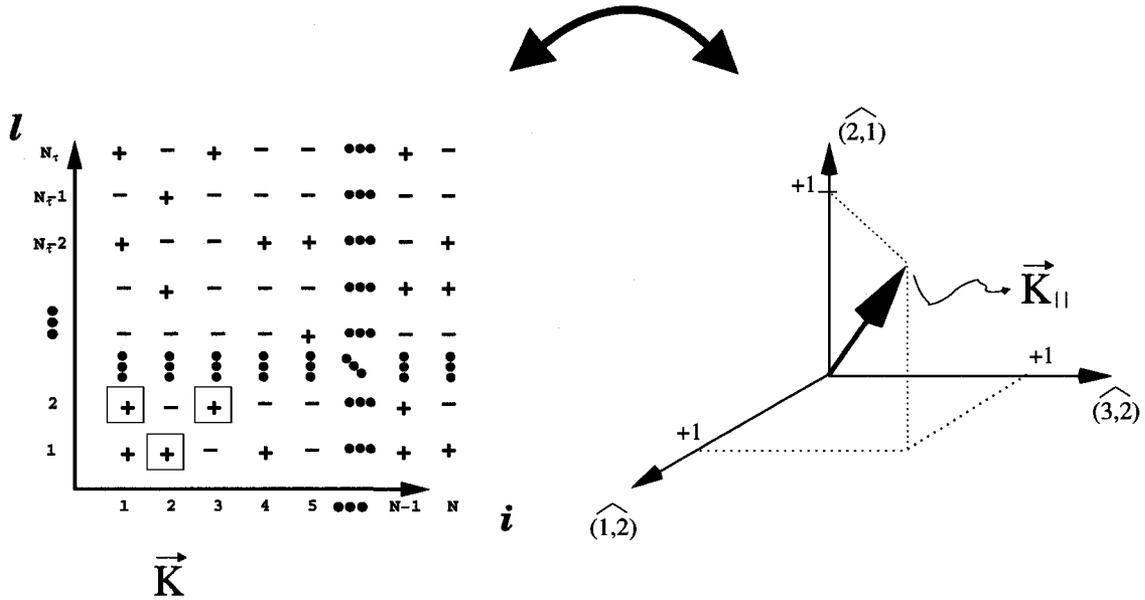


FIGURE 1.1: Configuration \mathbf{K} de champs HS discrets. Ici, \mathbf{K}_{\parallel} correspond à une projection de \mathbf{K} de l'espace $N-N_\tau$ -dimensionnel sur l'hyperplan décrit par les vecteurs $(\widehat{1,2}), (\widehat{2,1})$ et $(\widehat{3,2})$, de forme $(\widehat{i,l})$, où i est l'indice de position et l est l'indice de temps imaginaire. $\mathbf{K} = \mathbf{K}_{\parallel} + \mathbf{K}_{\perp}$, où \mathbf{K}_{\perp} est la composante de \mathbf{K} perpendiculaire à cet hyperplan. Les coordonnées de \mathbf{K}_{\parallel} dans l'hyperplan sont encadrées dans la figure de gauche. Dans le cas où les champs peuvent prendre des valeurs continues, à la place des \pm dans la figure de gauche, on aurait $|\mathbf{K}_{it}| < \infty$, avec une distribution gaussienne.

dente, on trouve

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(\mathbf{X}) \prod_{\sigma=\pm} \text{Tr}_{\sigma} [\hat{U}_{\sigma} [N_{\tau}; 0] (\mathbf{X})] \overbrace{\left\{ \frac{\text{Tr}_{\sigma} [\hat{U}_{\sigma} [N_{\tau}; 0] (\mathbf{X}) O^{\sigma}]}{\text{Tr}_{\sigma} [\hat{U}_{\sigma} [N_{\tau}; 0] (\mathbf{X})]} \right\}}^{O^{\sigma}(\mathbf{X})}}}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(\mathbf{X}) \prod_{\sigma=\pm} \text{Tr}_{\sigma} [\hat{U}_{\sigma} [N_{\tau}; 0] (\mathbf{X})]} . \quad (1.25)$$

Les annexes A, B et C nous permettent de calculer la trace et d'écrire la dernière expression comme

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(\mathbf{X}) \prod_{\sigma'=\pm} \overbrace{\det [\mathcal{G}^{\sigma'} (\mathbf{X})^{-1}]}^{\equiv f(\mathbf{X})} \prod_{\sigma=\pm} \overbrace{O^{\sigma}(\mathbf{X})}^{\equiv O(\mathbf{X})}}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(\mathbf{X}) \underbrace{\prod_{\sigma'=\pm} \det [\mathcal{G}^{\sigma'} (\mathbf{X})^{-1}]}_{f(\mathbf{X})}} , \quad (1.26)$$

où $\mathcal{G}^{\sigma}(\mathbf{X})$ est une matrice $NN_{\tau} \times NN_{\tau}$ contenant les valeurs de

$$\mathcal{G}_{ij}^{\sigma}(l_1, l_2) \equiv \begin{cases} \langle c_{i,\sigma}(l_1) c_{j,\sigma}^{\dagger}(l_2) \rangle, & (l_1 > l_2) \\ -\langle c_{j,\sigma}^{\dagger}(l_2) c_{i,\sigma}(l_1) \rangle, & (l_2 > l_1) \end{cases} , \quad (1.27)$$

la fonction de *Green* de *Matsubara*¹⁹ à une particule évaluée pour une configuration de champ \mathbf{X} donnée. Dans l'équation (1.27),

$$c_i(l_1) = \hat{U}[0; l_1] c_i \hat{U}[l_1; 0] \quad (1.28a)$$

$$c_j^{\dagger}(l_2) = \hat{U}[0; l_2] c_j^{\dagger} \hat{U}[l_2; 0] , \quad (1.28b)$$

où l_1 et l_2 sont les indices de temps imaginaire associés aux opérateurs de création et d'annihilation évoluant dans le temps²⁰. La matrice \mathcal{G}^{σ} quant à elle est explicitement donnée à la fin de l'annexe C.

L'équation (1.26) n'est autre que la définition de l'espérance mathématique de $O(\mathbf{X})$

¹⁹Dans (1.27), la moyenne $\langle \dots \rangle$ dénote la trace à une particule pour une valeur de champ HS fixée. Certaines propriétés des fonctions de *Green*, comme par exemple l'invariance sous translation du temps, ne sont pas respectées dans les fonctions définies ici.

²⁰Dans (1.28), $\hat{U}[l_1; 0] \equiv \hat{U}[l_1; 0] (\{\mathbf{x}_{1_1}, \mathbf{x}_{1_1-1}, \dots, \mathbf{x}_1\})$.

pour une densité de probabilité (non normalisée) $f(\mathbf{X})$

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} f(\mathbf{X}) O(\mathbf{X})}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} f(\mathbf{X})}. \quad (1.29)$$

Ou presque . . . En effet, pour que cette façon de voir les choses puisse fonctionner, il faut que $f(\mathbf{X}) \geq 0$. Or, dans le cas des fermions, le déterminant de la fonction de *Green* à une particule peut être plus petit que 0 ²¹.

On peut corriger ce problème en introduisant $f(\mathbf{X}) = \underbrace{|f(\mathbf{X})|}_{p(\mathbf{X})} \overbrace{\frac{f(\mathbf{X})}{|f(\mathbf{X})|}}^{s(\mathbf{X})}$, avec $p(\mathbf{X})$, une densité de probabilité toujours positive²² et $s(\mathbf{X})$, le signe du produit des déterminants de (1.26).

L'équation (1.26) peut donc être réécrite comme

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X}) [s(\mathbf{X}) O(\mathbf{X})]}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X}) [s(\mathbf{X})]}. \quad (1.30)$$

Si l'on divise le numérateur et le dénominateur de la dernière expression par $\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X})$, on obtient

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\overbrace{\left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X}) [s(\mathbf{X}) O(\mathbf{X})]}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X})} \right]}^{\equiv O}}{\underbrace{\left[\frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X}) [s(\mathbf{X})]}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X})} \right]}_{\equiv Z}}. \quad (1.31)$$

où O est la moyenne de $s(\mathbf{X})O(\mathbf{X})$ sur toutes les configurations de champs HS et Z est la moyenne de $s(X)$ sur ces mêmes configurations de champ. Cette dernière équation est un quotient d'expressions de la forme (1.29), avec des poids positifs cette fois-ci. Comme

²¹En fait, c'est le produit des déterminants pour les spins \uparrow et \downarrow qui ne doit jamais être plus petit que 0. Dans le modèle de Hubbard, quand $U < 0$ ou que le système est demi-rempli et présente une symétrie particule-trou, on peut montrer que ce produit est toujours positif et donc que le problème ne se pose pas.

²²Notons que $p(\mathbf{X})$ est une densité de probabilité non normalisée.

les expressions (1.30) et (1.31) sont équivalentes nous poursuivrons la discussion avec la plus compacte.

Concrètement, avec la transformation discrète de Hirsch, on se sert des définitions (1.20) et (1.22) (avec l'identité donnée dans la note de bas de page numéro 18, page 13) pour obtenir

$$g(\mathbf{X}) = \prod_{l=1}^{N_\tau} g(\mathbf{x}_l) = Cste \times \sum_{\mathbf{K}} \delta(\mathbf{X} - \mathbf{K}\lambda) \quad (1.32)$$

et

$$S(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1, & U > 0 \\ e^{-\text{Tr}[\text{diag}\{\mathbf{X}\}]}, & U < 0 \end{cases} \quad (1.33)$$

avec \mathbf{K} un vecteur analogue au vecteur \mathbf{k}_l dans (1.20), mais pour toutes les tranches de temps cette fois.

On introduit ces nouvelles expressions dans (1.26), ce qui nous donne

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \begin{cases} \frac{\sum_{\mathbf{K}} \left| \prod_{\sigma'} \det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma'}(\lambda)^{-1}] \right| \prod_{\sigma} [s\{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)^{-1}]\} O_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)]}{\sum_{\mathbf{K}} \left| \prod_{\sigma'} \det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma'}(\lambda)^{-1}] \right| \prod_{\sigma} [s\{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)^{-1}]\}]}, & U > 0 \\ \frac{\sum_{\mathbf{K}} \left| e^{-\lambda \text{Tr}[\text{diag}\{\mathbf{X}\}]} \prod_{\sigma'} \det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma'}(\lambda)^{-1}] \right| \prod_{\sigma} [s\{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)^{-1}]\} O_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)]}{\sum_{\mathbf{K}} \left| e^{-\lambda \text{Tr}[\text{diag}\{\mathbf{X}\}]} \prod_{\sigma'} \det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma'}(\lambda)^{-1}] \right| \prod_{\sigma} [s\{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)^{-1}]\}]}, & U < 0 \end{cases} \quad (1.34)$$

Dans ce cas, la distribution de probabilité non normalisée est elle-même discrète et nous permet d'écrire (1.30) comme

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\overbrace{\sum_{\mathbf{K}} p_{\mathbf{K}}(\lambda) [s_{\mathbf{K}}(\lambda) O_{\mathbf{K}}(\lambda)]}^{\equiv O}}{\underbrace{\sum_{\mathbf{K}} p_{\mathbf{K}}(\lambda) [s_{\mathbf{K}}(\lambda)]}_{\equiv Z}} \quad (1.35)$$

avec

$$p_{\mathbf{K}} \equiv \begin{cases} \left| \prod_{\sigma'} \det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma'}(\lambda)^{-1}] \right|, & U > 0 \\ \left| e^{-\lambda \text{Tr}[\text{diag}\{\mathbf{K}\}]} \prod_{\sigma'} \det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma'}(\lambda)^{-1}] \right|, & U < 0 \end{cases} \quad (1.36)$$

Le progrès fait, comme nous l'avons mentionné un peu plus tôt, est d'avoir découplé les deux traces sur les spins de sorte que, de manière effective, on peut traiter deux systèmes sans interaction qui interagissent entre eux via les champs HS. Cela nous permet ainsi d'évaluer les quantités voulues en nous servant du théorème de *Wick* ((C.5) de l'annexe

C). Or, dans le cas de (1.35), la somme, pour être exacte, doit être faite sur l'ensemble des configurations de champs. Autrement dit, on doit sommer sur les 2^{NN_r} vecteurs \mathbf{K} . C'est trop long! On réalise toutefois que la forme de (1.35) ou (1.30) se prête à la procédure d'évaluation Monte Carlo, comme nous le voyons dans ce qui suit.

1.2.3 Procédure d'évaluation MCQ

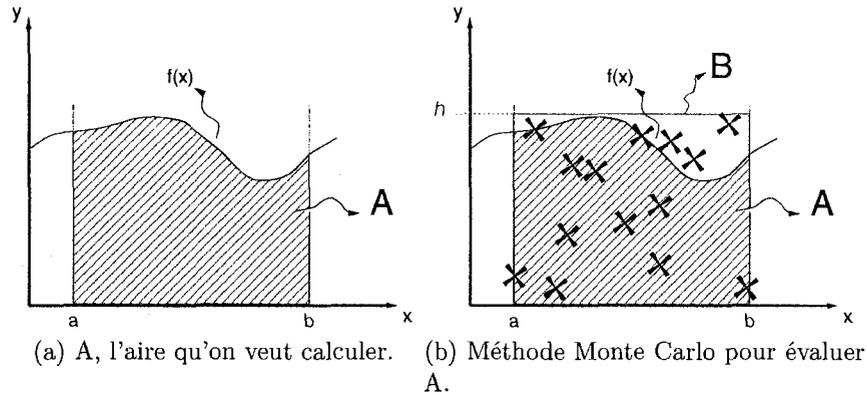


FIGURE 1.2: Idée de base derrière la méthode Monte Carlo. On cherche l'aire de la région A . On choisit aléatoirement des points appartenant à la la région B . Après 14 points, le rapport $\frac{A}{B} = \frac{9}{14}$. Plus on utilise un grand nombre de points, plus le rapport sera près de la valeur exacte. En multipliant la valeur de $B = (b - a)h$ par le rapport obtenu on trouve l'aire de A .

La figure 1.2 représente bien l'idée de base derrière les méthodes Monte Carlo. Plus généralement, considérons l'expression

$$\langle g(x) \rangle = \frac{\int dx f(x)g(x)}{\int dx f(x)}. \quad (1.37)$$

Dans la forme la plus basique du Monte Carlo, on procède par échantillonnage direct (*direct sampling*), c.-à-d. qu'on effectue une transformation nous permettant de générer une relation bijective entre une densité de probabilité uniforme et une densité de probabilité $f(x)$ quelconque, de façon à ce que des nombres aléatoires tirés de la densité de probabilité uniforme nous permettent d'échantillonner correctement la densité de probabilité $f(x)$ ²³. Les N valeurs de x_i tirées de $f(x)$ sont toutes *indépendantes* (c.-à-d. qu'il n'y

²³Pour une discussion détaillée sur le sujet, le lecteur est référé à [22], où l'on traite plus amplement de la méthode *Monte Carlo* en général.

pas de relation qui permette de générer un nombre à partir du nombre tiré juste avant), si les nombres aléatoires tirés au départ sont eux-mêmes indépendants. On peut par la suite estimer la valeur de l'intégrale (1.37) par

$$\langle g(x) \rangle = \frac{\int dx f(x) g(x)}{\int dx f(x)} \simeq \frac{1}{N} \sum_i^N g(x_i). \quad (1.38)$$

Or, pour utiliser la méthode de l'échantillonnage direct on doit pouvoir intégrer $f(x)$ (au moins numériquement), pour pouvoir normaliser la distribution de probabilité. Il n'est pas rare cependant de voir que cette condition n'est pas remplie. D'autres méthodes plus puissantes peuvent alors être utilisées, basées sur le principe de l'échantillonnage par importance (*biased sampling*).

Parfois enfin, on ne peut pas normaliser la distribution et elle est trop compliquée pour qu'on puisse, par exemple, localiser les maximums²⁴. Il nous faut autre chose. La méthode de *Metropolis* [23] est cette autre chose. En effet, dans cette méthode, il n'est pas nécessaire de pouvoir écrire la distribution de probabilité en fonction d'une distribution uniforme de nombres aléatoires. La connaissance des probabilités relatives suffit.

Équation de bilan détaillé (*Detailed balance*)

Soit un système dans un état quelconque \mathbf{K}' à un temps t , on cherche la probabilité que ce système soit dans l'état \mathbf{K} au temps $t+1$ ^{25,26}. On recense les événements possibles et l'on somme. Cela donne

$$P_{\mathbf{K}}(t+1) = \underbrace{P_{\mathbf{K}}(t)}_{\text{Déjà à } \mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K}' \neq \mathbf{K}} \underbrace{W(\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}) P_{\mathbf{K}'}(t)}_{\text{De } \mathbf{K}' \text{ à } \mathbf{K}} - \sum_{\mathbf{K}' \neq \mathbf{K}} \underbrace{W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}') P_{\mathbf{K}}(t)}_{\text{De } \mathbf{K} \text{ à } \mathbf{K}'}, \quad (1.39)$$

où $P_{\mathbf{K}}(t)$ est la probabilité d'être à la position \mathbf{K} au temps t et $W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}')$ est la probabilité de transiter de la position \mathbf{K} à la position \mathbf{K}' .

À l'équilibre, on doit avoir $P_{\mathbf{K}}(t+1) = P_{\mathbf{K}}(t) = f_{\mathbf{K}}$, où $f_{\mathbf{K}}$ est indépendante du temps auquel la mesure est prise.

²⁴Très fréquent en dimensions multiples et c'est ce que nous avons justement ici.

²⁵On parle d'état, mais on pourrait parler plus simplement de position dans l'espace N - N_r -dimensionnel des configurations de champ HS.

²⁶Dans ce qui suit, nous supposons que les variables \mathbf{K} sont discrètes. Dans le cas où elles sont continues, il faut remplacer la somme par une intégrale.

En substituant cette condition dans l'équation (1.39), on obtient

$$\sum_{\mathbf{K}' \neq \mathbf{K}} W(\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}) f_{\mathbf{K}'} - \sum_{\mathbf{K}' \neq \mathbf{K}} W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}') f_{\mathbf{K}} = 0, \quad (1.40)$$

qu'on peut bien sûr résoudre terme à terme comme

$$\boxed{W(\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}) f_{\mathbf{K}'} = W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}') f_{\mathbf{K}}}. \quad (1.41)$$

Cette solution porte le nom de *bilan détaillé* et est *une* des solutions qui permettent de résoudre (1.40). L'interprétation de cette équation est qu'à l'équilibre, la probabilité pour un système d'aller de l'état \mathbf{K} vers l'état \mathbf{K}' est la même que d'aller de l'état \mathbf{K}' vers l'état \mathbf{K} .

Algorithme de *Metropolis*

L'algorithme de *Metropolis* consiste à procéder à une marche aléatoire en utilisant l'équation (1.41) pour en mettre en place la dynamique.

Étape 1 Le système est dans une configuration $\mathbf{K}_t = \mathbf{K}$ obtenue à partir de la seule itération précédente (dynamique *Markovienne*) ou, si l'on commence la simulation, dans une configuration $\mathbf{K}_{t=0} = \mathbf{K}$ déterminée aléatoirement (auquel cas $P_{\mathbf{K}_{t=0}} = 1$).

Étape 2 On détermine une configuration \mathbf{K}'^{27} , qu'on cherche à atteindre à partir de \mathbf{K} , selon la probabilité suivante :

$$\text{Résultat} = \begin{cases} \text{Acceptation,} & \xi < W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}') \\ \text{Rejet,} & \xi > W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}') \end{cases}, \quad (1.42)$$

où ξ est une *variable aléatoire uniforme*, telle que $0 \leq \xi \leq 1$.

$W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}')$ est déterminée par l'équation (1.41). Une solution (pas la seule!) de cette équation que l'on retrouve souvent dans la littérature est

$$W(\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}') = \min \left(1, \frac{f_{\mathbf{K}'}}{f_{\mathbf{K}}} \right). \quad (1.43)$$

²⁷En fait, cette configuration peut être choisie de manière aléatoire, ou spécifiée à l'avance par une procédure systématique. Dans la littérature, on aborde souvent le problème de manière générale (Voir [22]), c'est-à-dire en introduisant un choix de configurations aléatoires.

On remarque ici que, comme les probabilités se divisent, il n'est effectivement nul besoin de connaître la normalisation de la densité de probabilité pour procéder aux calculs.

Étape 3 Si la configuration a été acceptée alors $\mathbf{K}_{t+1} = \mathbf{K}'$, sinon (configuration rejetée) $\mathbf{K}_{t+1} = \mathbf{K}$. On reprend ensuite à l'Étape 1 avec $t + 1 \rightarrow t$, et on continue cette boucle, jusqu'à ce qu'on ait tous les résultats voulus.

Nous avons donc trouvé une procédure pour générer une marche aléatoire dans l'espace des configurations des champs HS. On peut voir cette marche aléatoire comme le « sillon » laissé par la pointe du vecteur \mathbf{K} (figure 1.1), dans l'espace de dimensions $N \times N_\tau$. Cette marche aléatoire définit un système ergodique [24], c'est-à-dire qu'on peut éventuellement revisiter l'état \mathbf{K} après un nombre fini d'étapes et qu'en principe, toutes les configurations sont accessibles par la chaîne de *Markov* que nous venons de définir.

Or, le fait qu'une marche aléatoire nous permette de définir un système ergodique nous permet de conclure qu'une distribution $f_{\mathbf{K}}$ existe et est unique, si cette dernière est un point stationnaire du processus récursif (1.39) donné par l'algorithme.

En conclusion, de manière asymptotique, nous tombons sur la bonne distribution de probabilité et nous obtenons \bar{O} , une valeur approximative de l'équation (1.35) ((1.30) dans le cas continu) avec

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \bar{O} \equiv \frac{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s_{\mathbf{K}}(\lambda) O_{\mathbf{K}}(\lambda)]}{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s_{\mathbf{K}}(\lambda)]}, \quad (1.44)$$

où la « chaîne » correspond à la chaîne de *Markov* pour la série de valeurs de \mathbf{K} conservées.

1.2.4 Corrélations dans le calcul des erreurs statistiques

Dans l'algorithme de *Metropolis*, nous avons vu que le processus générant les nouvelles configurations de champ HS est un processus *markovien*, c.-à.-d un processus aléatoire conditionnel où le résultat obtenu à un temps $t + 1$ dépend exclusivement du résultat obtenu au temps t . Les données n'étant pas indépendantes (on dit qu'elles sont *corrélées*), la distribution de ces mesures ne donne pas une loi normale. On ne peut donc pas extraire la valeur d'incertitude ΔO , pour une valeur ($\langle \hat{O} \rangle$ estimée par (1.44)), en supposant que $\Delta O = \frac{\sigma_O^2}{\sqrt{N}}$, où σ_O^2 est la variance calculée à partir des valeurs échantillonnées pour O , et N est le nombre de mesures prises lors d'une simulation. Cette quantité dépend en général des corrélations.

En fait, on peut montrer (voir par exemple [25]) que l'erreur ΔO mentionnée plus haut est plutôt donnée par

$$\Delta O \simeq \frac{\sigma_O}{\sqrt{\frac{N}{2\tau_{int}}}}, \quad N \gg \tau_{int}, \quad (1.45)$$

où τ_{int} est appelé *temps de corrélation intégré*. On l'appelle ainsi parce que c'est en fait la valeur moyenne du temps t pour $\Gamma(t)$, la *fonction d'autocorrélation* associée à une observable O , quantité que nous n'introduirons pas dans ce texte^{28,29}. Nous reviendrons plus tard sur τ_{int} et la façon de l'obtenir.

Calcul par blocs de mesures (*Binning*)

Une façon d'obtenir des échantillons indépendants et, par conséquent, des statistiques appropriées pour le calcul des observables, est de diviser la série des résultats obtenus en n chaînes de taille l qu'on appelle *blocs* (*bins*), telles que $n \cdot l = N$, et de calculer la valeur moyenne

$$\bar{O}_b = \frac{1}{l} \sum_{i=(b-1)l+1}^{bl} O_i, \quad b \in \{1, 2, \dots, n\} \quad (1.46)$$

de l'observable dans chacun de ces blocs (ici b est l'indice de position du bloc dans la chaîne). Le *théorème de la limite centrale* stipule que pour l suffisamment grand, chacune de ces moyennes constitue une nouvelle variable aléatoire appartenant à la distribution de probabilité qu'on cherche à échantillonner. C'est donc ces blocs qui nous permettent de calculer l'erreur sur l'observable cherchée.

Temps de corrélation τ_{int}

Souvent, l'expérience nous permet d'avoir une assez bonne idée de la taille des blocs à utiliser. En effectuant plusieurs simulations indépendantes avec les mêmes paramètres par exemple, on peut comparer les résultats obtenus et s'assurer que les barres d'erreurs se chevauchent.

²⁸Il importe de savoir par contre que τ_{int} varie selon l'observable que l'on étudie. On appelle τ_{int}^O , la valeur associée à une observable O donnée. τ_{int} est le plus grand des τ_{int}^O . C'est cette valeur qui doit être utilisée pour toutes les observables, dans (1.45).

²⁹Pour une discussion sur ce sujet voir [25] ou encore les annexes de [26].

