

# Supraconductivité et ondes de densité de charge dans le modèle de Holstein-Hubbard

par

Alexandre Payeur

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, 30 mars 2010



Library and Archives  
Canada

Published Heritage  
Branch

395 Wellington Street  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada

Bibliothèque et  
Archives Canada

Direction du  
Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada

*Your file* *Votre référence*  
ISBN: 978-0-494-61486-0  
*Our file* *Notre référence*  
ISBN: 978-0-494-61486-0

**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.

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

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

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

  
**Canada**

Le 25 mars 2010

*le jury a accepté le mémoire de Monsieur Alexandre Payeur  
dans sa version finale.*

Membres du jury

Professeur David Sénéchal  
Directeur de recherche  
Département de physique

Professeur Christian Lupien  
Membre  
Département de physique

Professeur André-Marie Tremblay  
Président rapporteur  
Département de physique

*À qui de droit ... en espérant que le cardinal de l'ensemble des êtres humains qui liront ce document soit supérieur à 3...*

# Sommaire

L'hamiltonien de Holstein-Hubbard est souvent utilisé pour représenter la physique des systèmes électrons-phonons à basse dimensionalité (par exemple les supraconducteurs organiques). Il contient une interaction locale répulsive entre les électrons, ainsi qu'une interaction locale entre les électrons et les phonons.

Cet hamiltonien est étudié par l'approximation de l'amas variationnel (VCA), qui permet le traitement d'états à symétrie brisée. C'est la première fois que les phonons sont incorporés dans cette méthode de résolution numérique. Ce travail constitue une étape préliminaire d'un projet plus vaste visant à étudier l'impact des phonons sur la supraconductivité à haute température des cuprates.

Dans ce mémoire, il est question des ondes de densité de charge et de la supraconductivité de type  $s$  au demi-remplissage et à température nulle. L'étude des ondes de densité de charge se formant dans un réseau unidimensionnel nous amène à étudier la possibilité d'une phase métallique dans le diagramme de phase du modèle de Holstein-Hubbard. Sur un réseau carré bidimensionnel, c'est la coexistence entre les ondes de densité de charge et la supraconductivité qui attire notre attention. Nous trouvons qu'effectivement, ces deux phases sont en compétition et coexistent sur une certaine plage de valeurs des paramètres du modèle.

# Remerciements

La connaissance n'a d'existence que lorsqu'elle est partagée. C'est en tout cas l'impression que m'a laissée le professeur Sénéchal pendant ces deux années. Au début de ma maîtrise, je répétais à qui voulait entendre que j'avais choisi non pas le domaine — car à ce moment la majorité du département étudiait la matière condensée et je ne me sentais pas assez connaissant pour choisir un sujet donné —, mais le professeur. Je n'ai jamais regretté mon choix. Je tiens à le remercier pour sa patience, sa présence et son support.

Merci aussi aux professeurs de la session de cours de maîtrise : André-Marie Tremblay, René Côté et Alexandre Blais. Tout me paraît tellement moins exigeant maintenant !

Merci à mes deux colocataires Marco et Yann de m'avoir dit de « me calmer les nerfs » quand il le fallait et pour leur présence en générale.

Finalement, merci à ma famille pour le support indéfectible.

# Table des matières

<b>Sommaire</b>	<b>iv</b>
<b>Table des matières</b>	<b>vi</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>ix</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>x</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Modèle de Holstein-Hubbard</b>	<b>3</b>
1.1 Modèle de Hubbard . . . . .	3
1.1.1 Symétries du modèle de Hubbard . . . . .	7
1.1.2 Cas limites . . . . .	10
1.1.3 Diagramme de phase du modèle de Hubbard autour du demi-remplissage	11
1.2 Phonons et modèle de Holstein-Hubbard . . . . .	13
1.2.1 Approximation unimodale . . . . .	14
1.2.2 Transformations de l'hamiltonien de Holstein-Hubbard . . . . .	15
1.3 Symétries brisées . . . . .	20
1.3.1 Onde de densité de charge . . . . .	21
1.3.2 Supraconductivité . . . . .	27
1.4 Les phases du modèle de Holstein-Hubbard . . . . .	29
<b>2 Théorie des perturbations interamas</b>	<b>31</b>
2.1 Fonction de Green . . . . .	32
2.2 Division du système en amas . . . . .	33
2.2.1 Transformées de Fourier sur les réseaux . . . . .	36

2.2.2	Application à l'hamiltonien de Holstein-Hubbard . . . . .	37
2.3	Périodisation . . . . .	38
2.4	Diagonalisation exacte de l'hamiltonien d'un amas . . . . .	39
2.4.1	Algorithme de Lanczos . . . . .	40
2.4.2	Obtention de la fonction de Green I : algorithme de Lanczos . . . . .	45
2.4.3	Obtention de la fonction de Green II : algorithme de Lanczos de bande . . . . .	47
2.5	Calcul des quantités physiques à partir de la fonction de Green . . . . .	51
2.6	Courte discussion de la méthode . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Théorie des perturbations interamas variationnelle</b> . . . . .	<b>56</b>
3.1	Self-énergie . . . . .	57
3.2	Fonctionnelle de Luttinger-Ward et grand potentiel thermodynamique . . . . .	59
3.3	Fonctionnelle de la self-énergie . . . . .	61
3.4	Champs de Weiss . . . . .	63
3.5	Courte discussion de la méthode . . . . .	64
3.5.1	Limite thermodynamique . . . . .	64
3.5.2	Détermination des points stationnaires de la fonctionnelle . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Ondes de densité de charge en 1D</b> . . . . .	<b>67</b>
4.1	Graphique générique . . . . .	69
4.2	Nature de la solution à faible couplage . . . . .	71
4.2.1	Gap . . . . .	73
4.2.2	Nature de l'isolant : Double occupation . . . . .	76
4.3	Comportement à $L \rightarrow \infty$ de $\lambda_c$ . . . . .	78
4.4	Diagramme de phase . . . . .	79
4.4.1	Comparaison avec la littérature . . . . .	80
<b>5</b>	<b>Supraconductivité et coexistence dans le modèle de Holstein 2D</b> . . . . .	<b>82</b>
5.1	Supraconductivité . . . . .	83
5.1.1	Mode $\mathbf{q} = (0, 0)$ . . . . .	83
5.1.2	Mode $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . . . . .	84
5.1.3	Comparaison entre les modes $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $\boldsymbol{\pi}$ . . . . .	86
5.2	Coexistence SC/ODC pour le mode $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . . . . .	88
5.2.1	Utilisation de la symétrie particule-trou . . . . .	91