Pour *une seule* simulation, le calcul d'erreur peut quand même s'effectuer *a posteriori*, c.-à-d. que l'on se sert de N , le nombre total de mesures, et l'on calcule l'erreur $\sigma(l)$ en prenant des blocs de différentes tailles l . En consultant [25], on apprend que

$$\tau_{int}^O(l) \equiv \frac{\sigma^2(l)}{2\sigma_O^2}. \quad (1.47)$$

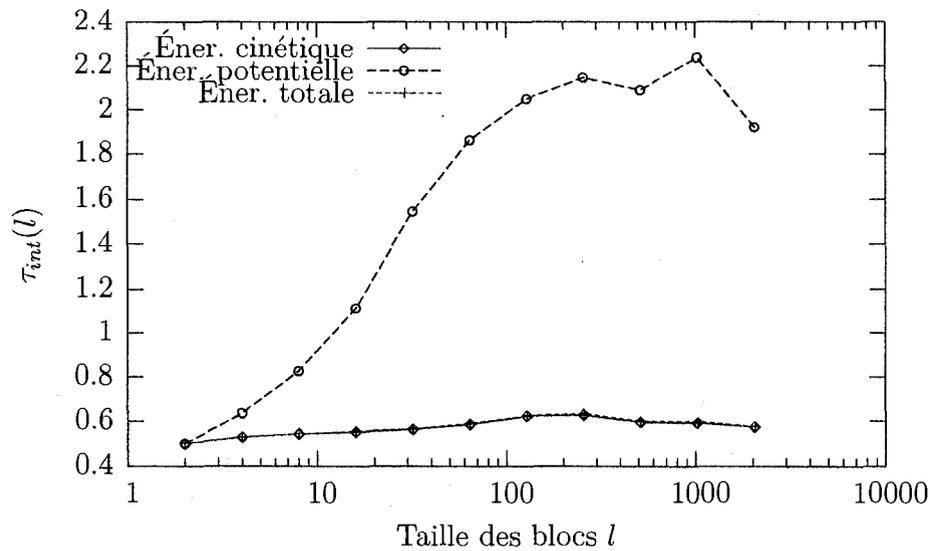


FIGURE 1.3: Temps de corrélation intégré $\tau_{int}(l)$ vs l , la taille des blocs. $\beta = 9.995$ et $U = 0.5$, pour un réseau 8×1 . Pour l'énergie totale et sa partie cinétique on a $l^* \sim 260$ et $\tau_{int} \sim 0.62$, alors que pour la partie potentielle, à $l^* \sim 260$ on a $\tau_{int} \sim 2.14$, et on a encore des doutes quant à la convergence des résultats.

Lorsqu'on trace $\tau_{int}^O(l)$ vs l et que le nombre de mesures par bloc est suffisamment grand, on obtient un plateau. La hauteur de ce plateau nous donne la valeur de τ_{int} qu'il faut insérer dans le calcul (1.45) pour obtenir la bonne erreur sur la valeur cherchée. Pour de futurs calculs, on peut se rappeler que l^* , la valeur de l à partir de laquelle on obtient un plateau, est une limite inférieure sur le nombre de mesures requis dans les blocs pour que ces derniers soient indépendants statistiquement. La figure 1.3 représente l'équation (1.47), pour trois différentes quantités. On a ici un parfait exemple de temps de corrélation différents. Même si la valeur de τ_{int} , pour la partie potentielle, ne semble pas avoir encore convergé vers un plateau, c'est le τ_{int} le plus grand des trois quantités

examinées, et c'est donc ce dernier qui doit être utilisé dans l'équation (1.45)³⁰.

Lorsqu'on fait l'examen de τ_{int} , il faut faire une petite mise en garde. Il se peut que le τ_{int} semble avoir convergé pour certains systèmes, mais le plateau obtenu se révèle en fait une pente croissant très doucement. Si l'on pouvait augmenter le nombre l de mesures par bloc d'un facteur 10 par exemple, on pourrait voir que la convergence se produit beaucoup plus tard, entraînant des erreurs systématiques pour le calcul d'erreur, faisant que cette dernière est beaucoup trop petite. Si l'on veut prendre le maximum de précautions pour optimiser notre calcul, il faut suivre la progression de $\tau_{int}(l)$ pour des valeurs des paramètres de la simulation qui ne posent pas de problèmes, c.-à-d. une haute température, une faible valeur de U et des systèmes de petite taille. Ainsi, on peut suivre à la trace les comportements de τ_{int} et de l^* lorsque les corrélations entre les mesures augmentent, pour différents paramètres.

En pratique, dans nos calculs, le nombre de mesures par bloc variait entre 200 et 15000, à mesure que U et β croissaient.

Collement

Dans certains cas, surtout à basse température et lorsque U est grand, la marche aléatoire n'est plus aussi aléatoire, c.-à-d. la pointe du vecteur de la figure 1.1 reste prise dans un sous-espace très petit des configurations. On parle alors de problème de *collement* ou problème d'ergodicité. Ces problèmes demandent qu'on augmente de beaucoup la taille des blocs utilisés. Dans nos calculs nous avons implanté l'algorithme des *mouvements globaux* [27], dont l'idée de base est de changer complètement de région de l'espace de temps à autre, en retournant toutes les tranches de temps associées à un site en particulier choisi aléatoirement. Le fait d'utiliser les mouvements globaux ralentit la simulation, mais si en rétablissant l'ergodicité on obtient plus facilement des données indépendantes, cela raccourcira le temps requis pour obtenir des résultats. Pendant nos calculs, cette option était toujours activée à moins qu'on ne précise le contraire.

³⁰Le fait que τ_{int} oscille quand l est très grand provient du fait que nous avons utilisé un nombre de mesures constant, tout en agrandissant la taille des blocs. Le nombre de blocs a de ce fait diminué à mesure que l a grandi. L'estimateur de la variance devient donc moins précis quand l est grand. Si le nombre de blocs pouvait rester constant jusqu'à la fin, on ne verrait pas ce type de comportement.

Réchauffement

Comme nous l'avons vu à la section 1.2.3, l'algorithme de *Metropolis* nous donne la bonne réponse pour la densité de probabilité cherchée, dans la limite où le nombre d'itérations est grand. Concrètement, cela signifie que nous devons laisser tomber un certain nombre d'itérations N_R , à partir du départ, pour ensuite faire la moyenne sur les données restantes. La chaîne de *Markov* débute vraiment à N_R+1 . On appelle *réchauffement* cette *période* pendant laquelle on ne mesure rien, puisque c'est la période nécessaire à l'atteinte de l'équilibre. Cette partie est la plus contraignante en termes de temps de calcul dans le MCQ. En effet, même si on peut distribuer le nombre de mesures à effectuer sur n ordinateurs, le temps de calcul total, lui, n'est pas divisé par n puisque le réchauffement est le même, que la simulation soit effectuée sur un ou plusieurs ordinateurs.

En règle générale, on prend

$$N_R \simeq 10l^*. \quad (1.48)$$

1.2.5 Autres considérations à ne pas négliger

Problème de signe

Pour certaines gammes de paramètres, le « signe moyen », c'est-à-dire la moyenne des valeurs de signe obtenues pour chaque configuration HS, se rapproche de 0. Comme il n'y a que deux valeurs possibles pour s , cela signifie que bien des valeurs s'annulent mutuellement dans l'équation (1.44). Il faut donc faire grandir la taille de notre échantillon pour avoir une réponse qui a du sens. En fait, le problème de signe réside dans le fait que l'échantillon à prendre grandit exponentiellement avec l'inverse de la température et la taille. Cela implique qu'on perd tous les avantages de la méthode MCQ par rapport aux diagonalisations exactes (DE), et donc que la méthode n'a plus aucun intérêt dans cette région de paramètres.

Cependant, même si nous nous restreignons, ici, au cas $\langle \hat{n}_i \rangle = 1$, qui ne comporte pas de problème de signe, il est bon d'en faire mention dans ce document, puisqu'outre la petite taille des systèmes qu'on peut utiliser, le problème de signe est le principal désavantage du MCQ.

Biais de l'estimateur et *Jackknife*

L'équation (1.44) est ce qu'on appelle un *estimateur biaisé*³¹, puisque c'est un quotient de deux opérations linéaires qui, lui, donne une opération non linéaire.

En effet, on peut écrire

$$\langle (\theta - Q)^2 \rangle = \underbrace{\langle (\theta - \langle \theta \rangle)^2 \rangle}_{\text{Variance de } \theta} + \underbrace{\langle \langle \theta \rangle - Q \rangle^2}_{\text{Biais}}, \quad (1.49)$$

où Q est la valeur moyenne qui détermine la distribution et θ est l'estimateur de la moyenne Q . Dans le cas où les θ sont toutes des variables indépendantes, la variance de θ décroît comme $\frac{1}{N}$. Si la décroissance du biais en fonction de N est moins rapide que $\frac{1}{N}$, nos résultats seront biaisés, et il faut songer à les corriger.

Un moyen de le faire est d'utiliser la méthode du *Jackknife*. Cette méthode nous permet, très souvent, de nous assurer que le biais de l'estimateur décroît plus rapidement que la variance de ce dernier en fonction de N . Cette méthode assure aussi une propagation de l'erreur automatique, c.-à-d. qu'elle ne nécessite pas l'usage d'expressions alourdis par plusieurs calculs de variance et de covariances entre les quantités à calculer. En utilisant les k blocs de taille l comme quantités à utiliser, tels que $k \cdot l = N$, les équations importantes se rapportant à la méthode sont

$$R = R^{(0)} - b \quad (1.50)$$

$$\delta(R) = (k - 1)^{1/2} \left(\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k (R^{(j)})^2 - (R^{av})^2 \right)^{1/2}, \quad (1.51)$$

avec

$$b = (k - 1)(R^{av} - R^{(0)}) \quad (1.52)$$

$$R^{av} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k R^{(j)}. \quad (1.53)$$

R est la valeur calculée une fois le biais b retranché de $R^{(0)}$ ($R^{(0)}$ est l'estimateur biaisé défini ici à l'équation (1.44)), $\delta(R)$ est l'incertitude sur R et $R^{(j)}$ est la moyenne des k blocs où l'on a soustrait le $j^{\text{ième}}$ bloc.

Dans le cas d'un estimateur non biaisé (comme la plupart des quantités calculées

³¹Voir par exemple [28] pour un traitement plus en profondeur de cette partie.

à demi-remplissage), on peut montrer que les équations ci-haut équivalent au calcul standard.

Dans le cas de la méthode introduite en 1.3.1, bien que les calculs soient effectués à demi-remplissage, il existe une possibilité de biais puisque le dénominateur du terme calculé à β' n'est pas égal à 1.

Nous avons utilisé les équations précédentes pour nos calculs statistiques et n'avons trouvé aucune différence significative entre le *jackknife* ou la méthode traditionnelle de calculs des variances. C'est donc dire que le biais de l'estimateur n'est pas un facteur dont il faut tenir compte pour les quantités que nous avons mesurées dans cette gamme de paramètres. Comme la méthode du *Jackknife* nécessite de la mémoire supplémentaire lors du calcul, nous utilisons la méthode traditionnelle d'évaluation des statistiques.

Régressions linéaires en $\Delta\tau^2$

Comme nous l'avons vu, l'équation (1.2) est exacte jusqu'à l'ordre $(\Delta\tau)^2$. Nous avons pu constater que la régression devient essentielle quand U et β deviennent grands. Cette étape est tellement importante que nous lui avons consacré quelques lignes à la section 1.3.3.

Effets de taille finie (ETF)

En général, en thermodynamique on a affaire à deux types de quantités, soit les quantités *extensives* qui dépendent de la taille du système et les quantités *intensives* qui sont indépendantes de cette même taille. Or, quand on calcule de petits systèmes, il arrive parfois que des quantités intensives soient dépendantes du volume utilisé (ou nombre de sites dans le cas qui nous concerne). On s'aperçoit par contre que pour un volume suffisamment grand, ces quantités ne varient plus avec la taille. On dit alors qu'on a atteint la *limite thermodynamique* du système. Détecter ces ETF n'est pas évident. Plus la température diminue, plus ils deviennent importants. Les calculs à $U = 0$ dans la limite thermodynamique ainsi que pour des tailles finies peuvent nous donner un bon indice de la taille du système à utiliser pour un calcul quand $U \neq 0$. Ces effets diffèrent tellement d'un cas à l'autre que nous ferons l'analyse de ces données dans les chapitres traitant des résultats.

1.3 Chaleur spécifique

La capacité thermique s'écrit

$$C \equiv \frac{\delta Q}{dT} = T \frac{dS}{dT}, \quad (1.54)$$

où Q est la chaleur et S est l'entropie. Sa valeur dépend des variables qui demeurent constantes dans le système que nous utilisons. À nombre de particules N et volume V constant, on a

$$C_V \equiv T \left(\frac{dS}{dT} \right)_{V,N} = \left(\frac{dE}{dT} \right)_{V,N}. \quad (1.55)$$

Dans le cas du *modèle de Hubbard*, le V demeurant constant, il n'y a que le nombre de particules qui puisse varier. On peut donc remplacer N et V par la densité de particules n . On écrit ainsi que

$$C_V \equiv \left(\frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dT} \right)_{\langle \hat{n}_i \rangle}. \quad (1.56)$$

On peut normaliser (1.56) par le volume du système, en l'occurrence le nombre de sites V ³² (le paramètre de maille étant posé égal à 1). On définit donc la *chaleur spécifique volumique*³³ comme

$$c_V \equiv \frac{C_V}{V} = \frac{1}{V} \left(\frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dT} \right)_{\langle \hat{n}_i \rangle} \equiv \left(\frac{d\epsilon}{dT} \right)_{\langle \hat{n}_i \rangle}, \quad (1.57)$$

où ϵ est l'énergie³⁴ par site.

Dans le MCQ, il existe quelques façons d'aborder le calcul de (1.57). Citons : le calcul des fluctuations, le lissage de l'énergie et la méthode des dérivées aux différences finies³⁵.

De prime abord, on pourrait penser que la méthode du calcul des fluctuations est la plus intéressante puisqu'elle ne nécessite le calcul que d'un *seul* point pour chaque valeur de température utilisée. Cette méthode est pourtant déconseillée [11], parce que

³²En multipliant par le pas du réseau a_0 on trouve effectivement un volume. Ici, $a_0 \equiv 1$.

³³À partir de maintenant, le terme chaleur spécifique désignera toujours la chaleur spécifique volumique.

³⁴Totale, spécifique ou potentielle. Nous parlerons de leurs significations plus tard.

³⁵À demi-remplissage, le potentiel chimique est 0. Pour cette valeur précise $\left(\frac{d\epsilon}{dT} \right)_{\langle \hat{n}_i \rangle=1} = \left(\frac{d\epsilon}{dT} \right)_{\mu=0}$.

Hors demi-remplissage, il faut trouver le potentiel chimique correspondant au remplissage pour lequel on veut faire le calcul, ce qui n'est pas une mince affaire, puisque $\mu \equiv \mu(n, T)$.

l'expression à évaluer est très longue et que certains termes contiennent jusqu'à huit opérateurs fermioniques. Il faut donc, selon le théorème de *Wick*, multiplier entre elles quatre fonctions de *Green* à une particule, qui ne sont calculées qu'approximativement. Cela entraîne des barres d'erreur très grandes qui rendent les résultats inutilisables.

Le lissage de l'énergie, quant à lui, est une méthode attrayante puisqu'elle nous donne une expression analytique de l'énergie, que l'on peut dériver explicitement, pour trouver l'expression de la chaleur spécifique. Le désavantage de cette méthode est qu'il est facile de *surlisser* les données, c'est à dire de donner une expression qui décrit *trop bien* les résultats MCQ, donnant ainsi lieu à l'apparition de structures artificielles dans la courbe résultante. C'est la méthode privilégiée dans les références [10,11]³⁶.

La dernière méthode énumérée, soit celle des différences finies, est la moins sophistiquée des trois. C'est la méthode la plus naïve qu'on a de calculer une dérivée. L'annexe D nous donne les erreurs systématiques apparaissant dans une dérivée aux différences finies par rapport à la température. On a

$$c_V^{\text{approx}} \equiv -\beta_0^2 \frac{\Delta E}{\Delta \beta} \simeq -\beta_0^2 \epsilon'(\beta_0) + A(\beta_0) (\Delta \beta)^2 + B(\beta_0) (\Delta \tau)^2 + D(\beta_0) (\Delta \tau)^2 (\Delta \beta)^2 + O((\Delta \beta)^4) \quad (1.58)$$

Dans cette méthode, il y a une compétition entre les erreurs systématiques (qui soit dit en passant ne sont pas présentes dans les autres méthodes) dues à $\Delta \beta$ (le pas de la dérivée), et l'erreur statistique sur chacun des points. Ainsi, si les points sont très éloignés, l'erreur statistique sur la mesure ne sera pas très grande. L'erreur systématique par contre, risque de nous faire « rater » des structures de la courbe. En revanche, si les points sont très rapprochés, l'erreur systématique diminue, mais l'erreur statistique, elle, augmente. C'est donc un équilibre entre ces deux effets qui nous donne la meilleure réponse. C'est *a priori* une piètre méthode.

S. Liu et Y. Alhassid [29] ont cependant trouvé une façon intuitive et ingénieuse de rendre la méthode des différences finies intéressantes. Ils ont songé à utiliser les mêmes champs HS pour calculer deux points à des températures différentes et ainsi induire des covariances qui diminueront l'erreur statistique sur la différence entre ces deux points.

³⁶Les fonctions utilisées pour le lissage sont par contre bien différentes. L'un utilise des polynômes [10] alors que l'autre utilise une somme d'exponentielles [11].

1.3.1 Méthode de Liu et Alhassid

Supposons que l'on veuille calculer une quantité à une température $\beta' = \beta + \Delta\beta$. Il est possible d'obtenir cette température exactement à partir de l'expression (1.26).

En effet, on associe tout simplement cette température β' à une configuration de champs \mathbf{X}' , de sorte que

$$\langle \hat{O} \rangle (\beta') \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X}' g(\mathbf{X}') S(\mathbf{X}') \prod_{\sigma'=\pm} \det \left[\mathcal{G}^{\sigma'}(\mathbf{X}')^{-1} \right] \prod_{\sigma=\pm} O^{\sigma}(\mathbf{X}')}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X}' g(\mathbf{X}') S(\mathbf{X}') \prod_{\sigma'=\pm} \det \left[\mathcal{G}^{\sigma'}(\mathbf{X}')^{-1} \right]}. \quad (1.59)$$

L'étape clé de la méthode est de poser $\mathbf{X}' = c\mathbf{X}$, où c est une constante, de sorte que $g(\mathbf{X}') = C_{ste} \times g(\mathbf{X})$. En insérant la dernière expression dans (1.59), on obtient

$$\langle \hat{O} \rangle (\beta') \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(c\mathbf{X}) \prod_{\sigma'=\pm} \det \left[\mathcal{G}^{\sigma'-1}(c\mathbf{X}) \right] \prod_{\sigma=\pm} O^{\sigma}(c\mathbf{X})}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} g(\mathbf{X}) S(c\mathbf{X}) \prod_{\sigma'=\pm} \det \left[\mathcal{G}^{\sigma'-1}(c\mathbf{X}) \right]}, \quad (1.60)$$

où les constantes multipliant les facteurs g se sont simplifiées au numérateur et au dénominateur.

On multiplie ensuite l'expression au numérateur et au dénominateur par

$$\frac{p(\mathbf{X})s(\mathbf{X})}{g(\mathbf{X})S(\mathbf{X}) \prod_{\sigma''=\pm 1} \det \left[\mathcal{G}^{\sigma''-1}(\mathbf{X}) \right]}, \quad (1.61)$$

où $p(\mathbf{X})$ et $s(\mathbf{X})$ ont été définis à la section 1.2.2. L'équation précédente est une réécriture compliquée de l'unité. On réarrange (1.60) et on obtient

$$\langle \hat{O} \rangle (\beta') \simeq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X}) s(\mathbf{X}) S(c\mathbf{X} - \mathbf{X}) \prod_{\sigma'=\pm 1} \frac{\det \left[\mathcal{G}^{\sigma'-1}(c\mathbf{X}) \right]}{\det \left[\mathcal{G}^{\sigma'-1}(\mathbf{X}) \right]} \overbrace{\prod_{\sigma=\pm} O^{\sigma}(c\mathbf{X})}^{O(c\mathbf{X})}}{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} p(\mathbf{X}) s(\mathbf{X}) S(c\mathbf{X} - \mathbf{X}) \underbrace{\prod_{\sigma'=\pm 1} \frac{\det \left[\mathcal{G}^{\sigma'-1}(c\mathbf{X}) \right]}{\det \left[\mathcal{G}^{\sigma'-1}(\mathbf{X}) \right]}}_{A(\mathbf{X})}}, \quad (1.62)$$

où

$$S(c\mathbf{X} - \mathbf{X}) \equiv \begin{cases} 1, & U > 0 \\ e^{-(c-1)\text{Tr}[\text{diag}\{\mathbf{X}\}]}, & U < 0 \end{cases}. \quad (1.63)$$

Il s'agit maintenant de trouver la constante c , dans $\mathbf{X}' = c\mathbf{X}$, pour que la condition $g(\mathbf{X}') = Cste \times g(\mathbf{X})$ soit respectée. Encore une fois, dans le cas qui nous intéresse, on a (comme pour 1.32)

$$\begin{aligned} g(c\mathbf{X}) &= Cste \times \sum_{\mathbf{K}} \delta(c\mathbf{X} - \mathbf{K}\lambda') \\ &= Cste \times \sum_{\mathbf{K}} \frac{1}{|c|^{NN_r}} \delta\left(\mathbf{X} - \frac{\mathbf{K}}{c}\lambda'\right), \\ &= Cste \times \underbrace{\sum_{\mathbf{K}} \delta\left(\mathbf{X} - \mathbf{K}\frac{\lambda'}{c}\right)}_{=g(\mathbf{X})}, \end{aligned} \quad (1.64)$$

où la dernière égalité est satisfaite seulement si $c = \frac{\lambda'}{\lambda}$.

Ainsi, l'équation (1.62), s'écrit

$$\langle \hat{O} \rangle \simeq \frac{\overbrace{\left[\frac{\sum_{\mathbf{K}} p_{\mathbf{K}}(\lambda) [s_{\mathbf{K}}(\lambda) A_{\mathbf{K}}(\lambda; \lambda') O_{\mathbf{K}}(\lambda')]}{\sum_{\mathbf{K}} p_{\mathbf{K}}(\lambda)} \right]}^{\equiv O}}{\underbrace{\left[\frac{\sum_{\mathbf{K}} p_{\mathbf{K}}(\lambda) [s_{\mathbf{K}}(\lambda) A_{\mathbf{K}}(\lambda; \lambda')]}{\sum_{\mathbf{K}} p_{\mathbf{K}}(\lambda)} \right]}_{\equiv Z}}, \quad (1.65)$$

avec

$$A_{\mathbf{K}}(\lambda; \lambda') \equiv \begin{cases} \prod_{\sigma} \frac{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda')^{-1}]}{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)^{-1}]}, & U > 0 \\ \prod_{\sigma} e^{-\frac{\lambda' - \lambda}{2} \text{Tr}[\text{diag}\{\mathbf{K}\}]} \frac{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda')^{-1}]}{\det [\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda)^{-1}]}, & U < 0 \end{cases}. \quad (1.66)$$

Tout le reste a déjà été calculé de (1.34) à (1.36), sauf $O_{\mathbf{K}}(\lambda')$ qui est l'opérateur dont

on veut la moyenne, calculé à λ' c.-à-d. β' ³⁷. On a donc

$$\bar{O}(\beta') \simeq \frac{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s_{\mathbf{K}}(\lambda) A_{\mathbf{K}}(\lambda; \lambda') O_{\mathbf{K}}(\lambda')]}{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s_{\mathbf{K}}(\lambda) A_{\mathbf{K}}(\lambda; \lambda')]} \quad (1.67)$$

et donc la dérivée aux différences finies évaluée à β nous donne

$$\begin{aligned} \frac{\Delta O}{\Delta \beta} &\simeq \frac{1}{\Delta \beta} (\bar{O}(\beta + \Delta \beta) - \bar{O}(\beta)) \\ &\simeq \frac{1}{\Delta \beta} \left(\frac{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K}) A(\mathbf{K}) O(c\mathbf{K})]}{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K}) A(\mathbf{K})]} - \frac{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K}) O(\mathbf{K})]}{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K})]} \right). \end{aligned} \quad (1.68)$$

Pour que l'expression précédente nous donne le bon comportement en termes des erreurs systématiques, soit celui de (1.58), il faut que la dérivée soit évaluée en β_0 , définie dans l'annexe D. En procédant à un changement de variable $\beta' \rightarrow \beta_0 + \frac{\Delta \beta}{2}$ et $\beta \rightarrow \beta_0 - \frac{\Delta \beta}{2}$ puis en multipliant par $-\beta_0^2$ on a

$$c_V^{\text{approx}} \equiv -\beta_0^2 \left. \frac{\Delta O}{\Delta \beta} \right|_{\beta_0} \simeq -\frac{\beta_0^2}{\Delta \beta} \left(\frac{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K}) A(\mathbf{K}) O(c\mathbf{K})]}{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K}) A(\mathbf{K})]} - \frac{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K}) O(\mathbf{K})]}{\sum_{\mathbf{K} \in \text{Chaîne}} [s(\mathbf{K})]} \right), \quad (1.69)$$

la forme requise à l'équation (1.58)³⁸. Cette expression est celle de la dérivée aux différences finies à deux points évaluée en T_0 ($= \frac{1}{\beta_0}$), pour n'importe quelle observable, par rapport à la température. En substituant donc au hamiltonien de (1.1) sa seule partie cinétique ou sa partie potentielle à \hat{O} , on trouve les chaleurs spécifiques *totale*, *cinétique* et *potentielle* respectivement.

La figure 1.4 montre le calcul réalisé avec la méthode donnée à la section 1.3.1. Dès le premier coup d'oeil, on remarque la différence très grande entre chacune des courbes, qui augmente de surcroît, à mesure que la température diminue. Nous avons aussi observé que cet effet s'accroît à mesure que U grandit. Nous reparlerons de cette courbe en plus de détails à la fin de la section 1.3.4, mais nous voyons tout de suite que lorsque les régressions sont faites, nous tombons sur le résultat exact de la référence [9].

³⁷En fait, le calcul de $O_K(\lambda')$ passe par le calcul des fonctions de *Green* à une particule $\mathcal{G}_{\mathbf{K}}^{\sigma}(\lambda')$. Dans ces fonctions, il n'y pas que λ' qui change. Plus fondamentalement, il faut changer $\Delta \tau \rightarrow \Delta \tau'$ partout.

³⁸Pour des raisons d'économie de calcul et d'espace mémoire dans le programme, les dérivées par rapport à la température sont évaluées à β_0 , alors que les autres quantités sont évaluées en β .

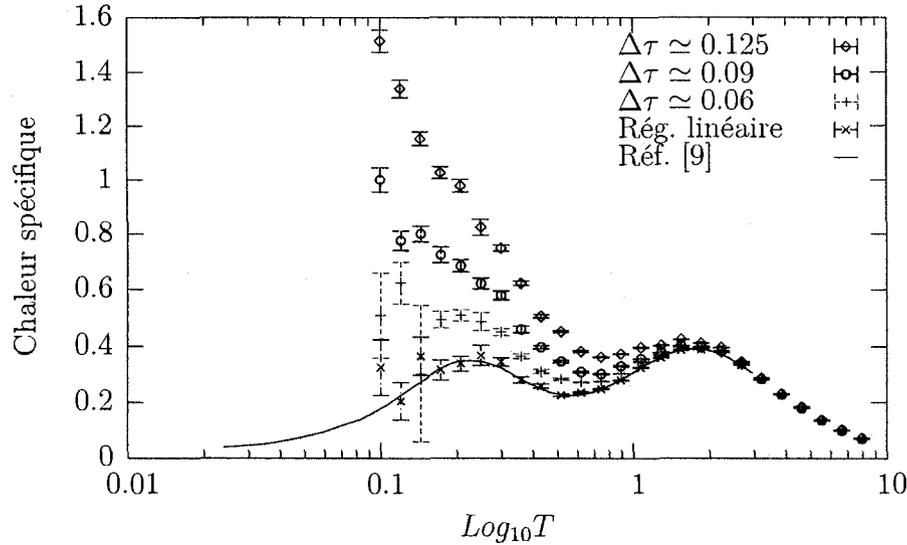


FIGURE 1.4: Différentes valeurs de $\Delta\tau$, puis régression linéaire pour la méthode de Liu *et al.*, pour un réseau 32×1 à $U = 8$. On voit que l'écart entre les différentes courbes est très grand, mais que la régression linéaire est validée par la référence.

Commentaire sur la signification des parties *cinétique* et *potentielle* de la chaleur spécifique

Les composantes *cinétique* et *potentielle*, proviennent des parties cinétique (\hat{K}) et potentielle (\hat{V}) de l'équation (1.1). On peut s'en servir pour comprendre la structure de la chaleur spécifique totale du système, particulièrement la partie potentielle, comme nous le verrons au chapitre 3. Il est clair par contre que ces composantes ne peuvent pas être vues comme deux chaleurs spécifiques physiques additives. En effet, il arrive que la chaleur spécifique potentielle soit négative, ce qui est évidemment une absurdité lorsqu'on considère la définition (1.54), conjuguée à la troisième loi de la thermodynamique.

1.3.2 Efficacité de la nouvelle méthode

Nous avons comparé la méthode introduite dans la section 1.3.1 avec la méthode standard qu'on a de faire les différences finies, c.-à-d. en utilisant deux valeurs d'énergie obtenues avec deux marches aléatoires différentes³⁹. La figure 1.5 nous donne les résultats de cette comparaison. Nous avons comparé les deux méthodes aux résultats exacts de Jüttner *et al.* [9] pour le modèle de Hubbard 1D à $U = 8$, un régime où les résultats sont

³⁹La méthode optimale qu'on a de calculer les différences finies a été testée à la section (1.3.3).

difficiles à obtenir en raison des fortes erreurs statistiques. On pourrait dire qu'on teste la méthode dans des « conditions extrêmes » !

Précisons d'abord que les mesures ont été obtenues en prenant les mêmes paramètres pour chacune des courbes, hormis le fait qu'on a calculé deux points d'énergie en une simulation dans la nouvelle méthode. Les régressions linéaires ont été faites pour les deux méthodes. Nous verrons dans les prochaines sections qu'il était primordial de les faire.

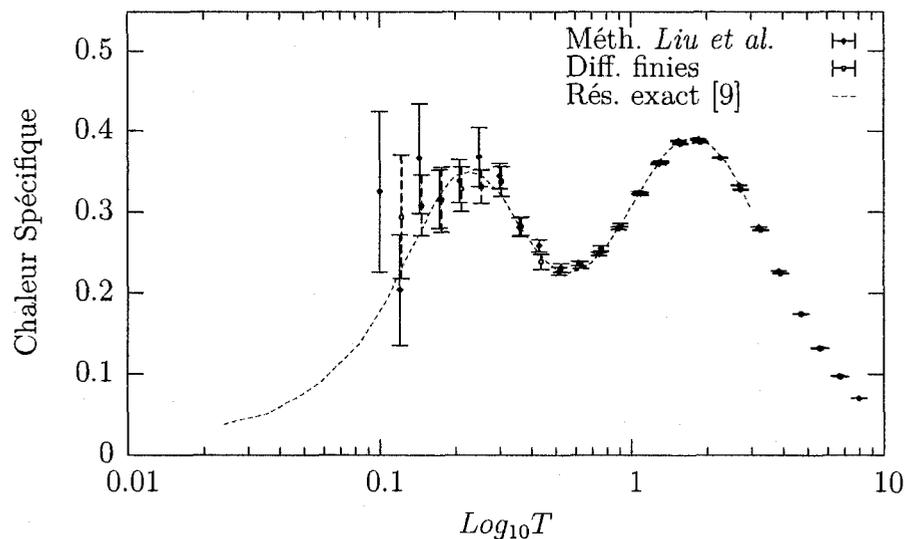


FIGURE 1.5: Comparaison entre la méthode de Liu *et al.* et la dérivée aux différences finies, avec les paramètres optimaux ; à $U = 8$; pour une chaîne 32×1 . Les régressions linéaires ont été faites pour les deux méthodes.

En analysant la figure 1.5 donc, on peut voir que les deux méthodes de procéder donnent des résultats semblables. À haute température cependant, et bien sûr le graphique ne nous permet pas de le montrer, les erreurs obtenues par la méthode de Liu sont de trois à quatre ordres de grandeur plus petites que pour la méthode conventionnelle. En revanche, les barres d'erreurs sont comparables à basse température et, malheureusement, c'est plutôt cette région qui nous intéresse. Si les deux méthodes donnent les mêmes résultats, laquelle choisir ? Il faut choisir celle qui va nous donner le plus d'informations en le moins de temps. Le pas de dérivation choisi, dans la méthode de Liu, doit être très petit, sinon des instabilités numériques peuvent survenir. Au contraire, la méthode des différences finies ordinaires, demande que l'on utilise deux points relativement éloignés l'un de l'autre. Avec trois points, on peut trouver deux points différents dans la chaleur

spécifique⁴⁰, alors qu'il en faut quatre pour le même nombre de points avec la méthode de Liu. Cette dernière pourrait cependant être utile dans le cas où la courbe à dériver varie beaucoup sur une plage de température donnée et où, par conséquent, le pas de dérivation doit être petit. Ici, l'énergie varie plutôt peu rapidement en fonction de la température et donc il n'est pas utile de se servir de cette méthode dans le cas présent. Nous nous rabattons donc sur le calcul des différences finies standard, tel que décrit à la section suivante.

1.3.3 Différences finies standards : régressions ou non ? Là est la question !

Dans cette partie, nous nous attardons à optimiser la procédure de calcul de dérivées aux différences finies. La figure 1.6 représente la courbe de laquelle on doit tirer la dérivée.

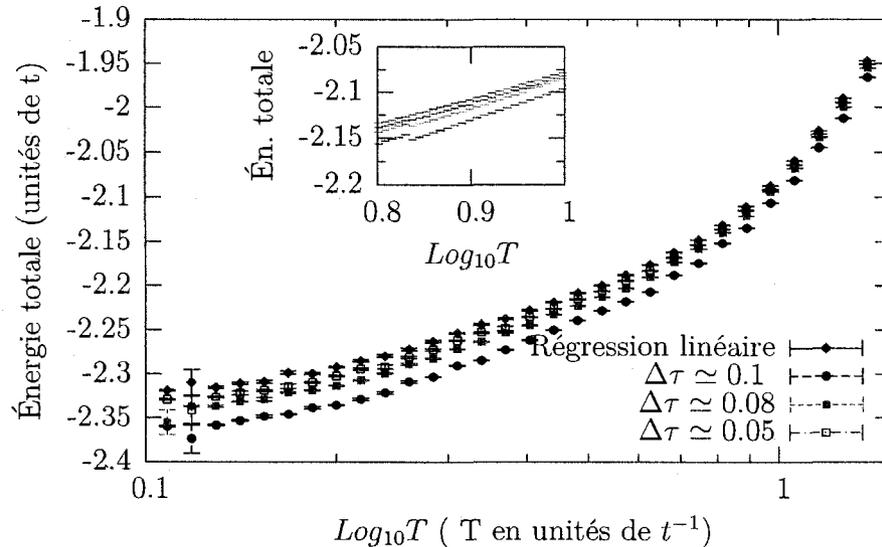


FIGURE 1.6: Énergie totale d'une chaîne de 32 sites à $U = 8$, pour différents $\Delta\tau$. La précision des points dans l'encadré nous montre qu'il n'est pas évident que la dérivée numérique de chacune des courbes sera la même pour différentes valeurs de $\Delta\tau$.

On voit, dès l'abord, qu'il est bien présomptueux de penser que la valeur de la dérivée de cette énergie sera la même peu importe la valeur de $\Delta\tau$. En effet, grâce à la préci-

⁴⁰Le point 2 et le point 1 de l'énergie donnent le point 1' dans la chaleur spécifique alors que le point 3 et le point 2 donnent le point 2'. Le point 2 sert donc deux fois.

sion des résultats obtenus, on peut voir en examinant l'encadré de la figure 1.6, que la différence entre les courbes n'est pas une simple constante additive, condition *sine qua non* pour nous permettre de conclure que la dérivée est la même pour toutes les courbes. Bien sûr, seul le calcul explicite pourra nous en dire plus long.

Procédure suivie pour l'évaluation de la dérivée

Grâce au grand nombre de points que nous avons recueillis (en tout 500 répartis également sur une échelle logarithmique selon T), nous testons différents pas de dérivations ΔT , et obtenons différentes courbes, que nous superposons aux résultats exacts obtenus en une dimension par Jüttner *et al* [9].

En choisissant un intervalle constant, en termes de nombre de points, on obtient un rapport $\frac{\Delta T}{T} (= -\frac{\Delta\beta}{\beta})$ ⁴¹ constant, où ΔT est la différence de température utilisée dans le calcul de la dérivée aux différences finies, alors que T est la température à laquelle est évaluée cette dérivée.

Commentaire technique concernant le pas de dérivation

Le pas de la dérivation P est la différence, en termes de nombres de points, entre les deux points choisis pour le calcul de la dérivée. On peut facilement établir que

$$\log T_i = \log T_0 + \left(\frac{n_i - 1}{N - 1} \right) [\log T_f - \log T_0] , \quad (1.70)$$

où T_i est la température que l'on cherche, T_f et T_0 sont respectivement les plus haute et plus basse températures de l'intervalle choisi, N est le nombre total de point calculés (ici 500) et n_i est le nombre de points calculés séparant T_i de T_0 .

Soit T_j , qui a la même forme que l'équation (1.70) avec la condition $n_j = n_i + P$. En définissant $\Delta T \equiv T_j - T_i$ et $T \equiv \frac{T_i + T_j}{2}$, on trouve facilement la formule

$$\frac{\Delta T}{T} = 2 \frac{\frac{T_f}{T_0}^{\frac{P}{N-1}} - 1}{\frac{T_f}{T_0}^{\frac{P}{N-1}} + 1} , \quad (1.71)$$

qui nous donne le rapport $\frac{\Delta T}{T}$ correspondant à un P fixé.

⁴¹Les rapports sont les mêmes, mais les dividendes et les diviseurs de chaque division ne sont pas les mêmes.

Régressions linéaires

Avant de voir comment se comporte la dérivée aux différences finies, sans la régression linéaire en $(\Delta\tau)^2$, pour chacune des énergies impliquée dans le calcul, nous appliquons ladite régression, et nous nous assurons que nous pouvons reproduire les résultats exacts de la référence [9]. Il est important de mentionner que la régression linéaire a été effectuée sur chacune des deux énergies entrant dans la dérivée aux différences finies. Ce sont les deux valeurs obtenues par cette régression qui sont soustraites l'une de l'autre pour produire la figure 1.7.

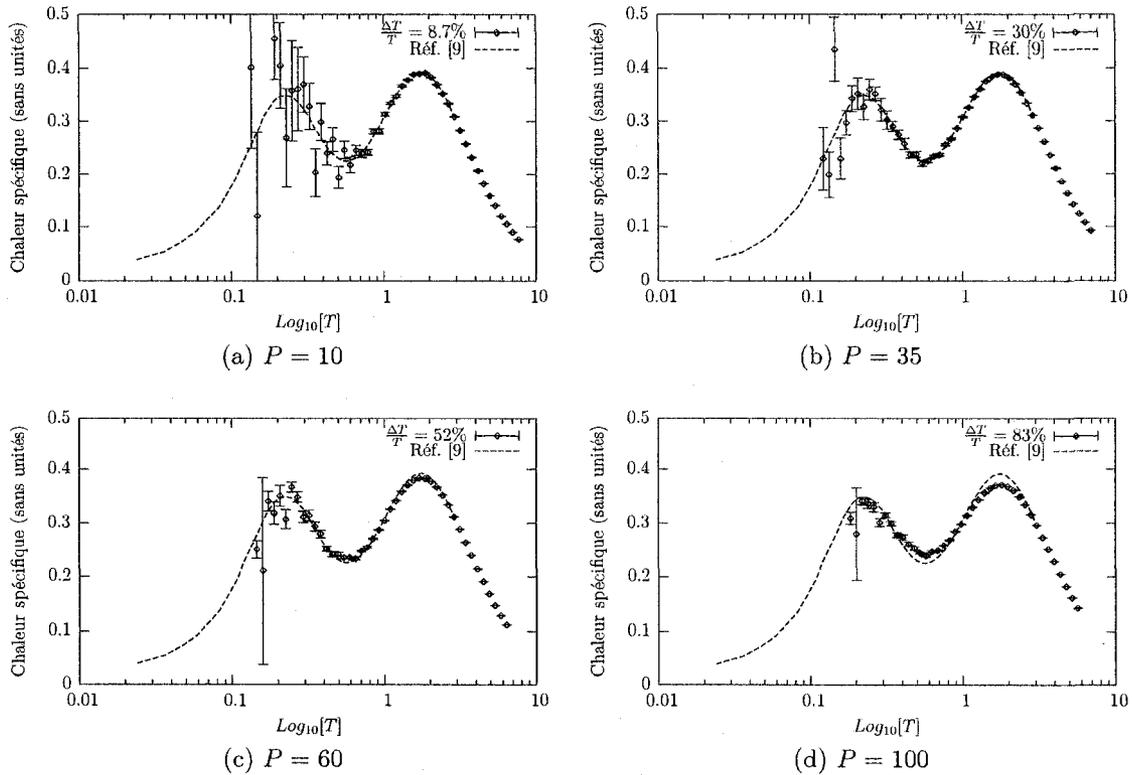


FIGURE 1.7: Chaleur spécifique pour différents rapports $\frac{\Delta T}{T}$, obtenue après régression linéaire en $(\Delta\tau)^2$, à partir des mêmes données qu'à la figure 1.6. Afin de trouver le bon pas de dérivation, il faut avoir un bon accord pour la portion à haute température, tout en minimisant les incertitudes sur la portion à basse température. Dans le cas présent, le meilleur accord est obtenu quand $\frac{\Delta T}{T} \simeq 30\%$. Si nous augmentons le pas, nous commençons à perdre l'accord quantitatif avec la structure à haute température.

La figure 1.7 nous montre qu'avec la valeur obtenue sur les incertitudes, un rapport $\frac{\Delta T}{T} \simeq 30\%$, nous permet de rendre compte des caractéristiques données par la courbe

de la référence. Cela est plutôt étonnant car *a priori* on s'attendrait à ce que l'erreur systématique soit grande pour un si grand rapport. Cela signifie que le coefficient $A(\beta)$ dans (1.58) ne devient jamais très grand. La dérivée troisième de l'énergie (deuxième de la chaleur spécifique) reste relativement petite partout. Si nous prenons un pas plus petit, les incertitudes sont trop grandes, alors que si nous prenons un pas plus grand, on ne reproduit plus le comportement à haute température. Tout va bien donc, jusqu'à présent, puisque nous pouvons reproduire les résultats de la référence [9] en utilisant cette méthode. Mais est-il possible d'obtenir des résultats acceptables en sautant l'étape de la régression linéaire? Nous sauverions ainsi du temps de calcul précieux⁴².

Supposons que l'on choisisse un $\Delta\tau$ tel que l'erreur systématique sur la courbe recherchée soit du même ordre de grandeur que l'erreur statistique. Il n'est pas toujours évident que faire un seul calcul soit plus rapide que d'en faire trois, un à la suite de l'autre. En effet, on sait que le temps de calcul est proportionnel à N_τ . Il est possible que la valeur de N_τ nécessaire à faire la mesure à petit $\Delta\tau$, soit plus grande que la somme des tranches de temps des trois⁴³ calculs nécessaires à la régression linéaire. À $\beta = 1$, en choisissant $\Delta\tau = \frac{1}{8}$, $\frac{1}{10}$ et $\frac{1}{16}$, le plus petit $\Delta\tau$ utilisable est $\frac{1}{34}$. Si le $\Delta\tau$ doit être plus petit encore, on utilise la régression linéaire.

Une étude du comportement de la pente de la régression pour différents U et β , nous permettrait de trouver une loi empirique qui nous permettrait de répondre à la question posée ci-haut!

Sans les régressions linéaires

La figure 1.9 contient beaucoup d'informations et il convient de l'expliquer quant à sa forme avant d'en examiner le contenu et d'en tirer des conclusions. Mais parlons d'abord un peu de la figure 1.8. Elle représente le $\Delta\tau$ utilisé dans le calcul de chacune des énergies. Cela semble paradoxal d'avoir d'aussi grands écarts de $\Delta\tau$ alors qu'on parle ici de $\Delta\tau \simeq 0.1$, une valeur qu'on voudrait fixe. Pourtant, on comprend que β varie continûment alors que N_τ , le nombre de tranches de temps imaginaire, est entier. Cela implique que pour deux valeurs de β qui sont près l'une de l'autre, on n'a qu'un entier disponible qui nous donnera une valeur se rapprochant de $\Delta\tau = 0.1$. Cette déviation de la valeur choisie peut être amplifiée, particulièrement à β petit et/ou si le $\Delta\tau$ qu'on fixe

⁴²Après tout, les calculs d'énergie nous donnent de bons résultats jusqu'à une valeur de $\Delta\tau = 0.125$, pourvu que l'on ne requiert pas que l'erreur associée au résultat cherché soit plus petite que 5%.

⁴³On utilise typiquement trois calculs pour faire les régressions linéaires.

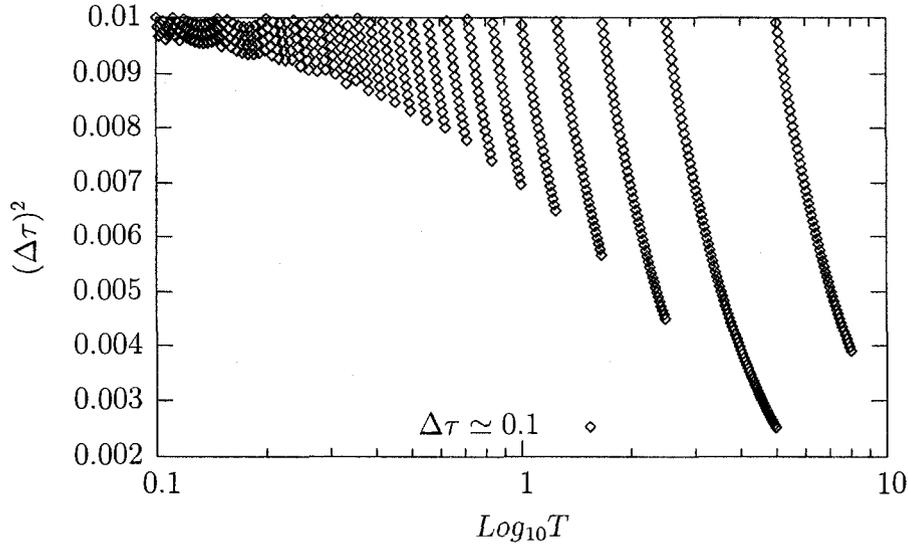


FIGURE 1.8: Valeur des différents $(\Delta\tau)^2$ en fonction de $\text{Log}_{10}T$, pour $\Delta\tau \simeq 0.1$. On ne peut garder $\Delta\tau$ fixe puisque bien que β varie continûment, il n'en est pas de même de N_τ , le nombre de tranches de temps imaginaire qui lui, est entier.

est grand.

Les trois graphiques de la figure 1.9 ont par ailleurs été générés avec le pas de dérivation « idéal », déterminé à la figure 1.7 : $\frac{\Delta T}{T} = 30\%$, soit un pas de 35 points. Les cercles qui sont distribués de part et d'autre de la valeur 0 de l'axe de droite représentent la différence entre les $(\Delta\tau)^2$ utilisés pour le calcul des deux énergies dans la différence finie. (On a utilisé ici les symboles « + » et « - » pour différencier les deux valeurs). Ce sont les $\Delta\tau$ dont on a parlé au paragraphe précédent, et le premier constat que l'on fait en observant la figure 1.9 s'y rattache. En effet, on observe, tout particulièrement dans le graphique 1.9a, une espèce d'oscillation (environ au centre) dont ne rend pas compte l'erreur calculée sur la dérivée. On peut voir cependant le même type d'oscillation dans le graphique situé au dessous de la chaleur spécifique, et qui illustre la différence des $(\Delta\tau)^2$. En observant les deux autres graphiques, donc quand $\Delta\tau$ diminue, on constate que les oscillations ont une plus faible amplitude. On peut, à l'oeil, déterminer la valeur qu'aurait une dérivée constituée de points où la différence des $(\Delta\tau)^2$ serait nulle, en faisant passer une courbe à travers les oscillations, comme le fait la ligne droite, à « 0 », à travers les valeurs de la différence.

Procédant ainsi, on constate que la courbe du premier graphique de la figure 1.9 passe par dessus tous les points du centre, et le haut de la bosse de gauche de la référence. On

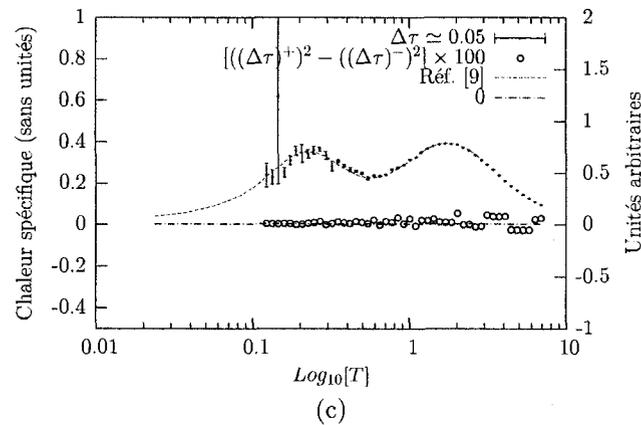
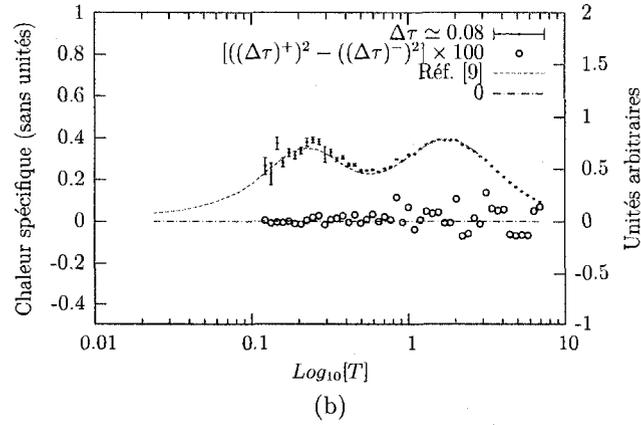
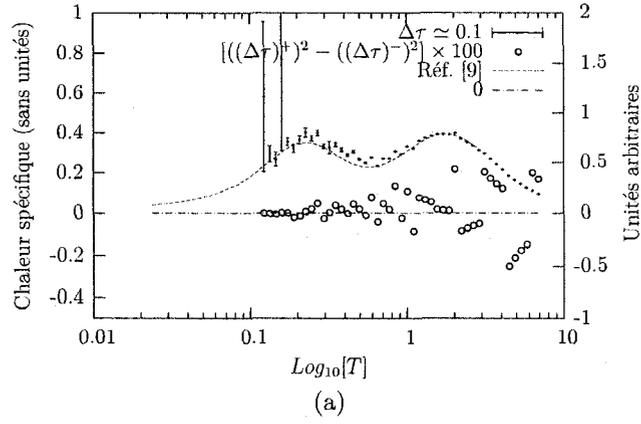


FIGURE 1.9: Chaleur spécifique pour différentes valeurs de $\Delta\tau$ (c.-à-d. sans régression linéaire en $(\Delta\tau)^2$), obtenues à partir des mêmes données qu'à la figure 1.6, pour $\frac{\Delta T}{T} \simeq 30\%$. Les cercles représentent la différence entre les $(\Delta\tau)^2$ utilisés pour les deux énergies impliquées dans le calcul des différences finies.

voit, de plus que, le minimum local est déplacé à plus haute température, en plus d'avoir une valeur plus grande. Le même comportement est observé pour les graphiques faits avec des $\Delta\tau$ plus faibles, bien qu'on se rapproche de plus en plus de la valeur donnée par la référence.

On peut donc en déduire que les courbes faites à partir de valeurs différentes de $\Delta\tau$ ne sont pas les mêmes. Selon la précision que l'on désire obtenir de nos résultats, il peut donc être très important de réaliser une régression linéaire en $\Delta\tau^2$. À moins qu'on ne le précise autrement, elles seront toujours faites dans ce travail.

1.3.4 Explication des régressions linéaires différentes pour les deux méthodes

En regardant les courbes obtenues à des $\Delta\tau$ à peu près semblables pour les deux méthodes utilisées (figures 1.4 et 1.9), il est tout à fait légitime de se demander d'où vient cette différence appréciable.

La réponse à cette question nous est donnée par l'équation (1.58). Nous avons déjà établi grâce à la figure 1.7 de la page 37, que le terme $A(\beta_0)$ de cette équation n'était pas très important dans les calculs. Reste donc les deux autres termes. Quand $\Delta\beta$ n'est pas très près de 0, le terme $D(\beta_0)$ n'est pas négligeable, et lorsqu'on fait une régression linéaire en $(\Delta\tau)^2$, on obtient une pente plus faible que dans le cas où $\Delta\beta \rightarrow 0$. En fait, comme $\Delta\beta$ est donné par $\frac{\Delta\beta}{\beta_0} = cste.$, le $B(\beta_0)$ est compensé par le terme $D(\beta_0)(\Delta\beta)^2 = Cste^2 D(\beta_0)\beta_0^2$. Ce terme croissant comme β_0^2 , il est intuitif de penser qu'étant négatif il puisse adoucir la pente de la régression obtenue avec $\Delta\beta \ll 1$ (figure 1.7). En quelque sorte donc, en rajoutant une erreur, on se rapproche plus vite de la « vraie » valeur de la chaleur spécifique! Ce résultat est donc fortuit ici et vient nous rassurer dans notre idée que les régressions linéaires sont nécessaires quand on abaisse la température, ou que l'interaction augmente.