<i>Table des matières</i>	viii
<b>Conclusion</b>	<b>94</b>
<b>Annexe A Transformées de Fourier sur les réseaux</b>	<b>96</b>
A.1 Transformée de Fourier sur le réseau $\gamma$ . . . . .	96
A.2 Division du système en amas . . . . .	98
A.3 Application aux quantités du problème . . . . .	100
A.3.1 Quantités à un indice . . . . .	100
A.3.2 Quantités à deux indices . . . . .	101
<b>Bibliographie</b>	<b>103</b>

# Liste des tableaux

1.1	Lien entre l'échelle d'énergie dominante et l'état prévu correspondant du système. ODS = Onde de Densité de Spin, ODC = Onde de Densité de Spin et SC = Supraconductivité. . . . .	30
4.1	Résumé de ce qui a été obtenu par différents auteurs et différentes techniques pour la phase métallique. DMRG : Density Matrix Renormalization Group ; LF : Transformation de Lang-Firsov ; SSE-QMC : Stochastic Series Expansion Quantum Monte Carlo ; MFRG : Multiscale Functional Renormalization Group. . . . .	69

# Liste des figures

1.1	Densité d'états en fonction de l'énergie pour les sous-bandes demi-remplies de Hubbard. Les centres des bandes sont séparés de $U$ et la largeur des bandes est $W \sim 2zt$ ; a. $U > U_c$ , b. $U < U_c$ . Figure adaptée de [16]. . . . .	12
1.2	Énergie du fondamental en fonction du paramètre sans dimension $g$ pour un système de taille finie. Sur les deux figures, l'énergie du fondamental est donnée par la courbe plus épaisse. Dans le cas de la figure a, il y a croisement de niveau, alors qu'il y a évitement pour b. Dans la limite thermodynamique, la courbe inférieure de la figure b peut présenter un point non analytique. Adaptée de [24]. . . . .	20
1.3	Distortion de Peierls pour un système demi-rempli au zéro absolu : a) Métal ; b) Isolant de Peierls. Figure tirée de [26] . . . . .	22
1.4	Relation de dispersion électronique pour l'onde de densité de charge. Figure tirée de [28]. . . . .	26
2.1	Division du système en amas. Les amas comprennent 4 sites dans cet exemple. Les vecteurs $\mathbf{r}$ , $\tilde{\mathbf{r}}$ et $\mathbf{R}$ sont aussi représentés. Les lignes à tirets représentent les liens interamas. . . . .	33
2.2	Illustration des zones de Brillouin du réseau et du super-réseau de la figure 2.1. Les vecteurs $\mathbf{k}$ et $\tilde{\mathbf{k}}$ appartiennent respectivement à $ZB_\gamma$ et $ZB_\Gamma$ . L'aire de $ZB_\gamma$ est quatre fois celle de $ZB_\Gamma$ . Les vecteurs $\mathbf{K}$ sont des éléments du réseau réciproque de $\Gamma$ ainsi que de $ZB_\gamma$ . L'équivalence $\mathbf{k} \leftrightarrow \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$ est explicite. . . . .	37
2.3	Contour d'intégration pour le calcul d'observables ( $R = \infty$ ). . . . .	53
3.1	Définition diagrammatique de la fonctionnelle de Luttinger-Ward pour un système purement électronique ( $\lambda = 0$ ). . . . .	61

- 3.2 Champ de Weiss  $M$  et paramètre d'ordre  $\langle M \rangle$  (divisé par 4) antiferromagnétiques à l'équilibre pour le modèle de Hubbard demi-rempli avec  $U = 16$  en fonction du facteur d'échelle. Les amas utilisés sont, en partant du point le plus à gauche :  $2 \times 2$ ,  $2 \times 3$ ,  $2 \times 4$ ,  $B10$ ,  $3 \times 4$  et  $4 \times 4$ .  $B10$  signifie un amas de 10 sites et sa forme est donnée à la figure 1 de la référence [37]. La figure est adaptée de cette même référence. . . . . 65
- 4.1 Diagramme de phase pour le modèle de Holstein-Hubbard unidimensionnel (local) à demi rempli tel qu'obtenu par Hardikar *et al.* [47]. La lettre  $I$  dénote la phase intermédiaire métallique. . . . . 68
- 4.2 Faits saillants de l'étude des ODC par VCA dans le cadre de l'approximation à un mode. Toutes les valeurs sont absolues. Les portions de courbe aberrantes sont en pointillées. La solution normale ( $W = 0$ ) pour  $n_{\text{ph}}$  a été prolongée à gauche et c'est pourquoi il y a deux courbes vertes sur une portion du graphique. Sur la portion non pointillée,  $W$  est multiplié par 10. 70
- 4.3 Même graphique que la figure 4.2, mais pour  $U = 0$ . . . . . 72
- 4.4 Fonction spectrale pour les paramètres suivants :  $L = 6$ ,  $U = 2\mu = 5$ ,  $\omega_D = 5$ ,  $\lambda = 1$ . En ordonnée : le vecteur d'onde  $k$ ; en abscisse : l'énergie  $E = \omega$ .  $\eta$  est fixé à 0.2.  $\omega = 0$  est le niveau de Fermi. . . . . 73
- 4.5 Pour  $L = 6, 8, 10$  et  $U = 0$ , valeur du gap de charge en fonction du couplage. L'insert montre que la courbe ne tombe à zéro qu'à  $\lambda = 0$ . . . 74
- 4.6 Pour  $L = 6$  et  $U = 1, 2, 3, 4$ , valeur du gap de charge en fonction du couplage. Les droites pointillées correspondent à l'équation  $\lambda = \lambda_c$ . . . . 75
- 4.7 Gap à une particule en fonction de  $1/L$ . La courbe pleine rouge est un lissage quartique des croix noires uniquement, lesquelles représentent les valeurs du gap pour un système exempt de phonons. Le « x » vert représente la valeur exacte telle que donnée dans [14]. Les ronds bleus correspondent au minimum du gap en fonction de  $\lambda$ . . . . . 76
- 4.8 Double occupation (D.O.) en fonction de  $\lambda$ . La courbe rouge est celle qui correspond aux données de la figure 4.2. La courbe verte représente la D.O. pour la solution normale. Le point où les courbes rouge et verte se rencontre correspond à  $\lambda_c$ . La courbe bleue, quant à elle, sert de référence (voir texte). . . . . 77