1.4 Exploration du modèle

Comme nous voulons explorer ce qui se passe quand on passe d'un système 1D à un système 2D, on fait varier le paramètre d'anisotropie $t_{\hat{y}}$ de 0 à $t_{\hat{x}} (= 1)$ dans le hamiltonien de *Hubbard* (figure 1). Mais comment doit-on faire varier ce paramètre en fonction des autres paramètres étudiés?

1.4.1 Comparaison des dimensions : mise à l'échelle

La signification des interactions pour 1D et 2D n'est pas la même. Une interaction $U = 4$ est beaucoup plus importante en 1D qu'en 2D, par exemple. C'est que l'énergie moyenne de la bande impliquée dépend du nombre de dimensions du système, ce qui n'est pas le cas pour l'énergie potentielle. Naïvement, on peut penser à comparer les rapport $\frac{U}{W}$ des diverses dimensionnalités examinées, où W est la largeur de bande, soit la distance entre les deux extremums de la bande.

Pour le modèle de *Hubbard*⁴⁴, la bande est écrite (dans l'approximation des liaisons fortes) comme la relation de dispersion

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv -2 \sum_{d=1}^D t_d \cos k_d, \quad (1.72)$$

où D est la *dimensionnalité* du système, \mathbf{k} est un vecteur d'onde D -dimensionnel et t_d est l'*intégrale de saut* reliée à la dimension d que l'on examine. Ainsi, on voit que la largeur de bande en fonction de la dimensionnalité est donnée par

$$W_D = 4 \sum_{d=1}^D t_d. \quad (1.73)$$

Supposons que pour chacune des dimensionnalités $t_d \equiv t$, une constante. Cela nous donne

$$W_D = 4Dt. \quad (1.74)$$

La valeur obtenue nous montre que prendre le rapport $\frac{U}{W}$ comme point de comparaison est boiteuse. En effet, quand le nombre de dimensions devient infini, ce rapport tend vers 0, et la comparaison ne tient plus. Si on veut utiliser une méthode comme la DMFT (*dynamical mean field theory*) [30] qui est exacte en dimensions infinies, il faut chercher ailleurs.

Metzner et al. [31] utilisent plutôt le rapport $\frac{U}{\sqrt{\langle \epsilon(\mathbf{k})^2 \rangle}}$, où $\epsilon(\mathbf{k})$ est la relation de dispersion à $U = 0$, et la moyenne est faite sur la zone de *Brillouin*. En procédant ainsi, on voit qu'on peut comparer les dimensionnalités en remplaçant t par $\frac{t}{\sqrt{2D}}$, où t est fixé.

En supposant que l'anisotropie puisse être considérée comme une dimensionnalité

⁴⁴Cubique ou hypercubique.

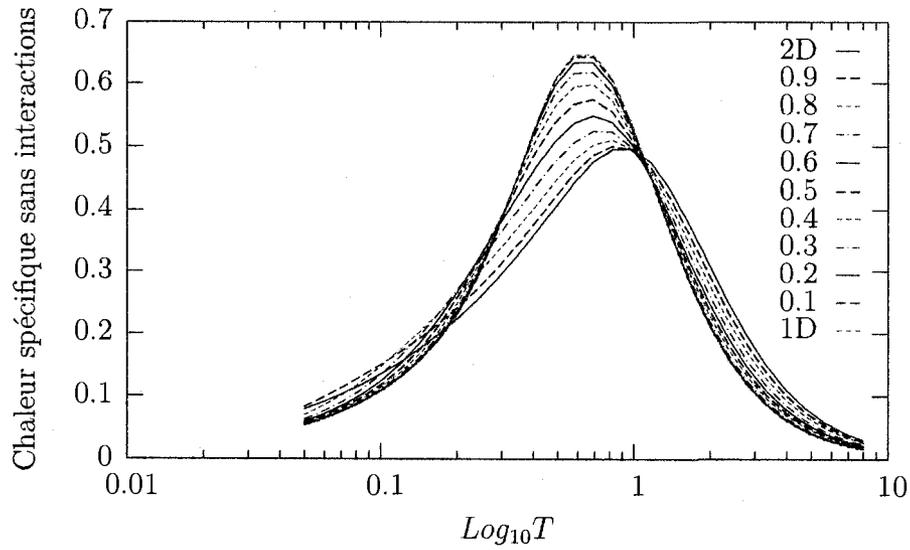
intermédiaire, on trouve que la relation à utiliser au demi-remplissage est :

$$t \rightarrow \frac{t}{\sqrt{2 \left(1 + \left(\frac{t_{\dot{y}}}{t} \right)^2 \right)}}. \quad (1.75)$$

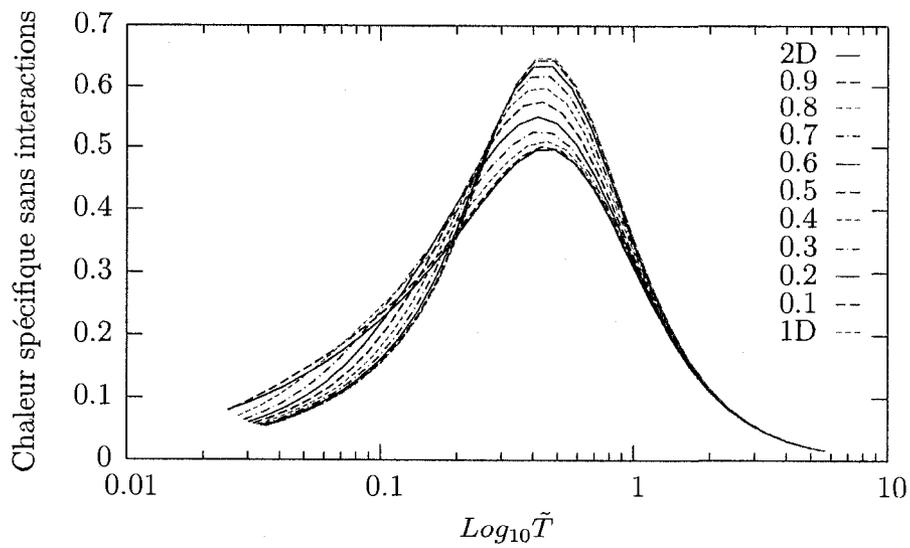
Comme toutes les énergies du problème sont déterminées par le t utilisé, il faut toutes les normaliser par ce facteur.

Afin de nous convaincre qu'on a choisi le bon facteur de normalisation, nous avons tracé, à la figure 1.10, les courbes de chaleur spécifique à $U = 0$ pour différents $t_{\dot{y}}$: sans normalisation de la température, et une fois les températures normalisées. Nous notons \tilde{T} une température normalisée, et plus généralement, toute autre quantité normalisée se voit coiffer d'un tilde. Dans le graphique donc, on voit, une fois la mise à l'échelle faite, que les maximums de chaleur spécifique sont bien alignés, et on se convainc ainsi que cette façon de faire est correcte.

Nous utiliserons cette normalisation dans le chapitre 4.



(a) Sans mise à l'échelle.



(b) Avec mise à l'échelle.

FIGURE 1.10: Normalisation des échelles d'énergie pour $U = 0$ pour différents t_g .

Chapitre 2

Chaleur spécifique (1D)

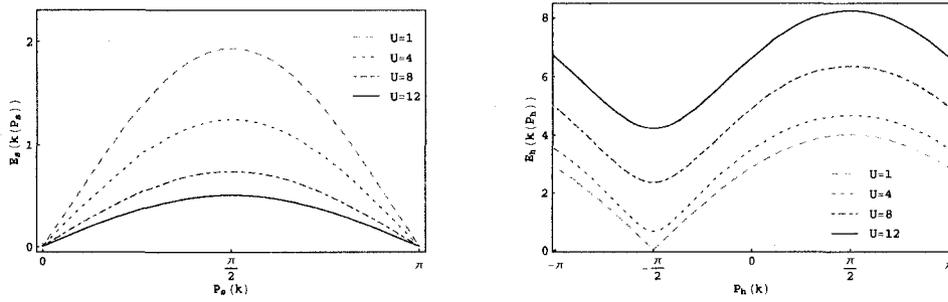
Le modèle de *Hubbard unidimensionnel* possède une solution exacte [32] développée à partir de l'*Ansatz* de Bethe. Cette solution est pourtant difficile à interpréter. En effet, il aura fallu 13 ans depuis sa découverte pour comprendre ce que sont les excitations de base du modèle, soit les *spinons* et les *holons* [33]. C'est la séparation spin-charge. En effet, les spinons et les holons sont des modes collectifs impliquant les degrés de liberté de spin et de charge respectivement. Les spinons sont des fermions de spin $\frac{1}{2}$ qui ne transportent pas de charge, tandis que les holons sont des particules de spin 0, dont la charge est égale à la charge de l'électron. Les relations de dispersion des spinons et des holons à demi-remplissage diffèrent quand $U \neq 0$, et sont illustrées aux figures 2.1a et 2.1b respectivement.

Nous avons démontré, au chapitre précédent, l'accord entre nos résultats et les résultats exacts, pour la chaleur spécifique. L'objectif de ce chapitre est de comprendre physiquement ces résultats.

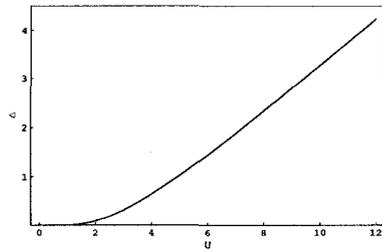
L'analyse de la chaleur spécifique passe par l'étude de quatre régimes. Soit deux régimes en couplage (fort et faible) fois deux régimes en température (basse et haute). Dans ce qui suit, nous allons expliquer les résultats de calculs MCQ obtenus en fonction de ces différents paramètres.

2.1 Cas limites

Il est intéressant de comprendre les cas limites du modèle afin de nous donner une intuition de ce qui peut se passer si l'on augmente graduellement les paramètres t ou U . De plus, on peut facilement traiter les cas limites puisqu'on en connaît les solutions



(a) Relation de dispersion pour des spinons à demi-remplissage. (b) Relation de dispersion des holons à demi-remplissage.



(c) Évolution du *gap* Δ pour les holons à demi remplissage en fonction de U .

FIGURE 2.1: Relations de dispersion de spinons et holons à demi-remplissage (le pas du réseau est fixé à 1). On constate la présence d'un *gap* à mesure que U augmente dans la relation de dispersion des holons (figure 2.1c).

exactes.

2.1.1 $U = 0$

Le cas $U = 0$ est la partie cinétique du hamiltonien de *Hubbard* sans interactions. Elle représente un système de fermions libres¹, et les états propres de cet hamiltonien sont des déterminants de *Slater* formés à partir des ondes de *Bloch*, c.-à-d. que le bon nombre quantique pour les décrire est k , la quantité de mouvement cristalline. La relation de dispersion pour ce système est donnée par

$$\epsilon(k) \equiv -2t \cos k. \quad (2.1)$$

Comme nous avons affaire à des fermions, on peut calculer l'énergie moyenne à température finie en peuplant les niveaux d'énergie avec la fonction de *Fermi-Dirac*, soit

$$f(\epsilon(k), T) \equiv \frac{1}{e^{\frac{1}{T}(\epsilon(k)-\mu)} + 1}. \quad (2.2)$$

et donc, c_V , la dérivée de cette énergie moyenne, est donnée par²

$$c_V \equiv -\beta^2 \frac{2}{N} \sum_{k \in Z.B.} \epsilon(k) \frac{df(\epsilon(k), \beta)}{d\beta} \quad (2.3)$$

avec N fini, ou encore, dans la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$), comme

$$c_{V_{N \rightarrow \infty}} \equiv -\beta^2 \frac{1}{\pi} \int_{Z.B.} \epsilon(k) \frac{df(\epsilon(k), \beta)}{d\beta}. \quad (2.4)$$

La figure 2.2 représente la chaleur spécifique sans interactions, en fonction de la température, pour différentes tailles de réseau. Le fait que l'on retrouve des comportements de chaleur spécifique différents pour différentes tailles est un exemple de ETF. Cela implique que les longueurs de corrélation caractéristiques du système deviennent plus grandes que le système lui-même. Autrement dit, le système est trop petit pour nous donner toute l'information nécessaire.

On peut montrer, grâce au développement de *Sommerfeld* (voir par exemple [34]), que la chaleur spécifique 1D à basse température est donnée, dans la limite thermodynamique,

¹Voir note de bas de page 1 à la page 1.

²Le facteur 2 dans l'équation 2.3 vient de la dégénérescence du spin.

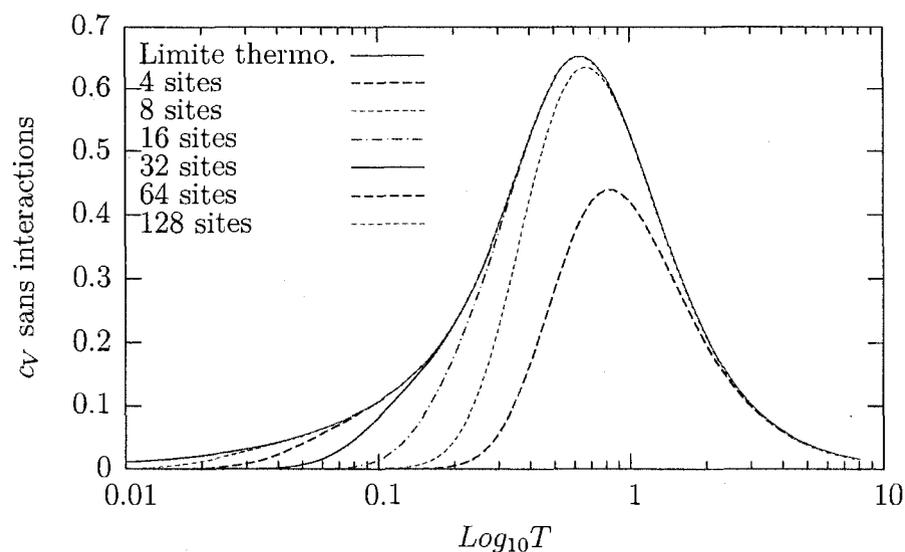


FIGURE 2.2: Chaleur spécifique 1D sans interactions pour différentes tailles N . On voit clairement l'effet de taille finie particulièrement présent pour $N = 4$. À $N = 128$, il faut atteindre une température relativement basse avant de voir les résultats s'éloigner de la limite thermodynamique.

par

$$c_V = \frac{\pi}{3}T, \quad T \ll 1. \quad (2.5)$$

La dépendance linéaire en T est typique du liquide de *Fermi* mais aussi du liquide de *Luttinger*.

La retombée de la chaleur spécifique à haute température s'explique par le fait qu'on a une seule bande, de largeur finie. Quand la température est suffisamment élevée, tous les niveaux sont également disponibles, et on a beau augmenter la température du système, l'énergie moyenne de ce dernier tend vers une constante, c.-à-d. que

$$\lim_{T \rightarrow \infty} c_V(T) \rightarrow 0^3. \quad (2.6)$$

Par opposition, pour une bande parabolique (électrons libres), on a une infinité d'états accessibles, et, à haute température, le gaz d'électrons se comporte comme un gaz parfait. En une dimension, on a : $c_V = \frac{n}{2}$ (avec $k_B = 1$) (d'après le théorème d'équipartition), une constante.

³Voir anomalie de *Schottky* à la section 2.1.2.

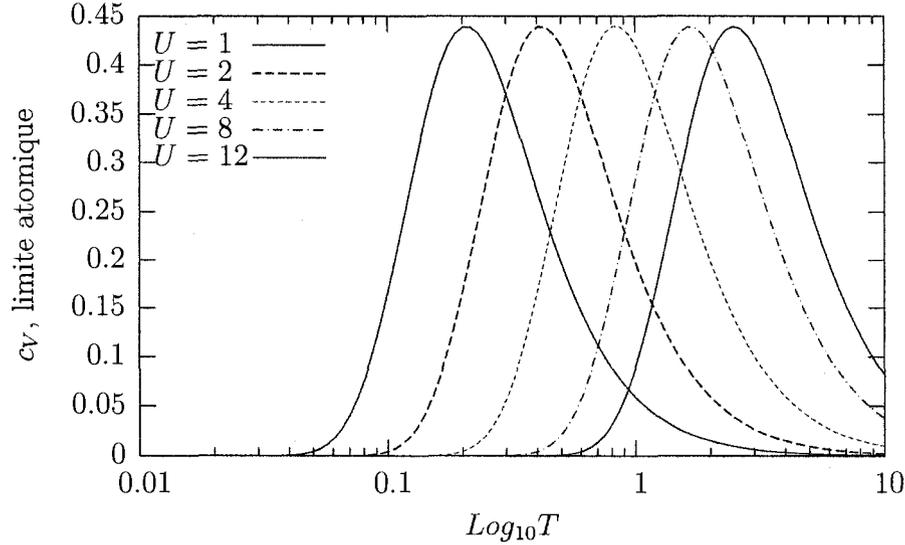
2.1.2 $t = 0$ 

FIGURE 2.3: Chaleur spécifique 1D dans la limite atomique, pour différentes valeurs d'interaction U . Le comportement à haute température se nomme anomalie de *Schottky*. La position du maximum est $T_{max} = \frac{U}{4.8}$.

La limite $t = 0$ est appelée *limite atomique*, puisque les électrons sont confinés à un seul site. On a alors affaire à un système à deux niveaux : un niveau d'énergie U , correspondant à une double occupation et un niveau d'énergie 0, correspondant à un site simplement occupé ou sans aucun électron.

La fonction de partition d'un pareil système est facile à calculer et à partir de cette dernière, on trouve la chaleur spécifique donnée par

$$c_V = \left(\frac{U}{4T}\right)^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{U}{4T}\right). \quad (2.7)$$

La descente à haute température s'explique de la même façon que pour le cas précédent, à cette exception près que le cas particulier d'un système à deux niveaux se nomme anomalie de *Schottky*. L'anomalie de *Schottky* apparaît, parce qu'à très haute température, on a autant de chance de trouver le système dans le niveau fondamental que dans l'état excité. L'énergie moyenne du système tend vers une constante en fonction de la température, et donc, la chaleur spécifique tend vers 0. Pour ce système, la position du maximum est donnée par $T_{max} = \frac{U}{4.8}$.

2.2 U et t finis

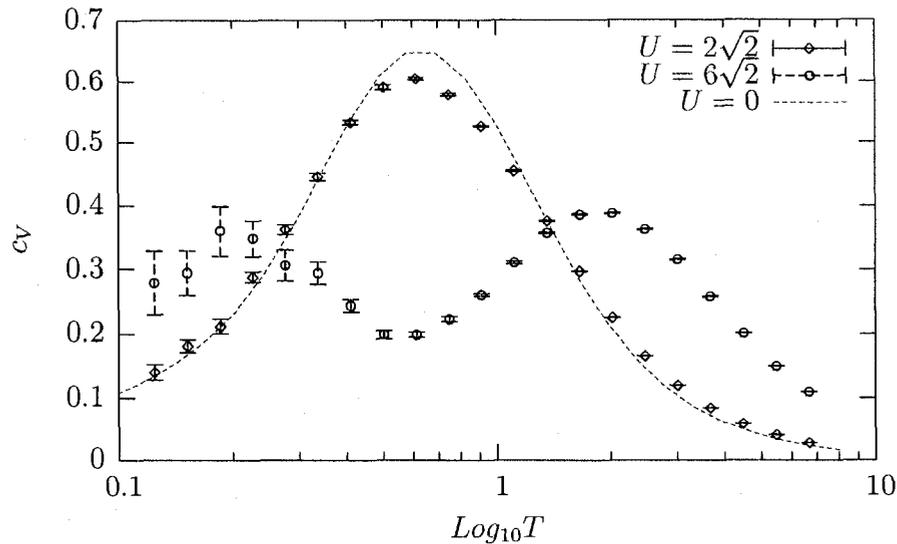


FIGURE 2.4: Chaleur spécifique 1D pour les fort et faible couplages. À fort couplage, deux pics sont présents alors qu'à faible couplage, on n'a qu'un seul pic.

En regardant les graphiques de chaleur spécifique pour différentes valeurs du couplage U , on constate tout de suite une différence majeure entre les régimes dits de fort et de faible couplage (c.-à-d. U respectivement plus grands et plus petits que la largeur de bande W_{1D}). La figure 2.4 illustre les deux cas. À fort couplage, la chaleur spécifique montre deux pics distincts alors qu'à faible couplage, on n'a qu'un seul pic.

2.2.1 Fort couplage

Le régime fort couplage est bien compris en $1D^4$. Les sous-sections qui suivent permettent de comprendre la figure 2.6 et la séparation des maximums à la figure 2.5.

Basse température : modèle de *Heisenberg*

Quand U est très grand, on peut utiliser la théorie des perturbations, en t . Dans ce cas, le hamiltonien non perturbé H_0 est le terme potentiel du modèle de *Hubbard*. À demi-remplissage et au deuxième ordre en théorie des perturbations, donc, le hamiltonien

⁴En 2D aussi d'ailleurs, comme nous le verrons à la section 3.2.1.

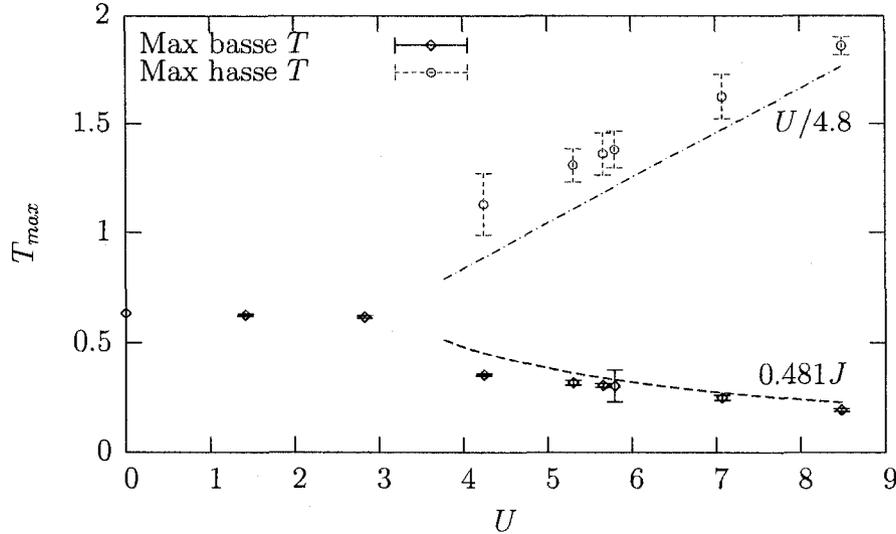


FIGURE 2.5: Positions des maximums en 1D pour différentes valeurs de U . À haute température, quand le couplage devient grand, on a le régime « anomalie de *Schottky* » ($T_{max} \simeq \frac{U}{4.8}$). À basse température, on a la limite donnée par le modèle d'*Heisenberg* ($T_{max} \simeq 0.481J$) [35]. La déviation systématique à haute température est due à ce qu'une partie de la chaleur spécifique cinétique persiste jusqu'à U très grand.

de *Hubbard* se transforme en le modèle de *Heisenberg* antiferromagnétique.

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.8)$$

avec $J = 4t^2/U$, et où la somme est faite sur les plus proches voisins seulement. Les excitations de basse énergie viennent du processus physique appelé *superéchange*, dans lequel des processus virtuels permettent à deux spins de signes opposés de changer de site.

Dans la théorie des perturbations, on a, par identification avec l'équation (2.8), que $\hat{H}_0 \rightarrow -\hat{H}$, $\hat{H}_1 \rightarrow 2\hat{H}$ et donc $\hat{H}_0 \rightarrow -2\hat{H}_1$. Autrement dit, la portion potentielle du système correspond à « moins deux fois » la portion cinétique ; cette relation se conservant dans la dérivée. On voit bien que c'est exactement ce que l'on observe à basse température à la figure 2.6⁵. Or, contrairement à ce qui se passe aux autres dimensionnalités, la relation de dispersion qu'on obtient n'est pas celle des ondes de spin. En effet, en une dimension,

⁵Bien sûr, le fait d'obtenir une chaleur spécifique négative (dérivée de la double occupation) nous indique que de parler des composantes cinétique et potentielle de la chaleur spécifique séparément n'a pas de sens. Voir section 1.3.1 page 33.

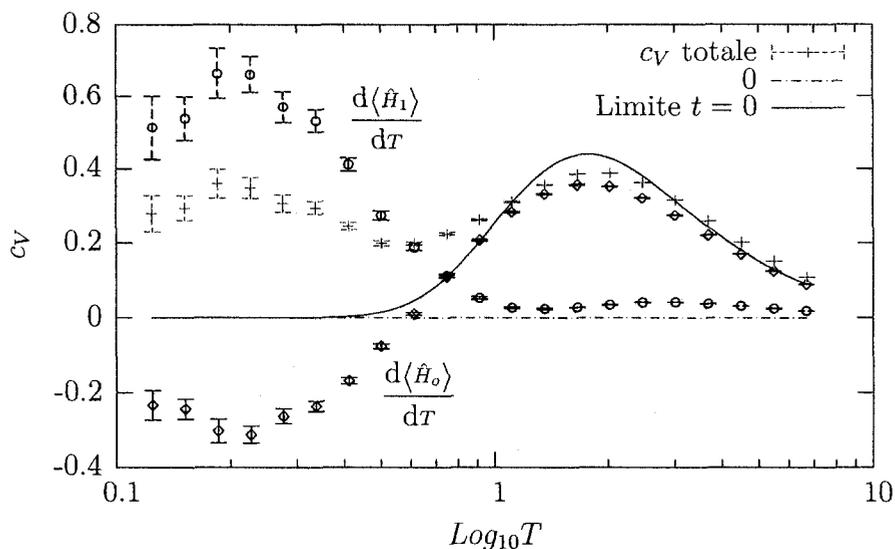


FIGURE 2.6: Chaleur spécifique 1D pour $U = 6\sqrt{2}$, c.-à-d. fort couplage. Sur la figure, on a mis les composantes potentielle ($\frac{d\langle \hat{H}_0 \rangle}{dT}$) et cinétique ($\frac{d\langle \hat{H}_1 \rangle}{dT}$) de la chaleur spécifique. À basse température, on trouve la chaleur spécifique pour le modèle de *Heisenberg* antiferromagnétique (2.8) alors qu'à haute température, on tombe à peu près sur la limite $t = 0$.

un état antiferromagnétique ordonné n'existe pas et cela même à température nulle [32]. Les excitations élémentaires sont les *spinons* [33], des ondes de spin possédant un spin $\frac{1}{2}$ ⁶. Ce sont donc des fermions, dont la relation de dispersion à demi-remplissage est illustrée, pour différentes valeurs de U , à la figure 2.1a. Ils se comptent toujours par paires.

Une autre confirmation de ce que c'est la physique du modèle de *Heisenberg* que l'on observe à basse température, est la dépendance de la position du maximum à l'interaction U . En effet, Bonner *et al.* [35] ont montré que $T_{max} \simeq 0.481J$ pour le modèle de *Heisenberg unidimensionnel*. La figure 2.5 nous montre que plus l'interaction U augmente, plus on se rapproche de la limite de *Heisenberg*. Les écarts observés à plus faible U sont dus au fait que la bosse à haute température continue d'influencer la bosse à basse température jusqu'à ce que l'interaction soit suffisamment grande. Haute température : Limite atomique ($t = 0$)

À haute température et fort U , on trouve la limite atomique ($t = 0$); ou, du moins, on doit s'en approcher. Encore une fois, on semble tendre vers ce comportement seulement quand U est très grand. La raison pour laquelle le maximum est décalé vers les températures plus hautes est, comme on peut le constater à la figure 2.6, qu'il subsiste une partie de chaleur spécifique cinétique dont le maximum est plus haut que $U/4.8$. Ce que cette bosse dans la chaleur spécifique cinétique à haute température signifie physiquement, sera discuté dans le chapitre suivant. Quoi qu'il en soit, c'est lorsque cette structure devient très petite qu'on tombe sur la limite $t = 0$, et cela ne se produit qu'à très fort U . Notons que la chaleur spécifique potentielle, elle, tombe bien sur le pic de l'anomalie de *Schottky*.

2.2.2 Faible couplage

En regardant encore une fois les relations de dispersion pour les excitations de basse énergie (figures 2.1), on voit qu'à $U = 0$, les vitesses $v_{spinon} = v_{holon} = v_{Fermi} = 2$. Quand U augmente, les vitesses changent et un léger *gap* se forme (figure 2.1c) dans la relation de dispersion des *holons*. La grandeur du *gap* augmente radicalement autour de $U \simeq 3$, c.-à-d. autour de l'endroit où le maximum unique se sépare en deux et nous mène vers le fort couplage. Le pic de droite est dû au *gap* d'activation des *holons* [36].

À basse température, on n'observe aucune structure semblable à celle que l'on retrouve en deux dimensions (chapitre 3) pour des valeurs de couplage équivalentes. En 1D, le

⁶Contrairement aux magnons qui possèdent un spin de 1.

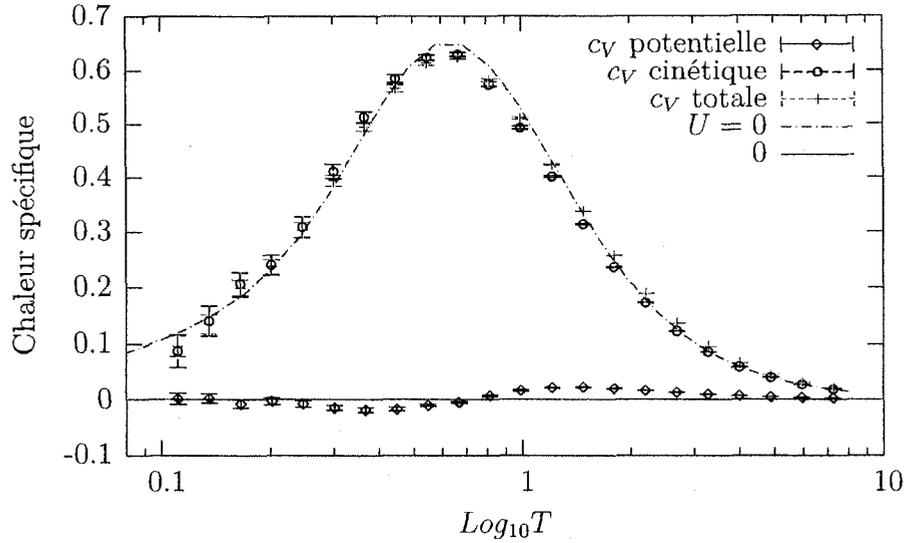


FIGURE 2.7: Chaleur spécifique 1D pour $U = \sqrt{2}$, c.-à-d. faible couplage. On est encore très près de la limite $U = 0$.

calcul *RPA* pour la susceptibilité de spin $\chi_{Spin}^{RPA}(\mathbf{Q}, iq_0 = 0)$ prédit une divergence à température finie ($\mathbf{Q} = (\pi)^7$ et $iq_0 = 0$ est la fréquence de *Mastubara* nulle) et donc, une transition de phase vers l'antiferromagnétisme, comme nous le verrons pour le cas 2D. On sait par contre qu'en 1D, la classe de diagrammes sommés dans l'approche RPA est annulée exactement par une autre classe de diagrammes [37]. Ces effets d'interférence sont à l'origine de l'absence de structure à basse température en une dimension.

En termes de longueur de corrélation magnétique ξ_{AF} : la longueur de corrélation antiferromagnétique ne devient jamais plus grande que la longueur de *de Broglie* thermique ξ_{th} (pas d'ordre à longue portée même à température nulle). En fait, les longueurs caractéristiques du système sont toutes du même ordre de grandeur puisque quand U est petit, les excitations ont à peu près toutes la même vitesse.

⁷ $\mathbf{Q} = (\pi)$ est appelé vecteur d'onde antiferromagnétique.

Chapitre 3

Chaleur spécifique (2D)

Contrairement au cas *unidimensionnel* (chapitre 2), le modèle de *Hubbard bidimensionnel* ne possède pas de solution exacte ; aussi doit-on recourir à diverses méthodes afin d'en extraire le plus d'information possible [13].

À l'instar du cas 1D par contre, l'analyse de la chaleur spécifique passe par l'étude de quatre régimes de couplage et de température.

3.1 Cas limites

Ici aussi nous passons en revue les cas limites, qui ressemblent fort au cas *unidimensionnel*.

3.1.1 $U = 0$

La relation de dispersion pour ce système en 2D est

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv -2(t_x \cos k_x + t_y \cos k_y). \quad (3.1)$$

t_x et t_y sont des intégrales de saut qui nous permettent de modéliser un système anisotrope (comme nous le ferons au chapitre suivant). Dans le cas strictement 2D, on a $t_x = t_y = t$. Encore une fois, on peut utiliser la fonction de *Fermi-Dirac* (2.2) pour trouver l'énergie moyenne et la chaleur spécifique du système.

La figure 3.1 représente la chaleur spécifique sans interactions en fonction de la température pour différentes tailles de réseau. Tout comme en 1D, les ETF se manifestent

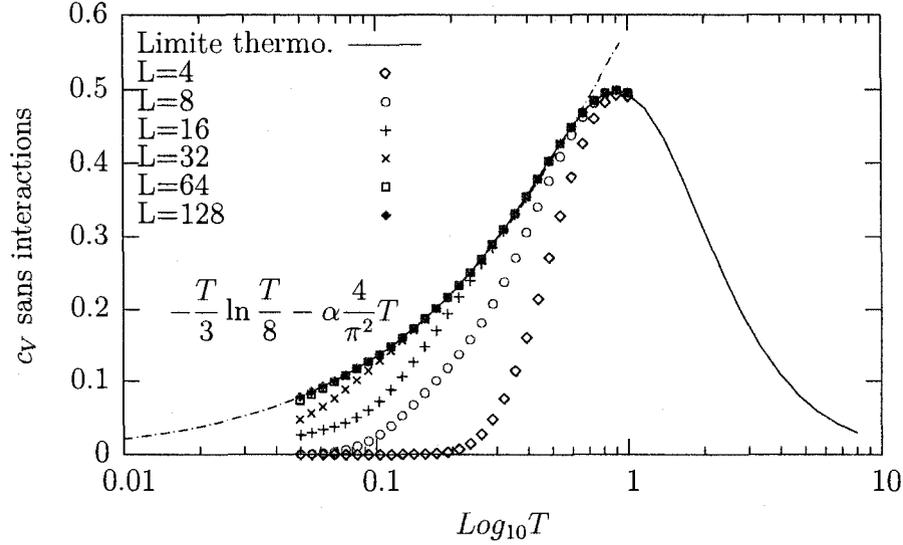


FIGURE 3.1: Chaleur spécifique 2D sans interactions sur réseau carré. L correspond au nombre de sites sur un côté. Encore une fois, plus on utilise de sites pour le réseau, plus il faut descendre en température pour voir apparaître les effets de taille. Le comportement de la c_V à basse température n'est plus linéaire.

à basse température. Selon ce graphique, il faudrait utiliser un réseau 64x64 pour que les effets de taille soient insignifiants pour une température $T = 0.05$. Heureusement, lorsqu'on fait grandir U , les tailles de réseau sont plus raisonnables et on a un accord qualitatif avec la limite thermodynamique évaluée par la méthode ACDP au-dessus de T_x (comme nous le verrons à la figure 3.7).

La densité d'états pour le cas 2D montre un pic logarithmique à l'énergie de *Fermi* $\epsilon_F = 0$, c.-à-d. à demi-rempli. À cet endroit, le développement de *Sommerfeld* ne fonctionne plus. On trouve plutôt, en faisant l'intégrale analytiquement¹ :

$$c_V = -\frac{T}{3} \ln \frac{T}{8} - \alpha \frac{4}{\pi^2} T, \quad T \ll 1, \quad (3.2)$$

où $\alpha \simeq 0.29018556$. Ce résultat est plutôt surprenant parce qu'on s'attendait à une chaleur spécifique linéaire en température. Le calcul analytique montre qu'on peut attribuer ce comportement à la présence du pic logarithmique, ou singularité de *Van Hove*, dans la densité d'états.

¹Il a fallu faire une approximation autour du pic pour la densité d'états en supposant qu'à basse température, les états excités sont ceux qui restent près du niveau de *Fermi* (de l'ordre de $k_B T$).

Commentaire sur la singularité de *Van Hove* dans le cas anisotrope

Bien que cette étude se limite au demi-remplissage et donc tout particulièrement à $\epsilon_F = 0$, nous avons remarqué deux pics dans la densité d'états pour $0 < t_{\hat{y}} < 1$, à $U = 0$. Ces deux pics sont placés à $\epsilon_F = -2(1 - t_{\hat{y}}), 2(1 - t_{\hat{y}})$, valeurs qui peuvent être trouvées en examinant la symétrie de la surface de *Fermi* autour de ces énergies de *Fermi*. Dans le cas strictement 2D, les deux structures se joignent pour former un seul grand pic. En calculant la chaleur spécifique autour de ces pics et en trouvant un comportement non linéaire en T , on validerait l'hypothèse de l'influence de la singularité de *Van Hove* sur la chaleur spécifique à basse température, pour différentes valeurs de $t_{\hat{y}}$.

3.1.2 $t = 0$

Comme la limite $t = 0$ n'implique que la partie potentielle du hamiltonien de *Hubbard*, et que cette dernière ne dépend pas de la dimensionnalité du système, les comportements de la chaleur spécifique en une et deux dimensions, sont strictement identiques.

3.2 U et t finis

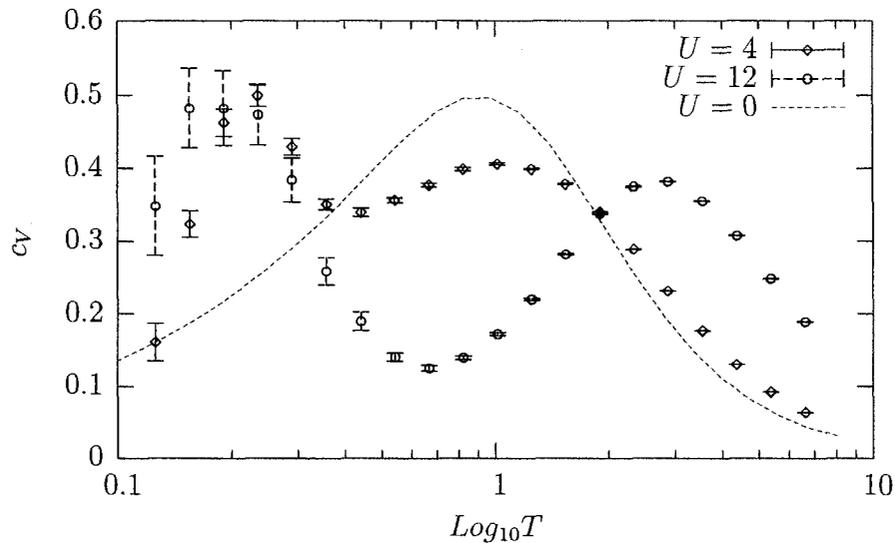


FIGURE 3.2: Chaleur spécifique 2D pour les fort et faible couplages. Pour toutes les valeurs de couplage, on trouve 2 pics. La nature de ces divers pics est par contre différente.

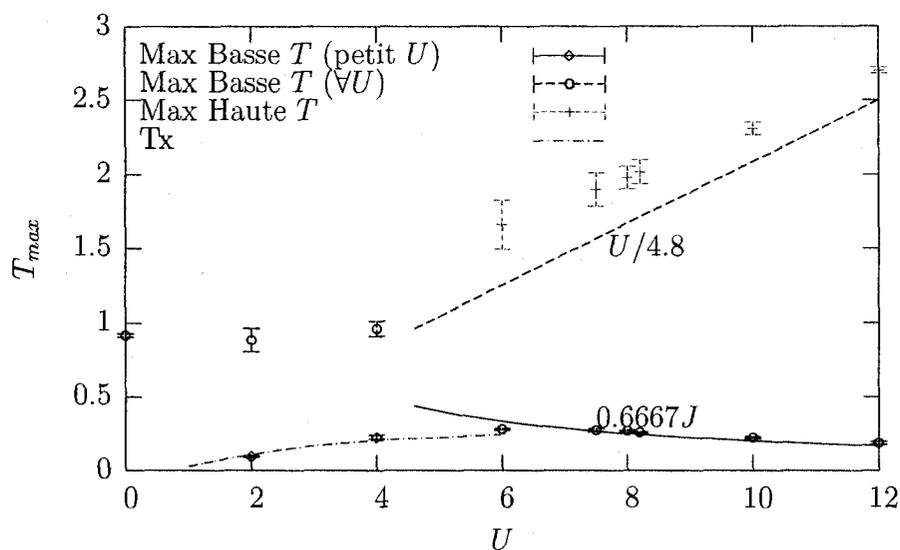


FIGURE 3.3: Positions des maximums en 2D pour différentes valeurs de U . Quand le couplage devient grand, on a le régime « anomalie de *Schottky* », à haute température ($T_{max} \simeq \frac{U}{4.8}$), et la limite fort couplage donnée par le modèle d'*Heisenberg*, à basse température ($T_{max} \simeq \frac{2}{3}J$ [38]). La déviation systématique à haute température est due à ce qu'une partie de chaleur spécifique cinétique persiste jusqu'à U très grand.

À faible couplage et basse température, un pic de chaleur spécifique apparaît, lié à une remontée de la localisation à basse température. On comprend, grâce à la méthode ACDP (TPSC) [12], que cette localisation est le résultat de l'apparition de fluctuations antiferromagnétiques. La courbe notée T_x , obtenue par cette méthode, est la température dite de *crossover* entre le régime désordonné et le régime classique renormalisé qui s'étend de T_x à $T_c = 0$, température où s'opère la transition de phase vers l'état ordonné antiferromagnétique. (Données ACDP extraites de la référence [12].)

Duffy *et al.* [10], ainsi que Paiva *et al.* [11] ont montré la présence de deux pics de chaleur spécifique persistant pour toutes les valeurs de couplage en deux dimensions. Ce résultat est très différent du cas *unidimensionnel*. Dans ce qui suit, nous allons donner une explication de ce que l'on observe.

3.2.1 Fort couplage

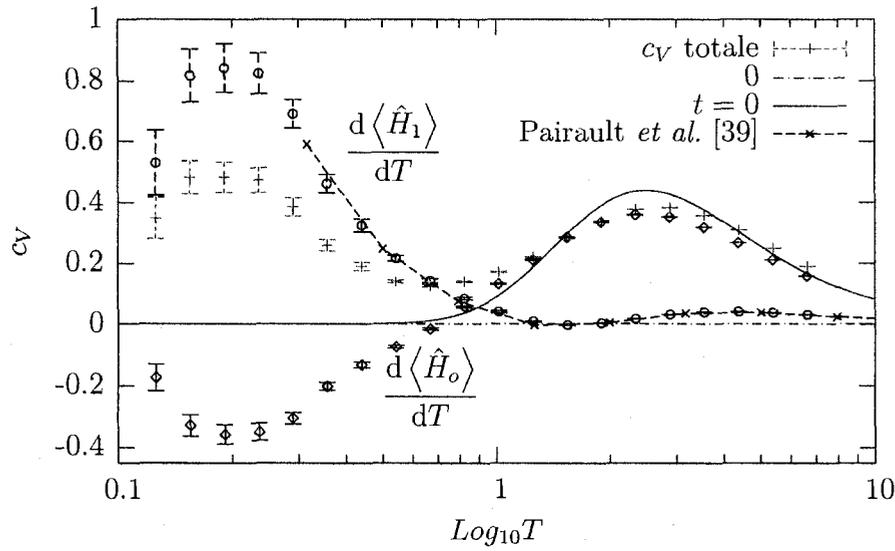


FIGURE 3.4: Chaleur spécifique 2D pour $U = (2)6 = 12$, c.-à-d. fort couplage. Sur la figure, on a mis les composantes potentielle ($\frac{d\langle \hat{H}_0 \rangle}{dT}$) et cinétique ($\frac{d\langle \hat{H}_1 \rangle}{dT}$) de la chaleur spécifique. À basse température, on trouve une chaleur spécifique proche de celle du modèle de *Heisenberg* antiferromagnétique (2.8) alors qu'à haute température on tombe à peu près sur la limite $t = 0$. La composante de chaleur spécifique cinétique restante a pu être reproduite à partir de l'équation 3 de [39] (Données fournies pas A.-M.S. Tremblay).

Basse température : modèle de *Heisenberg*

La même justification que pour le cas *unidimensionnel* s'applique à basse température, c.-à-d. que le modèle de *Hubbard* devient le modèle de *Heisenberg*. Ici, cependant, les excitations de basse énergie sont des magnons. En 2D, la position du maximum se déplace comme $T_{max} \simeq \frac{2}{3}J$ (figure 3.3) tel que trouvé par Jaklič *et al.* [38]. On se souvient que $T_{max} \simeq 0.481$ en 1D (chapitre 3).

Nous avons rappelé au chapitre précédent que le modèle de modèle de *Heisenberg* a ceci de particulier que

$$\frac{d\langle\hat{H}_1\rangle}{dT} = -2\frac{d\langle\hat{H}_0\rangle}{dT}. \quad (3.3)$$

Or en examinant la figure 3.4, on remarque que la relation entre les deux dérivées est plutôt

$$\frac{d\langle\hat{H}_1\rangle}{dT} > -2\frac{d\langle\hat{H}_0\rangle}{dT}. \quad (3.4)$$

On n'a donc pas encore atteint la limite *Heisenberg* pour $U = 12$. Cet effet est plus grand pour des U plus faibles et tend à diminuer à mesure que U augmente. La présente étude n'est pas la seule à faire ce constat. En effet, Coldea *et al.* [40], qui ont été parmi les premiers à traiter de ce sujet, ont été cités 117 fois à ce jour² ! C'est dire l'importance qu'a eu une telle découverte pour les chercheurs dans ce domaine.

Haute température : limite atomique ($t = 0$)

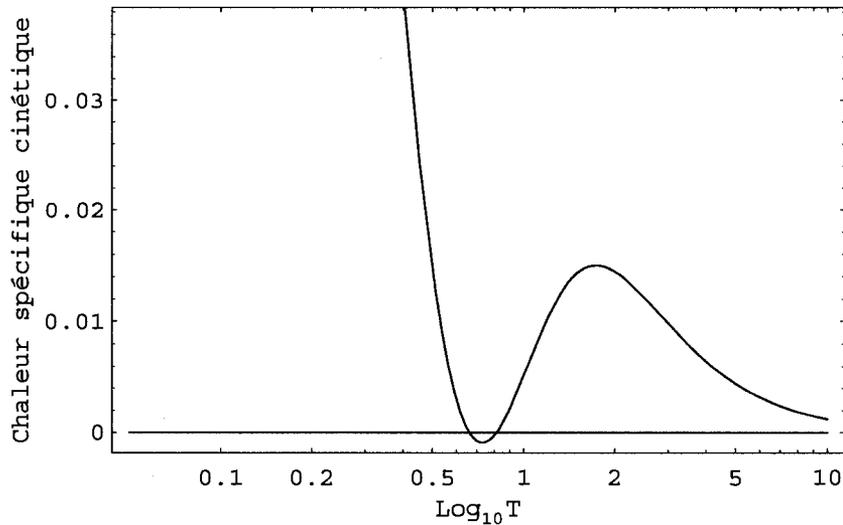


FIGURE 3.5: Chaleur spécifique cinétique pour deux sites et $U = 6$. On voit l'apparition d'une seconde bosse, qu'on peut attribuer à la présence du terme de saut t entre les deux sites. Cette bosse est toutefois moins intense que pour des tailles de réseau plus grandes.

À haute température, on retombe sur la limite atomique. Et, encore une fois, une bosse subsiste dans la chaleur spécifique cinétique, qui nous empêche de tomber directement

²Pour un traitement en profondeur, le lecteur est invité à consulter la thèse de doctorat de Jean-Yves Dellanoy [41].

sur l'anomalie de *Schottky*. On peut se demander si cet effet systématique n'est pas dû au pas de dérivation utilisé, par exemple. Des résultats analytiques, basés sur un développement à fort couplage de la fonction de *Green* obtenu par Pairault *et al.* [39], montrent que cette structure est bien réelle (figure 3.4) et est très bien modélisée par la courbe du calcul analytique. Comment interpréter ces résultats? Tout d'abord, il faut noter que lorsque le couplage augmente, la densité d'états se creuse jusqu'à ce qu'il y ait une région où la densité est nulle, ce qui se traduit par une bande interdite. Les deux bandes résultantes de part et d'autre de ce *gap* se nomment bandes de *Hubbard* (*Hubbard bands*) (voir figure 3.6). Pour $t = 0$, elles se résument à deux niveaux d'énergie. Or, à l'intérieur de ces bandes, des sauts intersites sont permis. On peut spéculer que dans la bande supérieure, les états de plus haute énergie, donc de plus haute température, représenteront des situations où il y a des sauts. Les positions des bosses viennent valider ce raisonnement. La bosse de c_V cinétique est toujours à plus haute température que la bosse de c_V potentielle. La même situation se produit en 1D. La figure 3.5 nous montre qu'on peut reproduire qualitativement³ l'effet cherché en n'utilisant que deux sites!

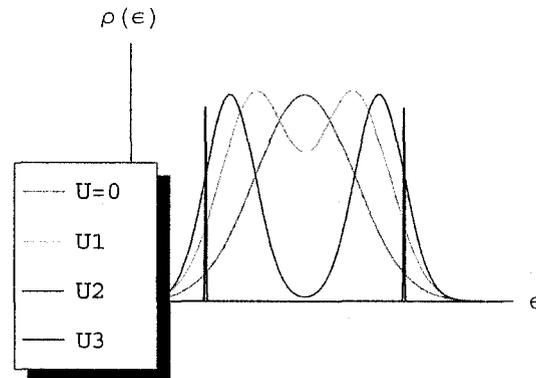


FIGURE 3.6: Représentation schématique de l'évolution de la densité d'états $\rho(\epsilon)$ avec U . Ici on a $U = 0 < U1 < U2 \ll U3$. Plus U augmente, plus la densité d'états se creuse au niveau de *Fermi*. À la limite $t \rightarrow 0$ ($\sim U3$), il ne reste que 2 états accessibles (anomalie de *Schottky*).

3.2.2 Faible couplage

À fort couplage et haute température donc, les comportements 1D et 2D sont pratiquement les mêmes. Cela est un peu prévisible puisque les fortes interactions tendent à

³L'effet de taille finie est très important même pour cette gamme de paramètres.

localiser les électrons et donc, les effets reliés à la dimensionnalité du système deviennent de moins en moins pertinents à mesure qu'on augmente U . C'est à faible U qu'on peut voir la différence la plus marquée, c.-à-d. deux pics pour toutes les valeurs de couplage examinées.

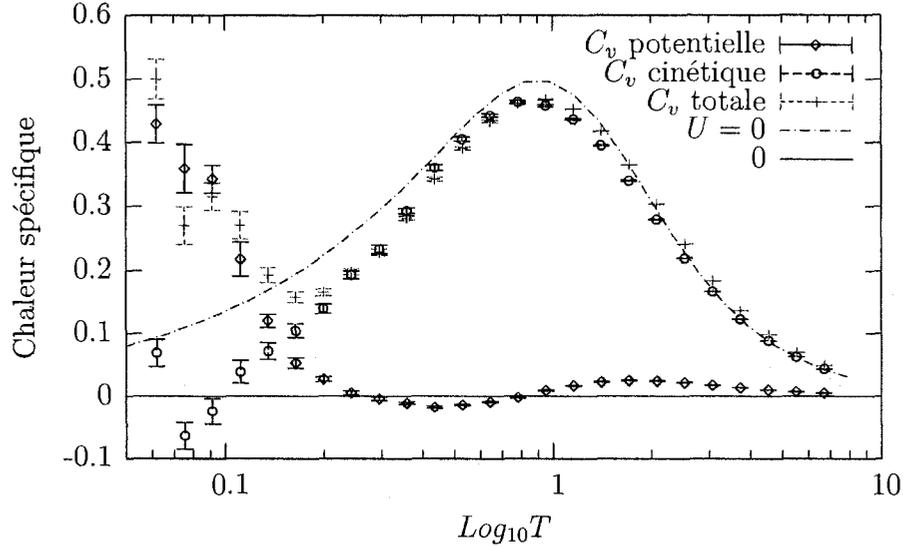


FIGURE 3.7: Chaleur spécifique 2D pour $U = 2$, c.-à-d. faible couplage. On est encore très près de la limite $U = 0$. On voit pourtant une bosse apparaître à basse température, dont l'origine est reliée aux fluctuations antiferromagnétiques.