4.9	Comportement de $\lambda_c$ en fonction de l'inverse de la taille de l'amas à $U = 0$ et $U = 3$ . $\lambda_c$ est multiplié par $\sqrt{L}$ pour tenir compte du scaling intrinsèque de $\lambda$ (voir texte). . . . .	78
4.10	Diagramme de phase pour le modèle de Holstein-Hubbard unidimensionnel à demi rempli dans l'approximation unimodale. La droite pointillée représente la condition $U_{\text{eff}} = U - 2g^2/\omega_D = 0$ . . . . .	80
4.11	Diagramme de phase pour le modèle de Holstein-Hubbard unidimensionnel (local) à demi rempli tel qu'obtenu par Fehske <i>et al.</i> [6]. Ici, $\lambda = g^2/2\omega_D$ (où $g$ est celui de la figure 4.1) et $u = U/4$ . La droite tiretée est la solution d'Hardikar. La zone gris foncé dénote le liquide bipolaronique alors que la gris pâle représente le liquide de Luttinger. L'insert donne les gaps de charge à une et deux particules, de même que le gap de spin. . . . .	81
5.1	SC dans le modèle de Holstein 2D pour l'approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (0, 0)$ ). . . . .	84
5.2	Valeur de la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss SC pour $\lambda$ un peu plus petit (haut) et un peu plus grand (bas) que la valeur à la transition ( $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ). . . . .	85
5.3	SC dans le modèle de Holstein 2D pour l'approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ). Le décalage, $\langle a + a^\dagger \rangle$ , y est divisé par 10 pour une question d'échelle. $n_{\text{ph}}$ est nul sur la portion de droite. . . . .	86
5.4	Comparaison des énergies de condensation ( $E_C$ ) et des paramètres d'ordre SC pour les deux modes sous études. Noter que nous nous restreignons à l'intervalle $\lambda \in [0, 0.5]$ . . . . .	87
5.5	Coexistence ODC/SC dans le modèle de Holstein 2D pour l'approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ). Le décalage, $\langle a + a^\dagger \rangle$ , y est divisé par 10 pour une question d'échelle. . . . .	88
5.6	Graphique log-log du paramètre d'ordre SC en fonction de $1/\lambda^2$ à faible couplage $\lambda$ . . . . .	90
5.7	Coexistence ODC/SC dans le modèle de Holstein 2D pour l'approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ). . . . .	90
5.8	Comparaison de la SC en présence (lignes) et en absence (points) de l'ODC pour $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$ . . . . .	92

# Introduction

La supraconductivité fascine et étonne depuis un siècle. Découverte en 1911 par Kamerlingh Onnes, la supraconductivité dite « conventionnelle » a reçu une explication grâce au travail de Bardeen, Cooper et Schrieffer,<sup>1</sup> à la fin des années 50. Ce que d'aucuns considéraient comme un domaine virtuellement clos quant à ses principes fondamentaux eut un regain de vie avec la découverte de la supraconductivité à haute température critique (SHTc) des cuprates, en 1986, par Bednorz et Müller. Depuis, expérimentateurs et théoriciens s'échinent à trouver le mécanisme d'appariement des électrons permettant la formation des paires de Cooper, lesquelles transportent le courant supraconducteur. Car, en effet, les phonons, responsables de la formation de ces paires chez les supraconducteurs conventionnels, ne semblent pas jouer un rôle comparable chez les SHTc.

Pour étudier les solides en général, et les SHTc en particulier, il est nécessaire de faire appel à des modèles, des hamiltoniens décrivant les degrés de liberté les plus importants du système. La construction desdits modèles prend appui sur le comportement expérimental des matériaux ; le but est de reproduire le plus fidèlement possible les caractéristiques physiques du système, tout en gardant les mathématiques à leur plus simple. Pour les cuprates SHTc, le modèle de Hubbard [1] est étudié depuis 1987, mais son utilité ne se borne pas à l'étude de ces matériaux. En effet, celui-ci est perçu comme un parangon particulièrement simple permettant de décrire la physique des électrons dans les systèmes où ces derniers sont fortement corrélés.

Le modèle de Hubbard n'inclut cependant pas une dimension essentielle de la physique des solides : les mouvements des ions autour de leur position d'équilibre et leurs interactions avec les électrons. En effet, bien que les phonons ne semblent pas être *la* cause de l'appariement des électrons chez les SHTc (voir par exemple [2]), il n'en demeure pas moins qu'il faut être en mesure de statuer sur leur rôle exact. Dans ce mémoire, nous

---

<sup>1</sup>Entre autres, car la physique est un domaine foncièrement coopératif. Mais ce sont eux qui ont reçu le prix à la clé...

études donc un hamiltonien incluant les degrés de liberté des phonons dans le modèle de Hubbard : le modèle de Holstein-Hubbard.

Le travail rapporté dans ce mémoire doit être considéré comme une première étape vers l'étude de l'impact des phonons sur la supraconductivité des SHTc. Cette étape comprend l'inclusion des phonons dans une méthode de résolution du modèle de Hubbard, appelée la VCA (Variationnal Cluster Approximation). Pour conclure au succès de l'entreprise, nous devons comparer nos résultats avec des solutions existantes du modèle de Holstein-Hubbard pour des systèmes simples à température nulle. D'où l'étude des ondes de densité de charge dans un réseau unidimensionnel. Bien que les études du modèle Holstein-Hubbard 1D ne manquent pas ([3–7]), il reste à déterminer s'il y a effectivement présence d'une phase métallique dans son diagramme de phase. C'est en partie ce que nous nous proposons de faire dans ce mémoire. Car également, nous étudierons la supraconductivité de type *s* et sa coexistence avec les ondes de densité de charge dans un réseau carré bidimensionnel. Cette fois-ci, les degrés de liberté électroniques et phononiques seront décrits par le modèle de Holstein, où les électrons sont indépendants.

Le chapitre 1 décrit l'hamiltonien de Holstein-Hubbard ainsi que les états à symétrie brisée qui seront étudiés dans ce mémoire. Les chapitres 2 et 3 présentent la méthode de résolution du modèle. Finalement, les résultats sont présentés aux chapitres 4 et 5.

# Chapitre 1

## Modèle de Holstein-Hubbard

L'hamiltonien étudié dans ce mémoire est présenté dans ce chapitre. Il débute avec l'hamiltonien de Hubbard, pour lequel le réseau est statique. En ajoutant les vibrations du réseau et l'interaction de Holstein [8] entre les électrons et les phonons, le modèle de Holstein-Hubbard est obtenu. Finalement, les états à symétrie brisée étudiés dans ce mémoire seront exposés.

### 1.1 Modèle de Hubbard

Pour paraphraser E.H. Lieb [9], le modèle de Hubbard est au problème des électrons corrélés ce que le modèle de Ising est au problème des interactions spin-spin : il constitue le modèle le plus simple affichant plusieurs propriétés physiques réelles. Historiquement, cet hamiltonien origine d'un papier par Gutzwiller [10] traitant du ferromagnétisme des électrons  $d$  dans les métaux de transition. Hubbard [1], en 1963, étudia également les corrélations électroniques dans les bandes étroites  $d$  et  $f$ . L'exhaustivité du traitement de Hubbard fait que la postérité a retenu son nom. L'étude de ce modèle a connu un regain d'énergie avec son application aux cuprates supraconducteurs à partir de 1987 par Anderson [11], soit un an après leur découverte par Bednorz et Müller.

Dans le formalisme de la seconde quantification, l'hamiltonien d'un système d'électrons en interaction avec un potentiel à un corps  $V(\hat{\mathbf{x}})$ <sup>1</sup> et interagissant entre eux *via* le potentiel  $U(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{x}}') = e^2/|\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{x}}'|$  indépendant du spin s'écrit de la façon suivante ( $\hbar \equiv 1$  dans

---

<sup>1</sup>Tous les opérateurs, à l'exception des opérateurs d'échelle, seront notés par un accent circonflexe dans ce mémoire.



ce mémoire) [12] :

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d^3x \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) + \quad (1.1)$$

$$\sum_{\sigma, \sigma'} \int \int \frac{d^3x d^3x'}{2} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{x}') \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \quad (1.2)$$

Le potentiel  $V$  est bien entendu périodique, puisqu'il découle du réseau cristallin statique :  $V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + \mathbf{r})$ , où  $\mathbf{r}$  est un vecteur du réseau direct. L'opérateur de champ  $\psi_{\sigma}(\mathbf{x})$  détruit un électron de spin  $\sigma$  à la position  $\mathbf{x}$  ( $\{\psi_{\sigma}(\mathbf{x}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta_{\sigma\sigma'}$ ). La dimension spatiale n'est pas spécifiée pour le moment, quoique seuls des réseaux carrés à deux dimensions ou à une dimension seront étudiés dans ce mémoire. Une seule bande électronique sera considérée.

Le premier terme de l'hamiltonien est diagonal dans la base des fonctions de Bloch,  $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ . Ce terme sera qualifié de « cinétique », bien qu'il comprenne aussi le potentiel cristallin. Décomposant l'opérateur de champ de la façon suivante :

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\sigma}(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (1.3)$$

le terme cinétique s'écrit :

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) c_{\sigma}(\mathbf{k}), \quad (1.4)$$

où les vecteurs  $\mathbf{k}$  appartiennent à la première zone de Brillouin (ZB) et  $c_{\sigma}^{(\dagger)}(\mathbf{k})$  détruit (créé) un électron de Bloch de spin  $\sigma$  et de quasi-impulsion  $\mathbf{k}$ .