Basse température : fluctuations antiferromagnétiques

En observant la bosse à basse température et les contributions respectives de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique à cette bosse, on constate que cette dernière est due à l'apparition d'une structure « piquée » dans la chaleur spécifique potentielle elle-même, donc à une variation de la double occupation ou, autrement dit, de la localisation des particules sur chacun des sites, en fonction de la température. La localisation crée un moment local $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ puisque

$$\begin{aligned} \langle (S_i^z)^2 \rangle &= \langle (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})^2 \rangle \\ &= n - 2 \langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle \end{aligned} \quad (3.5)$$

où, dans le cas présent, $n = 1$ (demi-remplissage). La figure 3.8 montre ce même moment local en fonction de la température.

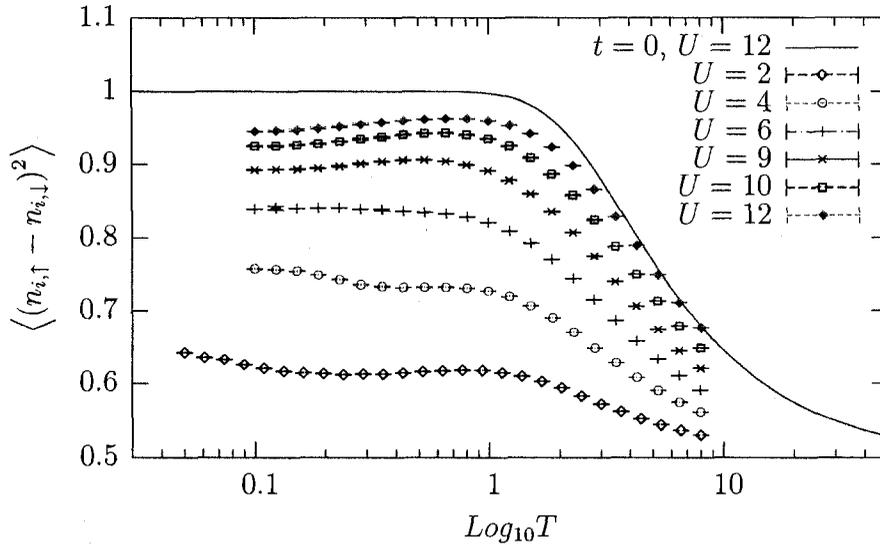


FIGURE 3.8: Moment local $\langle (S_i^z)^2 \rangle$, pour différents U . Pour de grands U , le moment local ne comporte qu'une bosse, qui correspond à un minimum de double occupation. À faible couplage, on a un accroissement supplémentaire de la localisation, à basse température. Cet accroissement est dû à l'augmentation des fluctuations antiferromagnétiques. Les résultats de cette figure valident ceux obtenus par Paiva *et al.* [11].

Pour toutes les valeurs de U , on constate la présence d'un maximum dans la courbe à $T \sim 1$. Ce maximum est présent pour toutes valeurs de couplage et pour toutes dimensionnalités⁴. Il s'agit d'un effet relié à l'entropie du système. De ce point de vue, en partant des basses températures, la double occupation peut diminuer parce que cela favorise la formation d'un moment local et donc, une augmentation de l'entropie. Éventuellement, l'excitation thermique fera remonter l'entropie. Une autre des façons d'expliquer ce phénomène est de constater que du point de vue de la double occupation, il y a un minimum lorsque la longueur thermique de *de Broglie* devient comparable au pas du réseau (à $T \sim 1$). Pour des températures plus grandes, la double occupation augmente à cause des excitations thermiques alors qu'à plus basse température, la nature d'onde plane des états devient plus apparente et la double occupation augmente aussi. Ce problème a entre autres été abordé par F. Lemay dans sa thèse de doctorat [42]⁵. L'*approche autocohérente à deux particules* (ACDP) reproduit quantitativement assez bien le minimum de double

⁴Elle se traduit, par un 0 dans la chaleur spécifique potentielle.

⁵Cet effet, pourrait être l'analogie de l'effet *Pomeranchuk* pour l'hélium trois [43], mais ça n'est pas clair [44].

occupation.

Pour de faibles valeurs de couplage, on voit, à basse température, une remontée du moment local. Cette remontée correspond bien sûr à notre maximum de chaleur spécifique. Le système a donc tendance à vouloir se localiser à basse température. À quoi cette localisation est-elle due? Un calcul champ moyen (*Hartree-Fock*, *RPA*) nous donne une transition vers la phase antiferromagnétique, à température non nulle. Ces théories de champs moyens ne fonctionnent pas en 2D cependant, puisqu'elles supposent l'existence d'un ordre à longue portée, ce qui est expressément interdit, à température finie, par le théorème de *Mermin-Wagner* [45].

Examinons maintenant la relation

$$\langle (S_i^z)^2 \rangle = n - 2 \langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\overbrace{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}^{\chi_{spin}(\mathbf{q}, iq_n)}}{1 - \underbrace{\frac{U_{spin}}{2}}_{2U \frac{\langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle}{n^2}} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (3.6)$$

appelée *règle de somme du moment local*, et obtenue dans le cadre de ACDP⁶ [12]. Cette dernière équation possède une forme de type RPA conventionnelle, à cette différence près que U est remplacée par U_{spin} . $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ est la susceptibilité sans interactions en fonction du vecteur d'onde \mathbf{q} et de la fréquence de *Mastubara* iq_n , définie comme

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) \equiv \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})) - f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k}) - iq_n}, \quad (3.7)$$

où $f(\epsilon(\mathbf{k}))$ est la fonction de *Fermi-Dirac* et V est le volume, donc le nombre de sites dans le réseau puisque le paramètre de maille est fixé à 1. Dans cette approche, $\langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle$ est obtenue de façon autocohérente.

En analysant ce qui se passe à basse température et faible couplage ($U = 2$) (figure 3.9), on voit qu'effectivement, on prédit une remontée de la chaleur spécifique potentielle, telle que trouvée par le MCQ. En augmentant la taille du système, les ETF s'amenuisent et on s'approche de la limite thermodynamique obtenue avec ACDP. Cette méthode ayant été validée (numériquement) auparavant du point de vue de la thermodynamique [44], on confirme donc que ce sont les fluctuations antiferromagnétiques qui sont à l'origine de

⁶ou TPSC (*two-particle self-consistent*)

l'apparition du deuxième pic. En effet dans la méthode ACDP on peut montrer qu'on a une remontée exponentielle de la longueur de corrélation antiferromagnétique en fonction de l'inverse de la température. La transition de phase ne se produisant qu'à $T = 0$, on respecte du même coup le théorème de *Mermin-Wagner* [45]. On ne voit la signature des fluctuations antiferromagnétiques qu'en 2D.

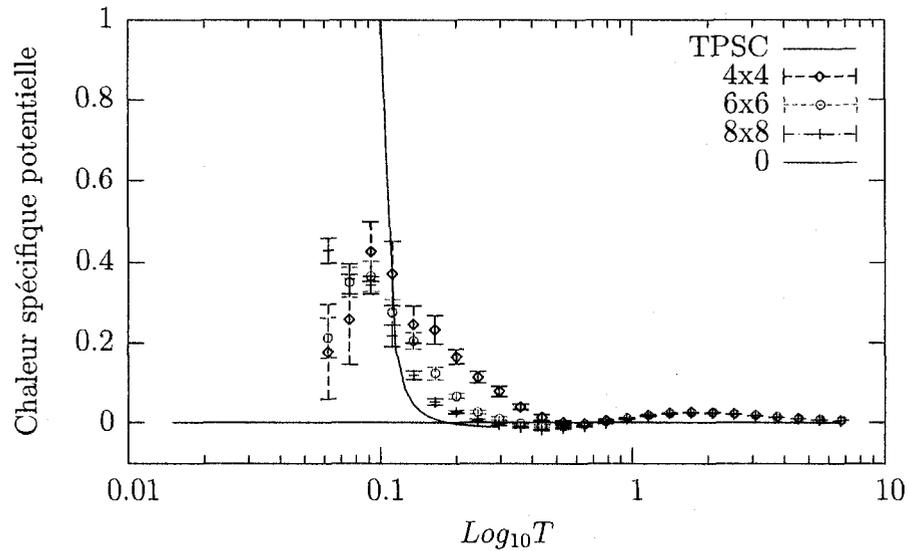


FIGURE 3.9: Comportement de la chaleur spécifique potentielle pour $U = 2$ et basse température, en fonction de la taille. La limite thermodynamique est donnée par la méthode ACDP. Nous examinons la contribution potentielle, puisque c'est là que se trouve la physique à basse température. La méthode nous confirme la présence d'un pic lié à l'antiferromagnétisme itinérant, à basse température. Lorsqu'on abaisse la température et qu'on dépasse T_x , la chaleur spécifique ACDP n'est plus physique puisque qu'elle remonte au lieu de redescendre et ainsi s'approcher de 0 (La partie où la chaleur spécifique est divergente est en dehors du cadre du graphique) (Données ACDP fournies par S. Roy.).

La TPSC cesse de fonctionner quand elle descend sous une température T_x , dite température de *crossover*, à partir de laquelle la longueur de corrélation antiferromagnétique ξ_{AF} devient plus grande que la longueur de corrélation thermique de *de Broglie* $\xi_{th} = \frac{\langle v_f \rangle}{\pi T}$. On peut d'ailleurs constater à la figure 3.3, que T_x correspond au maximum de chaleur spécifique à basse température et petit U^7 . Cet accord semble meilleur que celui obtenu par Paiva *et al.* [11], qui stipulent que la position du maximum à basse température est proportionnelle au résultat RPA, dans laquelle il y a un paramètre ajustable. Les deux

⁷Bien sûr, pour que l'accord soit plus éloquent, il faudrait tracer ici plus de points.

courbes ne présentent pas non plus la même concavité, et, à ce niveau, T_x présente encore un meilleur accord avec le MCQ que la RPA.

Avec la TPSC, on voit le côté droit du maximum à basse température, alors que la redescente, elle, n'est pas présente. Bien sûr, la redescente de chaleur spécifique est essentielle pour respecter la troisième loi de la thermodynamique. Pour cette raison donc, $\langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle$ doit tendre vers une constante à mesure que la température diminue.

Haute température

Le pic « haute température » est essentiellement le pic qu'on retrouve pour $U = 0$, c.-à-d exclusivement composé d'énergie cinétique. En faisant augmenter U , on voit que la position du pic ne varie pas énormément. C'est vers $U \simeq 5$ que l'on tombe dans le régime fort couplage.

Chapitre 4

Crossover 1D-2D

La variation progressive de l'intégrale de saut $t_{\hat{y}}$ comme $0 \leq t_{\hat{y}} \leq 1$, nous permet de faire passer le système d'un régime strictement *unidimensionnel* à un système *bidimensionnel*. Le but de l'exercice est de voir à partir de quelle valeur de $t_{\hat{y}}$ le système change de régime. Cela devra se traduire par l'apparition (disparition) de la bosse reliée à l'antiferromagnétisme itinérant que l'on trouve à basse température dans le cas 2D (1D).

4.1 Cas limites

Le cas $t = 0$ étant la limite atomique abordée dans les chapitres précédents, il est inutile de le traiter ici une fois de plus. Par contre, la limite à $U = 0$ est intéressante. La relation de dispersion de ce système est (3.1), soit la même que pour le cas purement *bidimensionnel*, sauf que dans ce cas-ci, $t_{\hat{y}}$ varie entre continûment entre 0 et $t_{\hat{x}} (= 1)$.

On peut voir, à la figure 4.1, la progression du coefficient γ (terme linéaire de la chaleur spécifique à basse T pour un liquide de *Fermi*) en fonction de l'anisotropie $t_{\hat{y}}$, entre les régimes 1D et 2D¹. Dans cette figure, les valeurs limites correspondent bien aux γ que nous avons trouvés pour les cas 1D et 2D (équations (2.5) et (3.2) respectivement).

Pour $U = 0$, les ETF sont aussi très présents. Nous avons constaté cependant qu'ils le sont moins lorsque $\frac{M}{N} \sim \frac{t_{\hat{y}}}{t_{\hat{x}}}$, où N est le nombre de sites selon \hat{x} et M est le nombre de sites selon \hat{y} . Cela vient du fait que pour le cas anisotrope, la longueur de corrélation thermique

¹Ce calcul a été fait numériquement. Pour trouver $\gamma \equiv \gamma(t_{\hat{y}})$ analytiquement, il faut pouvoir ramener la densité d'état à une forme analytique comme on peut le faire en 1D et 2D.

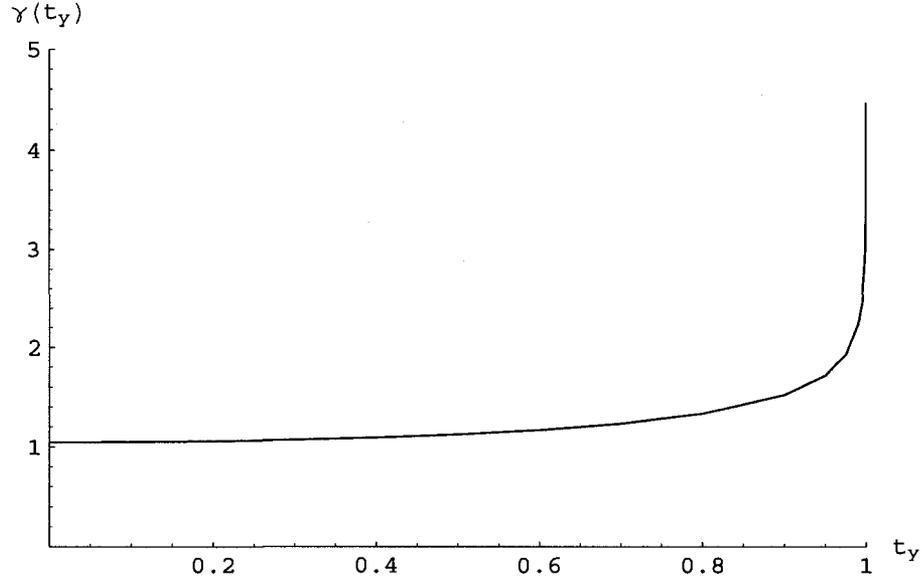


FIGURE 4.1: Coefficient γ du terme linéaire de chaleur spécifique à basse température, pour le cas $U = 0$. On voit que le coefficient γ tend vers l'infini à mesure que l'on se rapproche du cas strictement *bidimensionnel* ($t_y = 1$).

de *de Broglie* du système *est* anisotrope. Ainsi donc, il faut que la taille du système soit assez grande pour contenir les longueurs de corrélation dans les deux dimensions.

4.2 U et t finis

Comme nous cherchons à comparer des *dimensionnalités* intermédiaires, il est important de faire la mise à l'échelle des unités d'énergie en jeu. Les symboles de ces quantités *renormalisées* seront coiffés d'un tilde (\tilde{U} , \tilde{T} , ...).

Afin de trouver la bonne plage de paramètres à sonder, nous nous fions aux cas 1D et 2D. En examinant les positions des maximums aux figures 2.5 et 3.3 (pages 51 et 58 respectivement), et en faisant la transformation (1.75) donnée au chapitre 1, on constate que l'essentiel du passage de faible à fort couplage, se situe entre $1 \lesssim \tilde{U} \lesssim 3$.

Pour connaître les valeurs de t_y qu'il nous faut examiner, nous essayons deux points de part et d'autre de $t_y = 0.5$ en même temps que nous procédons à l'étude de différentes tailles, dans le but de nous assurer que nous nous sommes affranchis des ETF.

La figure 4.2 illustre le passage d'une anisotropie $t_y = 0.4$ au cas $t_y = 0.6$, pour différentes valeurs de \tilde{U} . Déjà au premier abord, en regardant la chaleur spécifique totale,

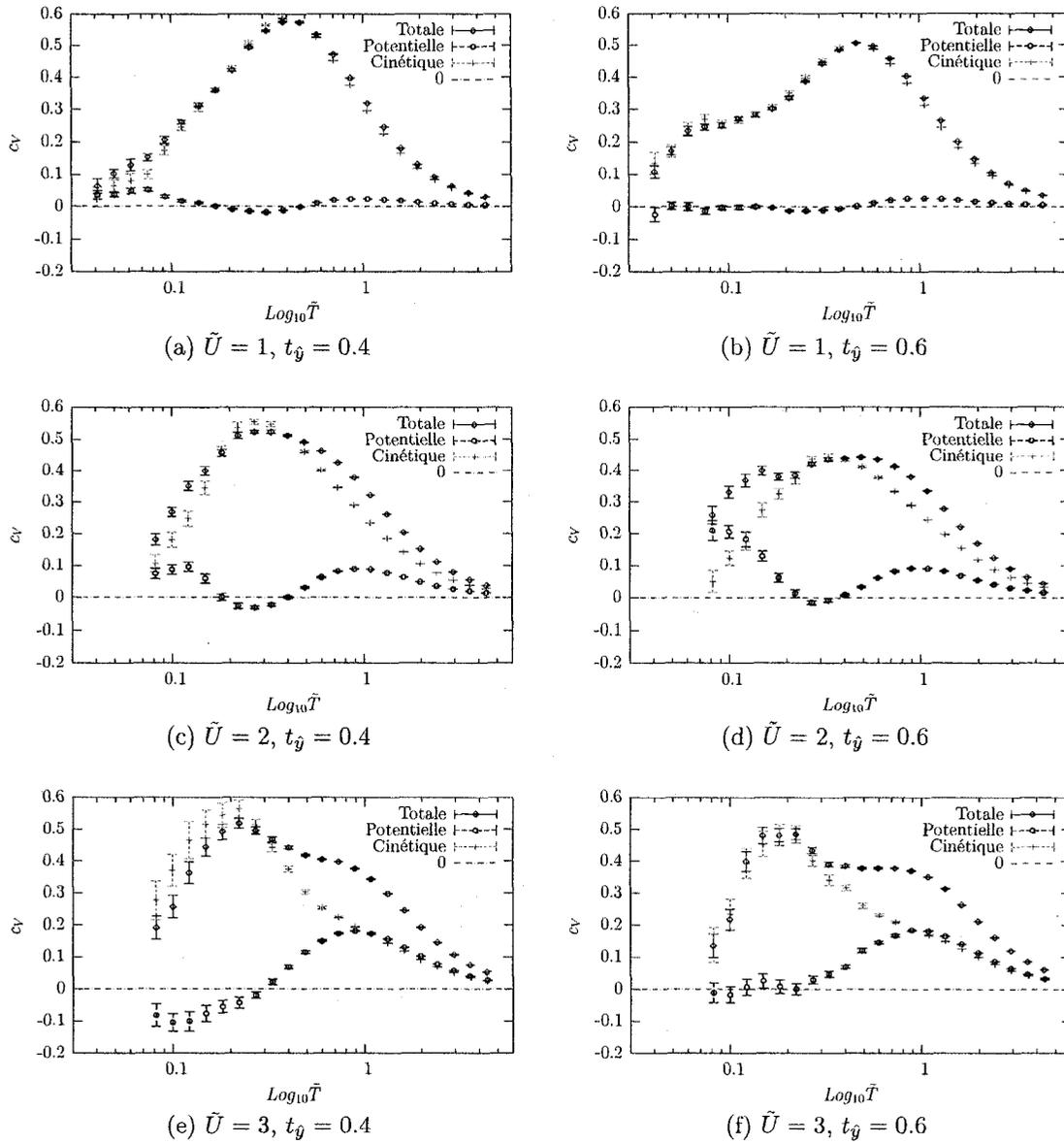


FIGURE 4.2: Chaleurs spécifiques totale, cinétique et potentielle, en fonction de la température réduite \tilde{T} , pour $t_{\hat{y}} = 0.4, 0.6$ et $\tilde{U} = 1, 2, 3$, sur un réseau 6×6 .

on voit qu'on a qu'une seule bosse à faible couplage pour $t_{\tilde{y}} = 0.4$ alors qu'on a deux bosses à faible couplage pour $t_{\tilde{y}} = 0.6$. Si on n'examinait pas les ETF, on pourrait tout de suite conclure que le *crossover* de *dimensionnalité* se situe bel et bien entre ses deux valeurs de $t_{\tilde{y}}$. En s'attardant aux contributions individuelles toutefois, il est clair qu'un problème important survient à faible couplage. En effet, on constate à la figure 4.2b, que le pic de chaleur spécifique à basse température provient d'un pic dans la chaleur spécifique cinétique, et que la chaleur spécifique potentielle ne possède aucune caractéristique remarquable. Or, nous avons montré au chapitre 3 que le maximum à basse température dans le cas *bidimensionnel* provient d'une variation dans la double occupation et non dans la partie cinétique du système.

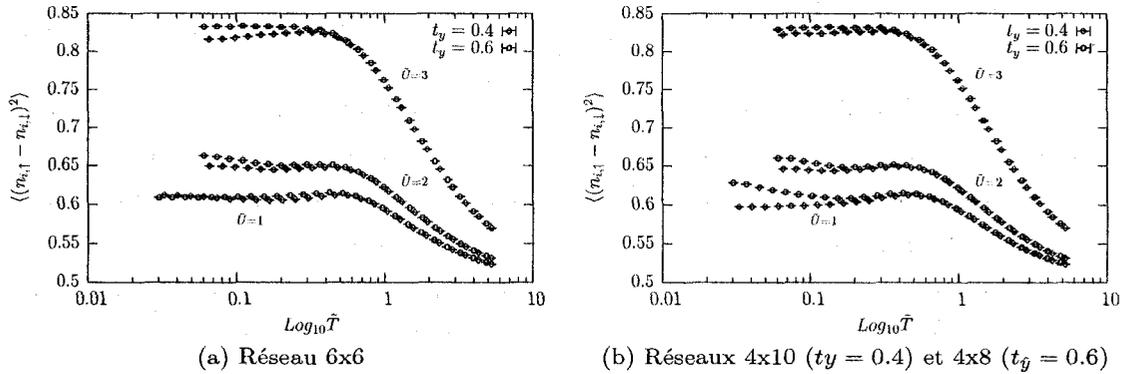


FIGURE 4.3: Moment local vs \tilde{U} et $t_{\tilde{y}}$ pour différentes tailles de réseau.

En examinant le moment local pour ces six situations (figure 4.3a), on voit effectivement qu'il n'y a pas de remontée du moment local pour le cas correspondant ($t_{\tilde{y}} = 0.6$, $\tilde{U} = 1$). En fait, ce dernier est même plus bas que pour le cas $t_{\tilde{y}} = 0.4$; $\tilde{U} = 1$, dont la chaleur spécifique est illustrée à la figure 4.2a. On est clairement en présence d'un ETF. En réarrangeant les systèmes avec comme critère que

$$\frac{M}{N} \simeq \frac{t_{\tilde{y}}}{t_x}, \quad (4.1)$$

et en essayant de maintenir le nombre de sites constant², on décide d'utiliser un réseau 4x8 pour le cas $t_{\tilde{g}} = 0.6$ et un réseau 4x10 pour le cas $t_{\tilde{g}} = 0.4$.

Le moment local pour ces nouveaux paramètres (figure 4.3b), nous donne le comportement que l'on s'attendait à voir, c'est-à-dire une remontée du moment local pour de faibles valeurs de U dans le cas $t_{\tilde{g}} = 0.6$. On peut voir aussi une légère remontée du moment local dans le cas $t_{\tilde{g}} = 0.4$, ce qui est compréhensible puisque les effets d'interférence dont on a parlé au chapitre 2, ne sont présents que dans le cas strictement 1D. Toutefois, cette remontée n'est pas observable dans le cas de la chaleur spécifique totale : la seule quantité qui puisse être mesurée dans une expérience.

Outre le fait que le comportement à U petit semble mieux correspondre à ce qu'on attendait, on peut conclure sans se tromper que le *crossover* 1D-2D de la chaleur spécifique se situe bel et bien entre $t_{\tilde{g}} = 0.4$ et $t_{\tilde{g}} = 0.6$. En effet, en comparant les figures 4.2 et 4.4 et sachant que les ETF deviennent moins importants à mesure que l'on augmente \tilde{U} , on voit que le comportement de la chaleur spécifique ne change pas, pour les différentes tailles, à partir de $\tilde{U} = 2$: on a *une seule* bosse de chaleur spécifique totale pour $t_{\tilde{g}} = 0.4$ et *deux* bosses pour $t_{\tilde{g}} = 0.6$, preuve que le *crossover* se situe bel et bien entre ces deux valeurs de $t_{\tilde{g}}$.

Soulignons que la dérivée de la chaleur spécifique potentielle est nulle pour $\tilde{U} \sim 3$ dans le régime 2D ($t_{\tilde{g}} \gtrsim 0.6$) quand $T \lesssim 1$. À cet endroit, en effet, le pic de fluctuations antiferromagnétiques vient couvrir exactement le minimum local discuté au chapitre 2.

²En fait, il faut aussi tenir compte du fait que M et N doivent être pairs, ce qui réduit encore le nombre de valeurs qu'on peut leur attribuer. Cela est dû d'abord à des raisons pratiques, puisqu'on a des résultats substantiellement plus rapides en n'utilisant que des valeurs paires dans le programme MCQ. Ensuite, on sait que les courbes examinées sont soit au-dessus ou au-dessous de la courbe à la limite thermodynamique, selon qu'on utilise des valeurs paires ou encore impaires du nombre de sites (Voir par exemple [38]). La convergence vers la limite thermodynamique se fait donc en oscillant, ce qui n'est pas très pratique de toute façon.

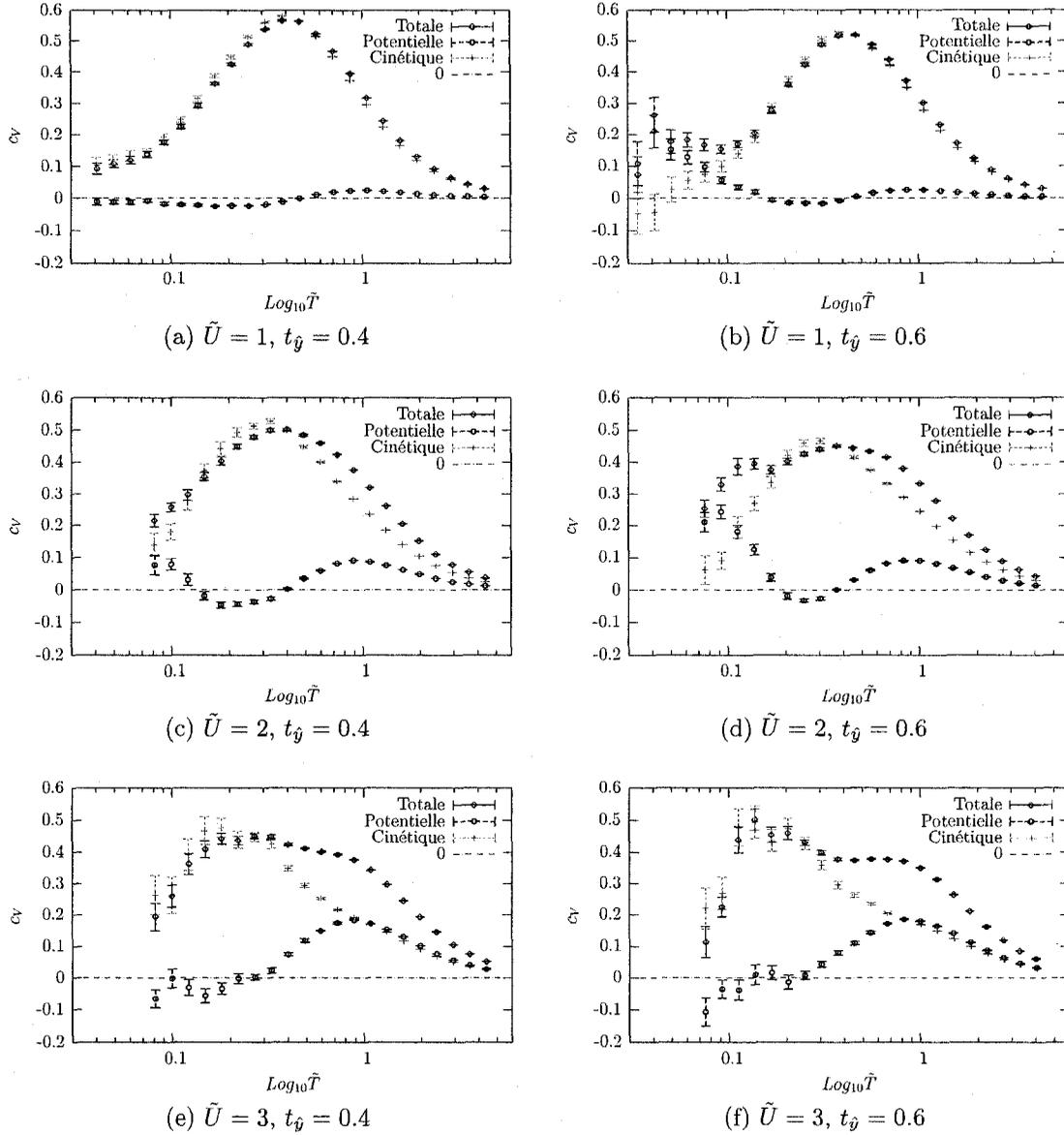


FIGURE 4.4: Chaleurs spécifiques totale, cinétique et potentielle en fonction de la température réduite \tilde{T} , pour $t_{\tilde{y}} = 0.4, 0.6$ et $\tilde{U} = 1, 2, 3$. Pour $t_{\tilde{y}} = 0.4$ on a utilisé un réseau 4×10 alors que pour $t_{\tilde{y}} = 0.6$ on a utilisé un réseau 4×8 .

Conclusion

Le modèle de *Hubbard* ne possédant aucune solution exacte (sauf en 1D), est difficile à aborder. Nous utilisons ici, le MCQ, une méthode ayant fait ses preuves. Bien que son efficacité soit limitée (tailles de systèmes petits, problème de signe pour certaines gammes de paramètres, ...), il demeure un outil de prédilection pour valider de nouvelles théories ou approches, telles que l'approche ACDP par exemple.

Dans ce travail, nous avons calculé la chaleur spécifique du modèle de *Hubbard* à demi-remplissage, pour différentes valeurs d'interaction U et différentes valeurs de $t_{\hat{y}}$. Avant de décrire les résultats cependant, mentionnons plusieurs points méthodologiques importants éclaircis par ce travail. Tout d'abord, nous avons testé une méthode basée sur celle de Liu *et al.* semblant tout à fait prometteuse, mais qui, au final, nous laisse perplexes. En effet, bien que cette méthode fonctionne admirablement à haute température, elle n'est pas plus efficace que la dérivée aux différences finies à basse température. La nouvelle méthode pourrait cependant être utile dans le cas où l'énergie (ou tout autre dérivée par rapport à la température) varie rapidement sur un intervalle donné, ce qui n'est pas le cas lorsqu'on peut, comme ici, travailler avec l'échelle logarithmique de température.

Nous avons aussi démontré qu'un choix judicieux des paramètres de simulation à utiliser est primordial, particulièrement en ce qui a trait à la taille des blocs de mesures, qui peut varier de 200 à 15000 mesures tout dépendant de la température, de la grandeur de U et de la taille du système. Si on ne fait pas attention, le système pourra sembler avoir convergé et les valeurs d'erreur seront sous-estimées.

Un dernier point technique important, mis au jour dans le problème, est l'importance d'utiliser les régressions linéaires à mesure qu'on augmente U . Parfois, il est plus avantageux en temps de calcul de faire la régression linéaire sur les courbes de chaleur spécifique évaluées à différents $\Delta\tau$, que de calculer une courbe pour une valeur $\Delta\tau$ telle que l'erreur systématique soit de l'ordre de l'erreur statistique. Il faut en outre être prudent lorsqu'on fait les régressions linéaires. Le pas de dérivation joue un rôle non négligeable dans la

pente de la régression selon $(\Delta\tau)^2$, comme nous l'avons montré à la section 1.3.3.

Du côté physique, la chaleur spécifique du modèle de *Hubbard* est riche. En comparant le 1D au 2D, on voit à fort couplage que la physique est essentiellement la même : une limite *Heisenberg* à basse température et une limite $t = 0$ à haute température. À fort couplage et basse température cependant, Les maximums des pics ne sont pas au même endroit en 1D qu'en 2D. On a environ $T_{max} \simeq 0.481J$ en 1D, alors qu'en 2D, on a $T_{max} \simeq 2/3J$. En 2D, on a fait l'observation supplémentaire que la limite *Heisenberg* n'est pas tout à fait atteinte même pour de forts U ($U \gtrsim 12$). Cette conclusion, va dans le même sens que plusieurs études faites durant les dernières années, à savoir qu'il y a des déviations entre le modèle de *Hubbard* et le modèle de *Heisenberg* pour des valeurs de couplage relativement élevées. En ce qui concerne le cas anisotrope, une étude du modèle de *Heisenberg* correspondant au t_{ij} approprié nous donnerait probablement des valeurs intermédiaires pour T_{max} . Pour toutes les dimensions, on voit un pic résiduel dans la chaleur spécifique cinétique, jusqu'à une forte valeur de U à haute température. Bien que sa nature ne soit pas très claire, on peut penser qu'elle est due aux excitations des niveaux de plus haute énergie de la bande de *Hubbard* supérieure, qui sont liés aux processus de saut. Le fort couplage est bien compris et le fait que les chaleurs spécifiques des cas 1D et 2D soient qualitativement semblables est dû à la localisation engendrée par un fort U , et au fait que les structures importantes (pics) dans la c_V se présentent à relativement haute T .

À faible couplage, on a une bosse en 1D et deux bosses en 2D. À basse température, l'absence d'un pic de chaleur spécifique dans le cas *unidimensionnel* peut s'expliquer par le fait qu'il n'y a pas de T_x . Ceci peut se voir, en groupe de renormalisation, par des effets d'interférence dans les canaux de Peierls ($2k_F$) et de Cooper. Le pic de chaleur spécifique en 2D peut être compris grâce à la méthode ACDP, qui situe la position du maximum de chaleur spécifique à la température de *crossover* T_x , température où le système passe du régime désordonné au régime classique renormalisé. C'est à partir de cette température que la méthode ACDP cesse de fonctionner, aussi ne nous donne-t-elle pas la pente descendante de la chaleur spécifique, qui doit pourtant bien retomber à 0. À partir de T_x , la taille des fluctuations magnétiques devient plus grande que la longueur d'onde de *Broglie* thermique. Dans le cas unidimensionnel, ce n'est jamais le cas (pas de transition de phase, même à température nulle).

Malgré les effets de taille importants qui surviennent dans l'analyse du *crossover dimensionnel*, nous avons à la fin pu montrer que lorsqu'on l'estime par le critère *une*

bosse-deux bosses, ce dernier se situe entre $t_g \simeq 0.4$ et $t_g \simeq 0.6$.

Les résultats obtenus dans ce mémoire pourraient être utiles dans plusieurs contextes. Un exemple d'application de cette étude serait de valider la méthode ACDP. On sait que cette dernière ne fonctionne pas dans le cas strictement 1D. Son comportement reste par contre à être testé lorsqu'on décide d'inclure une anisotropie au modèle.

Un autre contexte où ces résultats pourraient s'avérer intéressants est celui des atomes froids, dans les réseaux optiques. En effet, les températures en jeu sont souvent trop élevées pour des applications expérimentales dans les matériaux de pointe. Typiquement, les plus basses températures qu'on examine à fort couplage sont d'environ 200 °K (on peut descendre jusqu'à 100 °K pour de plus faibles couplages). Pour les atomes froids, ces températures sont appropriées. Dans ces conditions, en plus de vérifier le comportement de la chaleur spécifique selon t_g , on peut aller à très haute température pour aller observer la remontée de la chaleur spécifique cinétique pour le fort couplage. Ces résultats s'insèrent bien dans le cadre des travaux de M. Kohl, qui suggère d'utiliser la double occupation comme mesure de la température [46] dans les réseaux optiques. Il est à noter qu'il est important pour les études dans ces réseaux de connaître des quantités physiques à mesurer à haute température, ne serait-ce que pour calibrer la température effective (en unités de t) et disposer de points de repère en descendant la température vers celles où apparaissent les phénomènes collectifs intéressants.

Finalement, d'un point de vue théorique, ce travail peut donner un indice supplémentaire en ce qui concerne les recherches portant sur les déviations au modèle de *Heisenberg* pour le fort couplage.

Annexe A

Trace

Nous pouvons calculer la trace du propagateur à un corps $\hat{U}_\sigma [N_\tau; 0] (\mathbf{X})$ (introduit en (1.23)) sur les fermions, sans avoir recours aux variables de *Grassman*. La dérivation suit *grosso modo* la référence [17]¹.

Commençons d'abord par analyser ce qui se passe quand l'opérateur $\hat{U} [N_\tau; 0]$ agit sur *une seule* particule à la position i .

A.1 Action de l'opérateur à N -particules sur un état à une seule particule

On a

$$\hat{U} [N_\tau; 0] c_i^\dagger |0\rangle = \prod_{l=1}^{N_\tau} \hat{B}_l c_i^\dagger |0\rangle. \quad (\text{A.1})$$

N'utilisons au départ que la première tranche de temps.

$$\begin{aligned} \hat{B}_1 |0\rangle &= e^{\hat{K}} e^{\hat{V}_1} c_i^\dagger |0\rangle = e^{\mathbf{c}^\dagger \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{c}} e^{\mathbf{c}^\dagger \cdot \mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{c}} c_i^\dagger |0\rangle \\ &= e^{\mathbf{c}^\dagger \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{c}} e^{\mathbf{c}^\dagger \cdot \text{diag}\{\mathbf{x}_1\} \cdot \mathbf{c}} c_i^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Nous avons ici utilisé le fait que \mathbf{V}_1 est diagonale dans la base des positions. Dans le cas de la base diagonale l'exponentielle peut s'écrire en termes de l'opérateur nombre

¹Dans ce qui suit, la dépendance en \mathbf{X} et en σ est implicite.

et agir sur l'opérateur de création, ce qui nous donne

$$\begin{aligned} e^{\sum_{\alpha} A_{\alpha} \hat{n}_{\alpha}} c_{\alpha'}^{\dagger} &= 1 + \left(\sum_{\alpha} A_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} \right) c_{\alpha'}^{\dagger} + \frac{(\sum_{\alpha} A_{\alpha} \hat{n}_{\alpha})^2}{2!} c_{\alpha'}^{\dagger} + \dots \\ &= \sum_{\beta} c_{\beta}^{\dagger} e^{(\text{diag}\{\mathbf{A}\})_{\beta\alpha'}} e^{\sum_{\alpha} A_{\alpha} \hat{n}_{\alpha}} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

et donc pour (A.2) :

$$\begin{aligned} e^{\hat{K}} e^{\hat{V}_1} c_{j'}^{\dagger} |0\rangle &= e^{\hat{K}} \sum_{j'} c_{j'}^{\dagger} \left(e^{\text{diag}\{\mathbf{x}_1\}} \right)_{j'i} e^{\hat{V}_1} |0\rangle \\ &= \sum_{j'} e^{\hat{K}} c_{j'}^{\dagger} \left(e^{\text{diag}\{\mathbf{x}_1\}} \right)_{j'i} e^{\hat{V}_1} |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Si on applique $c_{j'}^{\dagger}$ par la droite sur $e^{\hat{K}} = e^{\mathbf{c}^{\dagger} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{c}}$ où la matrice \mathbf{K} n'est pas diagonale dans la base des positions, on peut effectuer un changement de base, tel que

$$\mathbf{K} = \mathbf{T}^{\dagger} \cdot (\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\}) \cdot \mathbf{T}. \quad (\text{A.5})$$

Alors

$$\mathbf{c}^{\dagger} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \underbrace{(\mathbf{c}^{\dagger} \cdot \mathbf{T}^{\dagger})}_{\tilde{\mathbf{c}}^{\dagger}} \cdot (\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\}) \cdot \underbrace{(\mathbf{T} \cdot \mathbf{c})}_{\tilde{\mathbf{c}}}, \quad (\text{A.6})$$

ce qui nous donne

$$\begin{aligned} e^{\hat{K}} c_{j'}^{\dagger} &= e^{\mathbf{c}^{\dagger} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{c}} c_{j'}^{\dagger} = e^{\tilde{\mathbf{c}}^{\dagger} \cdot (\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\}) \cdot \tilde{\mathbf{c}}} \overbrace{(\tilde{\mathbf{c}}^{\dagger} \cdot \mathbf{T})}_{c_{j'}^{\dagger}} \\ &= \sum_{\alpha} \left[e^{\tilde{\mathbf{c}}^{\dagger} \cdot (\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\}) \cdot \tilde{\mathbf{c}}} \tilde{c}_{\alpha}^{\dagger} \right] T_{\alpha j'} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

L'encadré de la dernière expression correspond au terme de gauche dans l'équation

(A.3). On peut donc se servir de cette dernière et réécrire (A.7) comme

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha} \left[e^{\tilde{\mathbf{c}}^{\dagger} \cdot (\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\}) \cdot \tilde{\mathbf{c}}} \tilde{c}_{\alpha}^{\dagger} \right] T_{\alpha j'} &= \sum_{\alpha, \beta} \tilde{c}_{\beta}^{\dagger} \left(e^{(\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\})} \right)_{\beta \alpha} T_{\alpha j'} e^{\hat{K}} \\
&= \sum_{\alpha, \beta} \underbrace{\sum_{j_1} c_{j_1}^{\dagger} T_{j_1 \beta}^{\dagger}}_{\tilde{c}_{\beta}^{\dagger}} \left(e^{(\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\})} \right)_{\beta \alpha} T_{\alpha j'} e^{\hat{K}} \\
&= \sum_{j_1} c_{j_1}^{\dagger} \overbrace{\sum_{\alpha, \beta} T_{j_1 \beta}^{\dagger} \left(e^{(\text{diag}\{\epsilon_{\mathbf{k}}\})} \right)_{\beta \alpha} T_{\alpha j'}}^{(e^{\mathbf{K}})_{j_1 j'}} e^{\hat{K}}
\end{aligned} \tag{A.8}$$

En insérant la dernière expression dans (A.4) cela devient

$$\begin{aligned}
e^{\hat{K}} e^{\hat{V}_1} c_i^{\dagger} |0\rangle &= \sum_{j_1} c_{j_1}^{\dagger} \left[\sum_{j'} (e^{\mathbf{K}})_{j_1 j'} \left(e^{\text{diag}\{\mathbf{x}_1\}} \right)_{j' i} \right] e^{\hat{K}} e^{\hat{V}_1} |0\rangle \\
&= \sum_{j_1} c_{j_1}^{\dagger} \underbrace{\left(e^{\mathbf{K}} e^{\text{diag}\{\mathbf{x}_1\}} \right)_{j_1 i}}_{B_{j_1 i}^1} e^{\hat{K}} e^{\hat{V}_1} |0\rangle
\end{aligned} \tag{A.9}$$

En appliquant pour tous les opérateurs \hat{B}_l on trouve

$$\begin{aligned}
\hat{U} [N_{\tau}; 0] c_i^{\dagger} |0\rangle &= \sum_{j_{N_{\tau}}, j_{N_{\tau}-1}, \dots, j_2, j_1} c_{j_{N_{\tau}}}^{\dagger} B_{j_{N_{\tau}} j_{N_{\tau}-1}}^{N_{\tau}} \dots B_{j_2 j_1}^2 B_{j_1 i}^1 \hat{U} [N_{\tau}; 0] |0\rangle \\
&= \sum_{j_{N_{\tau}}} c_{j_{N_{\tau}}}^{\dagger} \left(\prod_{l=1}^{N_{\tau}} B^l \right)_{j_{N_{\tau}} i} \hat{U} [N_{\tau}; 0] |0\rangle
\end{aligned} \tag{A.10}$$

On voit donc que le fait de passer l'opérateur de création de la droite vers la gauche « mélange » les opérateurs. Ce n'est pas évident pour calculer une trace à N -particules.

A.2 Action de l'opérateur à N -particules sur un état à plusieurs particules

On peut réécrire l'équation (A.10) en passant dans une base où la matrice $(\prod_{l=1}^{N_{\tau}} B^l)$ est diagonale.

Dans cette base,

$$\prod_{l=1}^{N_\tau} (B^l) = \sum_{\mu} |\mu\rangle b_{\mu} \langle \mu|. \quad (\text{A.11})$$

On définit aussi de nouveaux opérateurs fermioniques en leur faisant subir les transformations canoniques suivantes

$$C_{\mu} = \sum_j \langle \mu | j \rangle c_j \quad C_{\mu}^{\dagger} = \sum_j \langle j | \mu \rangle c_j^{\dagger} \quad (\text{A.12})$$

$$c_j = \sum_{\mu} \langle j | \mu \rangle C_{\mu} \quad c_j^{\dagger} = \sum_{\mu} \langle \mu | j \rangle C_{\mu}^{\dagger}. \quad (\text{A.13})$$

Que se passe-t-il si on applique l'opérateur $\hat{U} [N_{\tau}; 0]$ sur ce nouvel état fermionique ?
Ceci :

$$\begin{aligned} \hat{U} [N_{\tau}; 0] C_{\mu, \sigma}^{\dagger} |0\rangle &= \hat{U} [N_{\tau}; 0] \left[\sum_i \langle i | \mu \rangle c_i^{\dagger} \right] |0\rangle \\ &= \sum_i \left[\hat{U} [N_{\tau}; 0] c_i^{\dagger} |0\rangle \right] \langle i | \mu \rangle \\ &= \sum_i \left[\sum_{j_{N_{\tau}}} c_{j_{N_{\tau}}}^{\dagger} \left(\prod_{l=1}^{N_{\tau}} B^l \right)_{j_{N_{\tau}}, i} \hat{U} [N_{\tau}; 0] |0\rangle \right] \langle i | \mu \rangle \\ &= \sum_i \left[\sum_{j_{N_{\tau}}} c_{j_{N_{\tau}}}^{\dagger} \left[\sum_{\mu'} \langle j_{N_{\tau}} | \mu' \rangle b_{\mu'} \langle \mu' | i \rangle \right] \hat{U} [N_{\tau}; 0] |0\rangle \right] \langle i | \mu \rangle. \quad (\text{A.14}) \\ &= \sum_{\mu'} \underbrace{\sum_{j_{N_{\tau}}} c_{j_{N_{\tau}}}^{\dagger} \langle j_{N_{\tau}} | \mu' \rangle}_{C_{\mu'}^{\dagger}} \underbrace{b_{\mu'} \langle \mu' | \sum_i \langle i | \mu \rangle}_{I} \hat{U} [N_{\tau}; 0] |0\rangle \\ &= \sum_{\mu'} C_{\mu'}^{\dagger} b_{\mu'} \delta_{\mu \mu'} \hat{U} [N_{\tau}; 0] |0\rangle \\ &= b_{\mu} C_{\mu}^{\dagger} \hat{U} [N_{\tau}; 0] |0\rangle \end{aligned}$$

Si on applique cet opérateur sur un état à N -Particules on voit trivialement que²

$$\begin{aligned}\hat{U}[N_\tau; 0] \prod_{\mu=1}^N C_\mu^\dagger |0\rangle &= \prod_{\mu=1}^N (b_\mu C_\mu^\dagger) \hat{U}[N_\tau; 0] |0\rangle \\ &= \prod_{\mu=1}^N (b_\mu^\sigma C_\mu^\dagger) |0\rangle\end{aligned}\quad (\text{A.15})$$

En appliquant le même état à gauche, on aura (en notant $|\Omega\rangle = \prod_{\mu=1}^N C_\mu^\dagger |0\rangle$)

$$\begin{aligned}\langle\Omega|\hat{U}[N_\tau; 0]|\Omega\rangle &= \langle\Omega|\left(\prod_{\mu=1}^N b_\mu\right)|\Omega\rangle \\ &= \left(\prod_{\mu=1}^N b_\mu\right) \underbrace{\langle\Omega|\Omega\rangle}_{=1},\end{aligned}\quad (\text{A.16})$$

car $\langle\Omega|\Omega\rangle$ est 1 pour des états fermioniques.

A.3 Calcul de la trace

Comme la trace est indépendante de la base utilisée, on utilise celle qu'on a trouvée à la section précédente pour calculer la calculer explicitement, soit :

$$\text{Tr} [\hat{U}[N_\tau; 0]] = \sum_{\{n_\mu=0,1\}} \langle\{n_\mu\}|\hat{U}[N_\tau; 0]|\{n_\mu\}\rangle. \quad (\text{A.17})$$

Dans cette base, on écrit

$$\begin{aligned}\text{Tr} [\hat{U}[N_\tau; 0]] &= \prod_{\mu=1}^N \left[\sum_{n_\mu=0,1} \langle n_\mu|\hat{U}[N_\tau; 0]|n_\mu\rangle \right] \\ &= \prod_{\mu=1}^N \left[\langle 0|\hat{U}[N_\tau; 0]|0\rangle + \langle 0|C_\mu \hat{U}[N_\tau; 0] C_\mu^\dagger |0\rangle \right]. \\ &= \prod_{\mu=1}^N [1 + b_\mu]\end{aligned}\quad (\text{A.18})$$

Cette dernière équation est le déterminant d'une matrice quand elle est diagonale.

²Dans l'équation (A.15) nous faisons disparaître l'opérateur à N -Corps parce qu'il a frappé toutes les particules possibles et il arrive finalement sur le vide où sa valeur propre est « 1 ».

On peut donc la réécrire de manière générale comme

$$\begin{aligned}
\prod_{\mu=1}^N [1 + b_{\mu}] &= \det \left[\sum_{\mu} |\mu\rangle 1 + b_{\mu} \langle \mu| \right] \\
&= \det \left[I + \sum_{\mu} |\mu\rangle b_{\mu} \langle \mu| \right] \\
&= \det \left[I + \prod_{l=1}^{N_{\tau}} B^l \right]
\end{aligned} \tag{A.19}$$

et finalement

$$\boxed{\text{Tr} [\hat{U} [N_{\tau}; 0]] = \det \left[I + \prod_{l=1}^{N_{\tau}} B^l \right]} \tag{A.20}$$

Il est à noter que le résultat pour les tranches de temps permutées circulairement est prouvé de la même manière, de sorte qu'on aura

$$\text{Tr} [\hat{U} [l; 0] \hat{U} [N_{\tau}; l]] = \det \left[I + \prod_{l''=1}^l B^{l''} \prod_{l''=l+1}^{N_{\tau}} B^{l''} \right] \tag{A.21}$$

L'annexe B nous permet enfin d'écrire

$$\boxed{\text{Tr} [\hat{U} [l; 0] \hat{U} [N_{\tau}; l]] = \det [(\mathcal{G}(l, l))^{-1}] = \det [(\mathcal{G})^{-1}]}, \tag{A.22}$$

le fameux *déterminant de la fonction de Green* pour une valeur de \mathbf{X} donnée.

Annexe B

Fonction de *Green* de *Matsubara* à une particule

B.1 Calcul explicite

Dans cette section, nous procédons à l'évaluation de l'équation (1.27). On évalue l'expression

$$\langle c_i(l_1)c_j^\dagger(l_2) \rangle = \frac{\text{Tr} [\hat{U} [N_\tau; 0] \hat{U} [0; l_1] c_i \hat{U} [l_1; 0] \hat{U} [0; l_2] c_j^\dagger \hat{U} [l_2; 0]]_1}{\text{Tr} [\hat{U} [N_\tau; 0]]}, \quad (\text{B.1})$$

donc pour $l_1 > l_2$.

On sait, d'après (A.10), en remplaçant les indices N_τ et 0 par l_1 et l_2 , que

$$\hat{U} [l_1; l_2] c_j^\dagger = \sum_k c_k^\dagger (B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1})_{kj} \hat{U} [l_1; l_2]. \quad (\text{B.2})$$

Alors

$$\begin{aligned} \langle c_i(l_1)c_j^\dagger(l_2) \rangle &= \frac{\text{Tr} [\hat{U} [N_\tau; l_1] c_i [\sum_k c_k^\dagger (B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1})_{kj}] \hat{U} [l_1; l_2] \hat{U} [l_2; 0]]}{\text{Tr} [\hat{U} [N_\tau; 0]]} \\ &= \sum_k \frac{\text{Tr} [\hat{U} [N_\tau; l_1] c_i c_k^\dagger \hat{U} [l_1; 0]]}{\text{Tr} [\hat{U} [N_\tau; 0]]} (B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1})_{kj} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

¹On aurait pu prendre l'autre combinaison d'opérateurs de (1.27) pour faire le calcul.