Le modèle de Hubbard doit décrire des matériaux à bandes étroites, où le recouvrement des orbitales électroniques est passablement faible ; les électrons sont localisés dans le voisinage des sites atomiques. C'est pourquoi les fonctions de Wannier constituent les fonctions de base de choix :

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}\sigma} w(\mathbf{x} - \mathbf{r}), \quad (1.5)$$

où  $w(\mathbf{x} - \mathbf{r}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{r} \rangle$  est la fonction de Wannier centrée au site  $\mathbf{r}$  du réseau direct et  $c_{\mathbf{r}\sigma}$

détruit un électron dans cet état. L'hamiltonien (1.1) devient alors :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \sigma} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4} c_{\mathbf{r}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_2\sigma'}^\dagger U_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\mathbf{r}_4} c_{\mathbf{r}_3, \sigma'} c_{\mathbf{r}_4, \sigma} \quad (1.6)$$

où  $t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ , dit l'intégrale de saut, est donnée par :

$$t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \int d^3x w^*(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) w(\mathbf{x} - \mathbf{r}'), \quad (1.7)$$

et l'élément de matrice  $U_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\mathbf{r}_4}$  est :

$$U_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\mathbf{r}_4} = \int \int d^3x d^3x' w^*(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1) w^*(\mathbf{x}' - \mathbf{r}_2) U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') w(\mathbf{x}' - \mathbf{r}_3) w(\mathbf{x} - \mathbf{r}_4). \quad (1.8)$$

Les fonctions de Wannier étant fort localisées, les interactions entre deux électrons sur des sites différents seront négligées. Également, il est commun de ne considérer que les sauts aux premiers voisins avec  $t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \equiv -t$ . Ce faisant apparaît le modèle de Hubbard :

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma} + c.h.) + U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow}, \quad (1.9)$$

où le symbole  $\langle \dots \rangle$  signifie de ne considérer qu'une fois chaque paire de plus proches voisins et  $\hat{n}_{\mathbf{r}\sigma} = c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma}$ . Les conditions de frontière sont supposées périodiques, ce qui veut dire qu'un électron arrivé au bout du cristal fini de  $N_s$  sites peut sauter sur les premiers sites. Dans la suite,  $U$  est toujours supposé positif ou nul, à moins d'avis contraire.

Le nombre d'électrons de spin  $\uparrow$  et le nombre d'électrons de spin  $\downarrow$  sont séparément conservés, car  $[\hat{H}, \hat{N}_\uparrow] = [\hat{H}, \hat{N}_\downarrow] = 0$ , avec  $\hat{N}_\sigma = \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma}$ . Cela signifie que l'état fondamental du système comporte un nombre bien défini d'électrons  $\uparrow$  et  $\downarrow$ ; les valeurs propres de  $\hat{N}_\uparrow$  et  $\hat{N}_\downarrow$  (respectivement  $N_\uparrow$  et  $N_\downarrow$ ) sont de bons nombres quantiques. À la place de ce couple  $(N_\uparrow, N_\downarrow)$ , nous utiliserons le plus souvent  $(N, S_z)$ , où  $S_z$  est la valeur propre de l'opérateur spin total dans la direction  $z$ ,  $\hat{S}_z = \hat{N}_\uparrow - \hat{N}_\downarrow$ ,<sup>2</sup> pour caractériser le fondamental.

À noter que la définition suivante de l'hamiltonien de Hubbard se retrouve parfois dans la littérature :

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N}, \quad (1.10)$$

<sup>2</sup>Rigoureusement,  $\hat{S}_z = \frac{1}{2}(\hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow})$ , mais nous conviendrons d'utiliser 2 fois cette valeur pour le spin.

où  $\hat{N} = \hat{N}_\downarrow + \hat{N}_\uparrow$  est l'opérateur nombre total d'électrons et  $\mu$  est le potentiel chimique. Puisque  $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$ , il vient, avec  $|F\rangle$  le fondamental :

$$(\hat{H} - \mu\hat{N})|F\rangle = [E_0(N, S_z) - \mu N]|F\rangle \quad (N = N_\uparrow + N_\downarrow). \quad (1.11)$$

À température nulle,  $E_0(N, S_z) - \mu N$  est le grand potentiel thermodynamique  $\Omega(\mu)$  du système. Cette formulation est particulièrement utile dans le cas où le nombre de particules n'est pas fixé. Le potentiel chimique est alors le paramètre de contrôle du nombre moyen de particules.

À température nulle, le modèle de Hubbard est caractérisé par deux paramètres (hors la dimension spatiale  $D$ ) : le rapport  $U/t$  et le remplissage, *i.e.* le nombre moyen d'électrons par site  $n$  [13]. Pour  $U = 0$ , c'est le modèle des électrons indépendants dans l'approximation des liaisons fortes ; il donne la largeur de bande  $W = 2zt$ , où  $z$  est le nombre de coordination. En effet, le lien entre l'amplitude de saut  $t$  et la relation de dispersion  $\epsilon(\mathbf{k})$  des électrons de Bloch s'obtient en écrivant

$$c_{r\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k} \in ZB} c_\sigma(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.12)$$

et en définissant le vecteur reliant le site  $\mathbf{r}$  au plus proche voisin,  $\mathbf{e}$ , pour donner :

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -t \sum_{\mathbf{e}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}}, \quad (1.13)$$

d'où le résultat pour la largeur de bande. Le rapport  $U/W$  est souvent utilisé pour déterminer —toutefois sans rigueur— si le couplage électron-électron est fort ou faible : si  $U$  est passablement plus petit que  $W$ , le couplage est dit faible ; dans le cas contraire, le couplage est fort.

L'absence de commutation des termes cinétique et potentiel signifie qu'ils ne sont pas simultanément diagonalisables ;  $\hat{T}$  est diagonal lorsqu'exprimé dans la base des fonctions de Bloch alors que  $\hat{U}$ , l'énergie potentielle, est diagonalisable par la base de Wannier. L'utilisation de l'*ansatz* de Bethe permet d'obtenir l'état fondamental du système en dimension un [14]. Il vient que celui-ci est un isolant pour tout  $U > 0$ .

### 1.1.1 Symétries du modèle de Hubbard

Cette section porte sur les transformations de l'hamiltonien de Hubbard sous l'action d'un opérateur unitaire  $\hat{V}$ .

#### Transformation particule-trou bipartite sur les spins $\uparrow$ et $\downarrow$

La restriction aux premiers voisins des sauts électroniques implique que le réseau est bipartite, c'est-à-dire que le réseau original peut être divisé en deux sous-réseaux  $A$  et  $B$ , tels que seuls les sauts d'un site  $A$  vers l'un des sites voisins  $B$  sont permis. Ce faisant, on définit la transformation suivante :

$$c_{\mathbf{r}\sigma} \rightarrow \eta_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \quad c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \rightarrow \eta_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}\sigma} \quad (1.14)$$

$$\eta_{\mathbf{r}} = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in A \\ -1 & \text{si } \mathbf{r} \in B \end{cases} \quad (1.15)$$

Il s'agit d'une transformation particule-trou modifiée. L'hamiltonien transformé s'écrit ainsi, sachant que  $\hat{n}_{\mathbf{r}\sigma}$  devient  $1 - \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma}$  :

$$\hat{H}' = \hat{V} \hat{H} \hat{V}^{\dagger} = \hat{H} + U(N_s - \hat{N}), \quad (1.16)$$

avec  $\hat{V}$  la transformation unitaire donnant la transformation ci-dessus. Également, pour les opérateurs nombre total et spin total dans la direction  $z$ , il vient :

$$\hat{N}' = \hat{V} \hat{N} \hat{V}^{\dagger} = 2N_s - \hat{N} \quad (1.17)$$

$$\hat{S}'_z = \hat{V} \hat{S}_z \hat{V}^{\dagger} = \hat{N}_{\downarrow} - \hat{N}_{\uparrow} = -\hat{S}_z \quad (1.18)$$

Si on note  $|N, S_z\rangle$  le fondamental à  $N$  électrons de spin  $S_z = N_{\uparrow} - N_{\downarrow}$ , et  $E_0(N, S_z)$  l'énergie associée, il vient d'une part :

$$\left[ \hat{H} + U(N_s - \hat{N}) \right] \hat{V} |N, S_z\rangle = E_0(N, S_z) \hat{V} |N, S_z\rangle \quad (1.19)$$

et d'autre part :

$$\left[ 2N_s - \hat{N} \right] \hat{V} |N, S_z\rangle = N \hat{V} |N, S_z\rangle, \quad (1.20)$$

il résulte que : (1) il y a  $2N_s - N$  électrons dans l'état  $\hat{V} |N, S_z\rangle$  et (2)  $\hat{V} |N, S_z\rangle$  est un état propre de  $\hat{H}$  avec la valeur propre  $E_0(N, S_z) + U(N_s - N)$ .

Pour sa part, l'hamiltonien grand canonique transformé est donné par :

$$\hat{K}' = \hat{H} + (U - 2\mu)N_s - (U - \mu)\hat{N}. \quad (1.21)$$

Montrons que  $\mu = U/2$  implique que le système est demi-rempli. Si  $\mu = U/2$ , alors  $\hat{K}$  est invariant et les états  $|N, S_z\rangle$  et  $\hat{V}|N, S_z\rangle$  sont identiques à un facteur de phase près. Les valeurs moyennes calculées à l'aide de ces états doivent donc être égales. Puisqu'il y a  $2N_s - N$  électrons dans l'état  $\hat{V}|N_s, S_z\rangle$ , on doit avoir  $2N_s - N = N$ , d'où  $N = N_s$ .

Puisque la transformation  $\hat{V}$  est involutive ( $\hat{V}\hat{H}'\hat{V}^\dagger$  redonne  $\hat{H}$ ), le fondamental à  $N$  électrons devient univoquement le fondamental à  $2N_s - N$  électrons,  $|2N_s - N, S'_z = -S_z\rangle$ , sous la transformation (1.14). Il résulte que l'énergie du fondamental à  $N$  électrons est liée à l'énergie du fondamental à  $2N_s - N$  électrons de la façon suivante [15] :

$$E_0(N, S_z) = E_0(2N_s - N, -S_z) - U(N_s - N) \quad (1.22)$$

ou bien, en fonction du nombre d'électrons par site,  $n$  :

$$e_0(n, s_z) = e_0(2 - n, -s_z) - U(1 - n). \quad (1.23)$$

Cela signifie que le diagramme de phase du fondamental du modèle de Hubbard est symétrique par rapport à  $n = 1$  (demi-remplissage), en admettant que les transitions de phase soient déterminées par les dérivées de l'énergie libre (à  $T = 0$ , c'est l'énergie du fondamental).

### Transformation particule-trou bipartite sur les spins $\downarrow$ uniquement

La transformation (1.14) faite uniquement sur les opérateurs d'échelle des électrons de spin  $\downarrow$  entraîne :

$$\hat{H}' = \hat{T} + U\hat{N}_\uparrow - U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} \quad (1.24)$$

$$\hat{N}' = \hat{S}_z + N_s \quad (1.25)$$

$$\hat{K}' = \hat{T} - U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} + U\hat{N}_\uparrow - \mu(\hat{N}_\uparrow - \hat{N}_\downarrow + N_s). \quad (1.26)$$

Ajoutons à ces expressions celle du spin  $S_z$  du système :

$$\hat{S}'_z = \hat{V} \hat{S}_z \hat{V}^\dagger = \hat{N} - N_s. \quad (1.27)$$

Pour  $\mu = U/2$ ,  $\hat{K}'$  s'écrit :

$$\hat{K}' = \hat{T} - U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} + \mu \hat{N} - \mu N_s. \quad (1.28)$$

En notant encore  $|N, S_z\rangle$  le fondamental à  $N$  électrons de l'hamiltonien original, nous arrivons aux conclusions suivantes :

1. Puisque  $\hat{N}' \hat{V} |N, S_z\rangle = N \hat{V} |N, S_z\rangle$ ,

$$\hat{S}_z \hat{V} |N, S_z\rangle = (N - N_s) \hat{V} |N, S_z\rangle \quad (1.29)$$

et l'état propre transformé a donc un spin égal au nombre d'électrons de l'état original, à une constante près. En particulier, à demi rempli, l'état  $|N, S_z\rangle$  se transforme en un état de spin nul.