Grâce aux propriétés cycliques de la trace, on trouve enfin

$$\langle c_i(l_1)c_j^\dagger(l_2) \rangle = \sum_k \overbrace{\left[\frac{\text{Tr} [c_i c_k^\dagger \hat{U}[l_1; 0] \hat{U}[N_\tau; l_1]]}{\text{Tr} [\hat{U}[l_1; 0] \hat{U}[N_\tau; l_1]]} \right]}^{(*)} (B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1})_{kj}. \quad (\text{B.4})$$

On évalue (*) dans la base $\{|\mu\rangle\}$ introduite au chapitre A

$$\begin{aligned} (*) &= \frac{\prod_{\mu=1}^N \sum_{n_\mu=0,1} \langle n_\mu | c_i c_k^\dagger \hat{U}[l_1; 0] \hat{U}[N_\tau; l_1] | n_\mu \rangle}{\prod_{\mu'=1}^N \sum_{n_{\mu'}=0,1} \langle n_{\mu'} | \hat{U}[l_1; 0] \hat{U}[N_\tau; l_1] | n_{\mu'} \rangle} \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \langle i | \alpha \rangle \frac{\prod_{\mu=1}^N \sum_{n_\mu=0,1} \langle n_\mu | C_\alpha C_\beta^\dagger \hat{U}[l_1; 0] \hat{U}[N_\tau; l_1] | n_\mu \rangle}{\prod_{\mu'=1}^N \sum_{n_{\mu'}=0,1} \langle n_{\mu'} | \hat{U}[l_1; 0] \hat{U}[N_\tau; l_1] | n_{\mu'} \rangle} \langle \beta | k \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Comme on fait une trace, seuls les termes, $\alpha = \beta$ survivent. Ainsi on a

$$(*) = \sum_{\alpha} \langle i | \alpha \rangle \left\{ \frac{\prod_{\mu=1}^N [\langle 0 | C_\alpha C_\alpha^\dagger | 0 \rangle]}{\prod_{\mu'=1}^N 1 + b_{\mu'}} + \frac{\langle 0 | C_\mu C_\alpha C_\alpha^\dagger C_\mu^\dagger b_\mu | 0 \rangle}{\prod_{\mu'=1}^N 1 + b_{\mu'}} \right\} \langle \alpha | k \rangle, \quad (\text{B.6})$$

où le résultat du dénominateur nous est donné par l'équation A.18.

En permutant les opérateurs fermioniques dans le deuxième terme du membre de droite de B.6, on écrit

$$(*) = \sum_{\alpha} \langle i | \alpha \rangle \frac{\prod_{\mu=1}^N \left[1 + b_\mu - \overbrace{b_\mu \langle 0 | C_\mu C_\alpha^\dagger C_\alpha C_\mu^\dagger | 0 \rangle}^{b_\alpha \delta_{\alpha\mu}} \right]}{\prod_{\mu'=1}^N 1 + b_{\mu'}} \langle \alpha | k \rangle. \quad (\text{B.7})$$

On s'aperçoit que les éléments du numérateur et du dénominateur s'annulent un à un,

sauf dans le cas $\mu = \alpha$, ce qui nous permet d'avoir

$$\begin{aligned}
 (*) &= \sum_{\alpha} \langle i|\alpha\rangle \frac{1}{1+b_{\alpha}} \langle \alpha|k\rangle \\
 &= \langle i| \underbrace{\left[\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \frac{1}{1+b_{\alpha}} \langle \alpha| \right]}_{[I+B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]^{-1}} |k\rangle, \tag{B.8}
 \end{aligned}$$

tel que vu à l'équation (A.19).

Enfin, on a

$$\boxed{\frac{\text{Tr} [c_i c_k^{\dagger} \hat{U} [l_1; 0] \hat{U} [N_{\tau}; l_1]]}{\text{Tr} [\hat{U} [l_1; 0] \hat{U} [N_{\tau}; l_1]]} = [I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]_{ik}^{-1}}, \tag{B.9}$$

que l'on substitue dans (B.4) pour obtenir

$$\langle c_i(l_1) c_j^{\dagger}(l_2) \rangle = \sum_k [I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]_{ik}^{-1} (B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1})_{kj} \tag{B.10}$$

$$= \left[[I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]^{-1} B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1} \right]_{ij}. \tag{B.11}$$

De la même façon, on peut montrer que pour $l_2 > l_1$, on a

$$\langle c_j^{\dagger}(l_2) c_i(l_1) \rangle = \left[[I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]^{-1} B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_2+1} \right]_{ij}, \tag{B.12}$$

et donc finalement, l'équation (1.27) est explicitement donnée par

$$\mathcal{G}_{ij}(l_1, l_2) \equiv \begin{cases} \left[[I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]^{-1} B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1} \right]_{ij}, & (l_1 > l_2) \\ - \left[[I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]^{-1} B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_2+1} \right]_{ij}, & (l_2 > l_1) \end{cases}, \tag{B.13}$$

ou après quelques manipulations matricielles

$$\mathcal{G}_{ij}(l_1, l_2) \equiv \begin{cases} \left[B^{l_1} B^{l_1-1} \dots B^{l_2+1} [I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]^{-1} \right]_{ij}, & (l_1 > l_2) \\ - \left[B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_2+1} [I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_{\tau}} \dots B^{l_1+1}]^{-1} \right]_{ij}, & (l_2 > l_1) \end{cases}. \tag{B.14}$$

B.2 Formulation matricielle

Soit la matrice

$$G \equiv \begin{bmatrix} I & 0 & 0 & \dots & B^1 \\ -B^2 & I & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -B^3 & I & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -B^{N_\tau} & I \end{bmatrix}^{-1}. \quad (\text{B.15})$$

Des opérations sur les lignes² vont nous donner deux résultats importants. D'abord le déterminant de la matrice est

$$\det [(G)^{-1}] = \det [I + B^{N_\tau} B^{N_\tau-1} \dots B^3 B^2 B^1] \quad (\text{B.16})$$

et même plus généralement

$$\det [(G)^{-1}] = \det [I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_1+1}]. \quad (\text{B.17})$$

Ensuite, la matrice G elle-même, soit l'inverse de la matrice (B.15) donne

$$G^\sigma(l_1, l_2) = \begin{cases} [I + B^{(l_1-1)} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_1}]^{-1} B^{(l_1-1)} \dots B^{l_2}, & (l_1 > l_2) \\ -[I + B^{(l_1-1)} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_1}]^{-1} B^{(l_1-1)} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_2}, & (l_1 < l_2) \end{cases} \quad (\text{B.18})$$

ou encore

$$G(l_1, l_2) = \begin{cases} B^{(l_1-1)} \dots B^{l_2} [I + B^{(l_2-1)} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_2}]^{-1}, & (l_1 > l_2) \\ -B^{(l_1-1)} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_2} [I + B^{(l_2-1)} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_2}]^{-1}, & (l_1 < l_2) \end{cases}, \quad (\text{B.19})$$

qui est équivalente.

Il y a des ressemblances troublantes entre ces résultats et ceux des 2 sections précédentes. D'abord, l'expression à l'intérieur du déterminant de l'équation (B.17) n'est nulle autre que le résultat (A.21). Ce qui explique le résultat (1.26).

D'autre part, on voit que les expressions (B.18) et (B.19) sont les mêmes que les

²La matrice est constituée de blocs de taille $N \times N$. Les opérations sur les lignes sont donc des produits matriciels. Il est essentiel de toujours utiliser le produit matriciel du même côté. Faire autrement reviendrait à mélanger des opérations sur les lignes avec des opérations sur les colonnes et les résultats seraient alors erronés.

équations (B.13) et (B.14) à la différence près que les indices ne sont pas tout à fait les mêmes. En fait, ceci est dû à la définition que nous avons prise pour les indices de temps. Dans le cas que nous venons d'aborder l désigne un indice de tranche de temps compatible avec les indices habituels pour des matrices, soit de 1 à N_τ . Dans l'autre cas, les fonctions de Green ont des indices de « position » dans le temps, soit de 0 à N_τ .

Pour rendre les 2 notations compatibles, il faut prendre les indices de matrices tels que $l_1, l_2 \in \{0, \dots, N_\tau - 1\}$. À N_τ , on retombe à l'indice 0. On voit donc, que lorsque $l_1 = l_2 = l$, on a

$$G(l, l^-) = [I + B^{l_1} \dots B^1 B^{N_\tau} \dots B^{l_1+1}] \quad (\text{B.20})$$

et que le déterminant de cette dernière matrice est le même que celui de la matrice totale G , ce qui explique encore mieux (B.17).

Annexe C

Fonctions de *Green* de *Matsubara*

C.1 Calcul exact

Les quantités $\langle \hat{O} \rangle$ calculées à l'aide de l'équation (1.2) s'expriment comme un produit d'opérateurs de seconde quantification $A_i(\tau_i)$, de sorte qu'on a explicitement

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr} \left[\hat{\rho}_G T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A) \hat{B}(\tau_B) \hat{C}(\tau_C) \dots \hat{F}(\tau_F) \right] \right], \quad (\text{C.1})$$

où

$$\hat{\rho}_G \equiv \frac{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})}}{\text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{n})} \right]} \quad (\text{C.2})$$

est la matrice densité dans l'ensemble grand canonique, $\hat{\alpha}(\tau_\alpha)$, sont des opérateurs de champ fermioniques, évoluant dans le temps tels que

$$\hat{\alpha}(\tau_\alpha) \equiv e^{\tau_\alpha(\hat{H}-\mu\hat{n})} \hat{\alpha} e^{-\tau_\alpha(\hat{H}-\mu\hat{n})}, \quad 0 \leq \tau_\alpha \leq \beta, \quad (\text{C.3})$$

avec les τ_α qui sont les temps de *Matsubara* associés à chacun des opérateurs $\hat{\alpha}$, et enfin T_τ , l'opérateur d'ordonnancement temporel qui ordonne les opérateurs de façon à ce que le temps augmente de la droite vers la gauche.

On peut prouver grâce aux propriétés cycliques de la trace et au fait que les propagateurs commutent entre eux que

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \text{Tr} \left[\hat{\rho}_G T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A + l) \hat{B}(\tau_B + l) \hat{C}(\tau_C + l) \dots \hat{F}(\tau_F + l) \right] \right] \\ &= \text{Tr} \left[\hat{\rho}_G T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A) \hat{B}(\tau_B) \hat{C}(\tau_C) \dots \hat{F}(\tau_F) \right] \right] \end{aligned}, \quad (\text{C.4})$$

en autant que $\tau_\alpha + l \leq \beta$. En d'autres termes, on peut appliquer une « translation » l dans le temps sur chacun des opérateurs de (C.1) pour retrouver la même équation. Nous reviendrons plus tard à ce résultat.

C.2 Théorème de Wick

Comme nous le répétons depuis le début, le calcul des quantités évoquées dans la section précédente ne se fait pas encore explicitement. Nous pouvons cependant utiliser le théorème de Wick dans le formalisme à température finie, pour décomposer la fonction de Green à N -particules en un produit de fonctions de Green à une particule, telles que nous les avons définies à l'annexe B, évaluées pour une valeur bien précise du champ \mathbf{X} .

Le théorème de Wick nous dit que pour une quantité telle que (C.2), si $\hat{\rho}_G$ est quadratique (c.-à-d. $\hat{\rho}_{G0} \equiv \hat{\rho}_G$) en opérateurs de création et d'annihilation, on a

$$\boxed{\left\langle T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A) \hat{B}(\tau_B) \hat{C}(\tau_C) \dots \hat{F}(\tau_F) \right] \right\rangle_0 = \left[\hat{A}^* \hat{B}^* \hat{C}^{**} \dots \hat{F}^{***} \right] + \left[\hat{A}^* \hat{B}^{**} \hat{C}^* \dots \hat{F}^{***} \right] + \dots}, \quad (\text{C.5})$$

avec

$$\hat{A}^* \hat{B}^* \equiv \left\langle T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A) \hat{B}(\tau_B) \right] \right\rangle_0 = \text{Tr} \left[\hat{\rho}_0 T_\tau \left[\hat{A}(\tau_A) \hat{B}(\tau_B) \right] \right] \quad (\text{C.6})$$

où $\langle \rangle_0$ signifie une moyenne où les propagateurs sont quadratiques (sans interaction) et $\left[\hat{A}^* \hat{B}^{**} \hat{C}^* \dots \hat{F}^{***} \right] = - \left[\hat{A}^* \hat{C}^* \hat{B}^{**} \dots \hat{F}^{***} \right]$.

Dans le cas qui nous intéresse, c'est à dire pour une valeur de \mathbf{X} donnée, on peut utiliser (C.5) sur

$$\begin{aligned} O(\mathbf{X}) &= \text{Tr} \left[\hat{\rho}_0 T_\tau \left[\hat{a}(\tau_A) \hat{b}(\tau_B) \hat{c}(\tau_C) \dots \hat{f}(\tau_F) \right] \right] \\ &\equiv \left\langle T_\tau \left[\hat{a}(\tau_A) \hat{b}(\tau_B) \hat{c}(\tau_C) \dots \hat{f}(\tau_F) \right] \right\rangle_0, \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

où les opérateurs écrits en lettres minuscules sont l'équivalent des opérateurs définis en (C.3), à l'exception du fait que les propagateurs qui les constituent sont des propagateurs à 1-particule qui ne commutent pas entre eux, et dépendent de la configuration de champ \mathbf{X} à laquelle on les évalue. La dépendance sur les champs HS est implicite sur $\hat{\rho}_0$ et sur chacun des opérateurs.

C.3 Estimateurs

En vertu de l'équation (C.4), nous pouvons avoir plusieurs estimateurs d'une même quantité pour une valeur donnée de HS.

Ainsi par exemple

$$\begin{aligned}
\langle c_i^\dagger(\tau)c_i(\tau)c_j^\dagger(0)c_j(0) \rangle_0 &= \overbrace{\langle c_i^\dagger(\tau)c_i(\tau) \rangle_0}^{-\mathcal{G}_{ii}(\tau,\tau^+)} \overbrace{\langle c_j^\dagger(0)c_j(0) \rangle_0}^{-\mathcal{G}_{jj}(0,0^+)} \\
&+ \overbrace{\langle c_i^\dagger(\tau)c_j(0) \rangle_0}^{-\mathcal{G}_{ji}(0,\tau)} \overbrace{\langle c_i(\tau)c_j^\dagger(0) \rangle_0}^{\mathcal{G}_{ij}(\tau,0)} \\
&= [1 - \mathcal{G}_{ii}(\tau^+, \tau)] [1 - \mathcal{G}_{jj}(0^+, 0)] \\
&- \mathcal{G}_{ji}(0, \tau)\mathcal{G}_{ij}(\tau, 0)
\end{aligned} \tag{C.8}$$

n'égale pas

$$\begin{aligned}
\langle c_i^\dagger(\tau+l)c_i(\tau+l)c_j^\dagger(l)c_j(l) \rangle_0 &= [1 - \mathcal{G}_{ii}((\tau+l)^+, (\tau+l))] [1 - \mathcal{G}_{jj}(l^+, l)] \\
&- \mathcal{G}_{ji}(0, \tau+l)\mathcal{G}_{ij}(\tau+l, l)
\end{aligned} \tag{C.9}$$

Ce sont cependant tous deux des estimateurs de $\langle c_i^\dagger(\tau)c_i(\tau)c_j^\dagger(0)c_j(0) \rangle$, pourvu que $\tau+l \leq \beta$. Ainsi plus l est grand, moins le nombre d'estimateurs disponibles pour un \mathbf{X} donné est grand. En pratique, nous utilisons au plus un estimateur par tranche de temps champ HS. En effet, calculer tous les estimateurs demande un temps de calcul très important pour le peu d'information que l'on y gagne. Les corrélations entre estimateurs sont très fortes.

Notons qu'à chaque fois que l'on change de tranche de temps dans la boucle sur ces derniers, dans le programme, on peut remettre le compteur à $l = 0$ en tout temps dans l'équation (C.4).

Annexe D

Dérivée par rapport à la température

Nous avons vu en (1.9) que l'erreur systématique associée à la moyenne d'une observable ϵ va linéairement comme $(\Delta\tau)^2$. D'après Fye [21], on peut écrire E l'approximation de ϵ pour un $\Delta\tau$ donné, comme

$$\begin{aligned} E(\beta, N_\tau) &\simeq \epsilon(\beta) + C(\beta) (\Delta\tau)^2 \\ &\simeq \epsilon(\beta) + C(\beta) \left(\frac{\beta}{N_\tau}\right)^2, \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

avec un coefficient $C \equiv C(\beta)$ et N_τ , le nombre de tranches de temps utilisées (dépendance via $\Delta\tau$).

On cherche la dérivée par rapport à la température d'une telle quantité. On sait que

$$\frac{d\epsilon}{dT} = -\beta^2 \frac{d\epsilon}{d\beta}. \quad (\text{D.2})$$

On peut évaluer le côté droit de l'équation précédente en termes de β^1 .

Soit β^\pm , deux valeurs de β telles que $\Delta\beta \equiv \beta^+ - \beta^-$, on définit une moyenne $\beta_0 \equiv \frac{\beta^+ + \beta^-}{2}$ telle que $E(\beta^\pm, N_\tau) = E\left(\beta_0 + \frac{\Delta\beta}{2}, N_\tau\right)$. Cela nous permet de faire un développement de l'expression (D.1), autour de $\Delta\beta = 0$.

Après quelques simplifications on peut écrire $\frac{\Delta E}{\Delta\beta}$, où $\Delta E \equiv E(\beta^+, N_\tau) - E(\beta^-, N_\tau)$,

¹C'est β et non T qui est utilisée dans le programme MCQ.

comme

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta E}{\Delta \beta} &\simeq \epsilon'(\beta_0) + \frac{1}{24} \epsilon'''(\beta_0) (\Delta \beta)^2 \\
&\quad - \frac{1}{N_\tau^2} \left\{ \beta_0 C'(\beta_0) + \beta_0^2 C''(\beta_0) \right\} \\
&\quad - \frac{1}{N_\tau^2} \left\{ \frac{1}{4} C'(\beta_0) + \frac{1}{4} \beta_0 C''(\beta_0) + \frac{1}{24} \beta_0^2 C'''(\beta_0) \right\} (\Delta \beta)^2, \\
&\quad + O((\Delta \beta)^4)
\end{aligned} \tag{D.3}$$

ou encore en multipliant par $-\beta_0^2$ et en remplaçant $\frac{\beta_0}{N_\tau}$ par $\Delta \tau$

$$\begin{aligned}
-\beta_0^2 \frac{\Delta E}{\Delta \beta} &\simeq -\beta_0^2 \epsilon'(\beta_0) + \overbrace{\left\{ -\beta_0^2 \frac{1}{24} \epsilon'''(\beta_0) \right\}}^{A(\beta_0)} (\Delta \beta)^2 \\
&\quad + \overbrace{\left\{ \beta_0 C'(\beta_0) + \beta_0^2 C''(\beta_0) \right\}}^{B(\beta_0)} (\Delta \tau)^2 \\
&\quad + \overbrace{\left\{ \frac{1}{4} C'(\beta_0) + \frac{1}{4} \beta_0 C''(\beta_0) + \frac{1}{24} \beta_0^2 C'''(\beta_0) \right\}}^{D(\beta_0)} (\Delta \tau)^2 (\Delta \beta)^2 \\
&\quad + O((\Delta \beta)^4)
\end{aligned} \tag{D.4}$$

Ainsi

$$\left. \frac{d\epsilon(T)}{dT} \right|_{T_0} = -\beta_0^2 \left. \frac{d\epsilon(\beta)}{d\beta} \right|_{\beta_0} \tag{D.5}$$

est donnée par l'expression (D.4) avec $T_0 \equiv \frac{1}{\beta_0}$.

En faisant les régressions linéaires appropriées, nous nous retrouvons avec des corrections d'ordre supérieures, qui sont assurément très très petites.

Bibliographie

- [1] J H de Boer et E J W Verwey. Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands. *P. Phys. Soc. Lond.* **49**, 59 (1937).
- [2] N F Mott et R Peierls. Discussion of the paper by de boer and verwey. *P. Phys. Soc. Lond.* **49**, 72 (1937).
- [3] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **276**, 238–257 (1963).
- [4] J.G. Bednorz et K.A. Müller. *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [5] P. W. Anderson. *Science* **235**, 1196 (1987).
- [6] C. Bourbonnais et D. Jérôme. *Advances in Synthetic Metals, Twenty Years of Progress in Science and Technology*. Elsevier, New York, (1999).
- [7] D. Jaksch et P. Zoller. The cold atom hubbard toolbox. *Annals of Physics* **315**, 52–79 (2005).
- [8] J. Schulte et M.C. Böhm. Specific heat of the half-filled 1d hubbard model. *phys.stat.sol. (b)* **199**, 59 (1997).
- [9] G. Jüttner, A. Klümper, et J. Suzuki. The hubbard chain at finite temperatures : ab initio calculations of tomonaga-luttinger liquid properties. *Nuclear Physics B* **522**(3), 471–502 (1998).
- [10] Daniel Duffy et Adriana Moreo. Specific heat of the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. B* **55**, 12918 (1997).
- [11] T.Paiva, R. T. Scalettar, C. Huscroft, et A. K. McMahan. Signatures of spin and charge energy scales in the local moment and specific heat of the half-filled two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. B* **63**, 125116 (2001).
- [12] Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay. *J. Phys. 1* **7**, 1309 (1997).
- [13] David Sénéchal, André-Marie Tremblay, et Claude Bourbonnais, editors. *Theoretical methods for strongly correlated electrons*. The CRM series in mathematical physics. Springer, New York, (2004).
- [14] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino, et R.L. Sugar. Monte carlo calculations of coupled boson-fermion systems. i. *Phys. Rev. D* **24**, 2278 (1981).

- [15] J.E. Hirsch. Discrete hubbard-stratonovich transformation for fermion lattice models. *Phys. Rev. B* **28**, 4059–4061 (1983).
- [16] J.E. Hirsch. Erratum : Discrete hubbard-stratonovich transformation for fermion lattice models. *Phys. Rev. B* **29**, 4159 (1984).
- [17] J.E. Hirsch. Two-dimensional hubbard model : Numerical simulation study. *Phys. Rev. B* **31**, 4403–4419 (1985).
- [18] H. F. Trotter. On the product of semi-groups of operators. *Proc. Am. Math. Soc.* **10**, 545 (1959).
- [19] W Magnus. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. *Commun. Pure Appl.* , 649 (1954).
- [20] R.M. Wilcox. Exponential operators and parameter differentiation in quantum physics. *J. math. Phys.* , 962 (1967).
- [21] R. M. Fye. New results on trotter-like approximations. *Phys. Rev. B* **33**, 6271–6280 (1986).
- [22] Malvin H. Kalos et Paula A. Whitlock. *Monte Carlo Methods. Vol. I : Basics*. Wiley, New York, (1986).
- [23] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, et E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [24] W. W. Wood et F. R. Parker. Monte carlo equation of state of molecules interacting in the lennard-jones potential. i. supercritical isotherm at about twice the critical temperature. *J. Chem. Phys.* **27**, 720 (1957).
- [25] M. Allen et D. Tildesley. *Computer Simulations of Liquids*. Oxford University Press, (1987).
- [26] H.G Evertz. The loop algorithm. *Adv. Phys.* **52**, 1 (2003).
- [27] R.T. Scalettar, R. M. Noack, et R. R. P. Sing. Ergodicity at large couplings with the determinant monte carlo algorithm. *Phys. Rev. B.* **44**, 10502 (1991).
- [28] J. Shao et D. Tu. *The Jackknife and the bootstrap*. Springer series in statistics. Springer-Verlag, New York, (1995).
- [29] S. Liu et Y. Alhassid. Signature of a pairing transition in the heat capacity of finite nuclei. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 022501 (2001).
- [30] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, et Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* **68**(1), 13 (1996).
- [31] Walter Metzner et Dieter Vollhardt. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **62**(3), 324–327 (1989).
- [32] Elliott H. Lieb et F. Y. Wu. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.* **21**(3), 192 (1968).

- [33] L. D. Faddeev et L. A. Takhtajan. What is the spin of a spin wave? *Phys. Lett. A* **85**, 375–377 (1981).
- [34] Neil W. Ashcroft et N. David Mermin. *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York ; Montreal, (1976).
- [35] Jill C. Bonner et Michael E. Fisher. Linear magnetic chains with anisotropic coupling. *Phys. Rev.* **135**(3A), A640–A658 (1964).
- [36] F.H.L Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, et V.E. Korepin. *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, Cambridge,UK, (2005).
- [37] J. Sólyom. *Adv. Phys.* **28**, 201 (1979).
- [38] J. Jaklič et P. Prelovšek. Thermodynamic properties of the planar $t-j$ model. *Phys. Rev. Lett.* **77**(5), 892–895 (1996).
- [39] Stéphane Pairault, David Sénéchal, et A.-M. S. Tremblay. Strong-coupling expansion for the hubbard model. *Phys. Rev. Lett.* **80**(24), 5389–5392 (1998).
- [40] R. Coldea, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, C. D. Frost, T. E. Mason, S.-W. Cheong, et Z. Fisk. Spin waves and electronic interactions in la_2cuo_4 . *Phys. Rev. Lett.* **86**(23), 5377–5380 (2001).
- [41] Jean-Yves Delannoy. Thèse de Doctorat, École Normale Supérieure de Lyon, (2005).
- [42] François Lemay. *Des propriétés de l'état normal du modèle de Hubbard bidimensionnel*. Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, (2000).
- [43] I.I. Pomeranchuk. *Zhur. Eksp. i. Theoret. Fiz.* **20**, 919 (1950).
- [44] Sébastien Roy. Calculs thermodynamiques et leur uniformité pour le modèle de hubbard bi-dimensionnel. Mémoire de Maîtrise, Université de Sherbrooke, (2000).
- [45] N. D. Mermin et H. Wagner. *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [46] Michael Kohl. Thermometry of fermionic atoms in an optical lattice. *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* **73**(3), 031601 (2006).