2. Étant donné que  $\hat{S}'_z \hat{V} |N, S_z\rangle = S_z \hat{V} |N, S_z\rangle$ ,

$$\hat{N} \hat{V} |N, S_z\rangle = (S_z + N_s) \hat{V} |N, S_z\rangle \quad (1.30)$$

et l'état propre transformé a donc un nombre d'électrons égal à l'aimantation de l'état original, à une constante près.

Il s'ensuit que si nous étudions un modèle avec  $2\mu = U < 0$  — ce qui garantit le demi-remplissage d'après la section précédente —, cela équivaut à raisonner sur un modèle de Hubbard avec  $2\mu = U > 0$ . Le spin total selon  $z$  du premier donne le nombre d'électrons du second et inversement, à des constantes près. Il sera vu plus loin qu'une interaction effective attractive par l'entremise des phonons est possible.

### 1.1.2 Cas limites

#### Limite de bande : $U = 0$

Au début de la section (1.1), il a été montré que la relation de dispersion à  $U = 0$  donne  $\epsilon(\mathbf{k}) = -t \sum_{\mathbf{e}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}}$ , ce qui implique pour des réseaux carrés en 1D et en 2D :

$$1\text{D} : \epsilon(k) = -2t \cos(k) \quad (1.31)$$

$$2\text{D} : \epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)). \quad (1.32)$$

La bande ainsi définie peut accueillir entre 0 et  $2N_s$  électrons et l'occupation est indépendante de l'orientation du spin des électrons. Généralement (*i.e.* dans l'optique que le nombre d'électrons puisse ne pas être conservé), c'est le potentiel chimique  $\mu$  qui détermine le remplissage. Les électrons étant indépendants, le fondamental dans l'ensemble canonique est obtenu en remplissant la bande avec les  $N$  électrons :

$$|N\rangle = \prod_{\mathbf{k},\sigma} c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k})|0\rangle. \quad (1.33)$$

#### Limite atomique : $t = 0$

Dans cette limite,  $\hat{H}$  est la somme de  $N_s$  hamiltoniens découplés :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}} H_{\mathbf{r}} = U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow}. \quad (1.34)$$

Il ne coûte rien en énergie de mettre un électron de spin quelconque sur le site  $\mathbf{r}$ , mais il en coûte  $U$  d'en mettre un second de spin opposé.

À  $n = 1$ , le fondamental est dégénéré  $2^{N_s}$  fois (dégénérescence due au spin). Pour  $n < 1$ , il faut tenir compte du choix de la configuration spatiale des électrons sur les sites, ce qui donne  $\binom{N_s}{N} 2^N$  états [16], où  $\binom{N_s}{N}$  est le coefficient du binôme.

Le potentiel chimique est une fonction escalier de la densité  $n$  (et inversement). Pour  $\mu < 0$ ,  $n = 0$  car  $U$  et  $-\mu$  ont le même signe. Pour  $0 < \mu < U$ , le système cherche à diminuer la double occupation tout en cherchant un nombre d'occupation maximal, d'où  $n = 1$ . Finalement, si  $\mu > U$ , la double occupation est privilégiée et  $n = 2$ .

### 1.1.3 Diagramme de phase du modèle de Hubbard autour du demi-remplissage

Il importe maintenant de se demander quelles sont les phases possibles du modèle de Hubbard lorsque  $U$  et  $t$  sont simultanément non nuls et positifs. Dans la suite de ce mémoire, seuls des systèmes demi-remplis seront considérés ; nous ne décrirons donc que les phases présentes à proximité de ce remplissage. Ci-dessous, on suppose la dimension supérieure à un afin que l'ordre antiferromagnétique puisse exister (*cf.* section (1.3)).

#### Transition de Mott-Hubbard

L'étude de cette transition métal-isolant est utile pour comprendre l'impact des corrélations sur l'organisation des électrons dans le système, en particulier l'occurrence des sous-bandes de Hubbard. La description simplifiée qui suit de cette transition est fortement basée sur [16].

Soit le système contenant  $N_s + 1$  électrons avec  $t = 0$ . Cet état est grandement dégénéré. On considère que  $N_s$  électrons sont de spin  $\downarrow$  (et, donc, placés dans le niveau d'énergie nulle) et le  $N_s + 1$ -ième électron est de spin  $\uparrow$  par défaut. Il y a  $N_s$  états de ce type, d'énergie  $U$ . Si, maintenant,  $t \neq 0$ , l'électron  $\uparrow$  a la possibilité de sauter d'un site à l'autre : il y a formation d'une bande de largeur  $W \sim 2zt$ .

Par le même type de raisonnement, pour le cas à  $N_s - 1$  électrons, il vient que nous avons une seconde bande centrée à 0. Cette bande origine du mouvement du trou à travers les niveaux d'énergie nulle. Les deux bandes sont séparées de  $U$  et chacune peut contenir  $N_s$  électrons. Le tout est illustré à la figure 1.1. Ces deux sous-bandes étant larges de  $W$  en énergie et ayant leurs centres séparés de  $U$ , il advient que pour un  $U$  critique  $U_c = W$ , celles-ci se juxtaposent. Pour  $U < U_c$ , la densité d'états au niveau de Fermi  $\rho(E_F)$  du système à demi rempli cesse d'être nulle et augmente au fur et à mesure que la bande supérieure pénètre dans la bande inférieure. On peut même s'imaginer que dans la limite où  $U \rightarrow 0$ , les deux se recouvrent et se complètent pour donner la bande métallique exposée à la section (1.1.2) et pouvant accueillir jusqu'à  $2N_s$  électrons. Donc, à demi rempli, pour  $U > U_c$ , le système est isolant et devient continûment métallique lorsque  $U$  est diminué sous  $U_c$ .<sup>3</sup>

<sup>3</sup>À noter cependant que pour les réseaux carrés, la transition s'effectue pour un  $U_c$  infinitésimal. La phase paramagnétique sévissant pour  $n \neq 1$  et  $U \sim t$  est instable par rapport à la formation d'une onde de densité de spin [16].



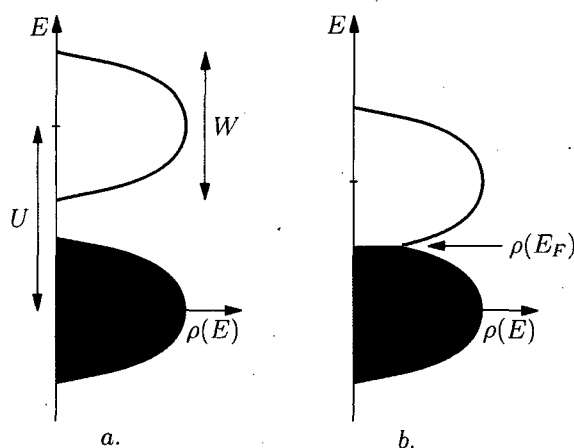


FIGURE 1.1 – Densité d'états en fonction de l'énergie pour les sous-bandes demi-remplies de Hubbard. Les centres des bandes sont séparés de  $U$  et la largeur des bandes est  $W \sim 2zt$ ; a.  $U > U_c$ , b.  $U < U_c$ . Figure adaptée de [16].

Nous tenons à souligner de nouveau que cette discussion de la transition de Mott-Hubbard est hautement simpliste. Une vision plus actuelle de celle-ci est donnée dans [17] pour la dimension infinie et dans [18–20] en deux dimensions.

### Modèle $t - J$ et modèle d'Heisenberg

Pour  $n < 1$  et  $U/t \gg 1$ , le modèle de Hubbard se simplifie pour donner le modèle dit  $t - J$ , lequel agit dans le sous-espace des états exempts de double occupations [21] :

$$\hat{H}_{t-J} = J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}'} - t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \sigma} (d_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{r}'\sigma} + c.h.). \quad (1.35)$$

Dans cette expression,  $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} = \frac{1}{2} c_{\mathbf{r}\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{\mathbf{r}\beta}$  avec  $\boldsymbol{\sigma}$  le vecteur des matrices de Pauli,  $d_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger$  est un opérateur qui crée un trou au site  $\mathbf{r}$  et  $J = \frac{4t^2}{U}$  est la constante de super-échange. Forcément, cette constante étant positive, le système a une nette tendance vers l'antiferromagnétisme. Si  $n \rightarrow 1$ , les sauts des trous sont prohibés et c'est le modèle d'Heisenberg antiferromagnétique qui surgit :

$$\hat{H}_{\text{Heisenberg}} = J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}'}. \quad (1.36)$$

## 1.2 Phonons et modèle de Holstein-Hubbard

Le modèle de Hubbard considère des sites fixés à leur position d'équilibre. Si on imagine que sur ces sites réside une maille élémentaire de composition quelconque, deux types de phonons sont possibles : ceux provenant des vibrations des degrés de liberté internes des mailles (phonons intramoléculaires) et ceux issus des variations relatives des centres de masse des mailles, supposés être à la position des sites (phonons intermoléculaires). Les deux types de phonons ne sont certes pas mutuellement exclusifs. Seuls les phonons intramoléculaires seront étudiés dans ce mémoire. On donne aussi à ces phonons le qualificatif d'optiques, puisqu'il s'agit de la vibration relative des atomes à l'intérieur d'une maille (les phonons intermoléculaires sont dits acoustiques). L'absence d'interaction entre les mailles implique que les phonons sont non dispersifs (modèle d'Einstein), avec une fréquence caractéristique  $\omega_D$ , appelée par abus de langage fréquence de Debye. Suivant Holstein [8], un seul degré de liberté interne par maille est considéré et les vibrations sont supposées harmoniques. Le degré de liberté interne sera appelé oscillateur dans ce qui suit.

Pour ce qui est de l'interaction électron-phonon, nous adoptons le modèle de Holstein [8], dans lequel l'oscillateur  $\mathbf{r}$  est couplé localement à l'opérateur nombre total d'électrons en ce même site. Cette interaction s'écrit de la façon suivante, avec la constante de couplage  $\lambda'$  :

$$\hat{H}_{\text{eph}} = -\lambda' \sum_{\mathbf{r}} Q_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}, \quad (1.37)$$

D'après la théorie des oscillateurs harmoniques [12],

$$Q_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{2M\omega_D}} (a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger}),$$

où  $a_{\mathbf{r}}$  annihile un phonon au site  $\mathbf{r}$ ,  $M$  est la masse de l'oscillateur et  $\hbar = 1$ . Cela nous donne l'hamiltonien de Holstein-Hubbard suivant

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}'\sigma} + c.h.) + U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} - g \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger}) \hat{n}_{\mathbf{r}} + \omega_D \sum_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}}, \quad (1.38)$$

où

$$g \equiv \frac{\lambda'}{\sqrt{2M\omega_D}},$$

et l'énergie de point zéro par site,  $\omega_D/2$ , a été supprimée, car l'énergie totale est définie

à une constante additive près.

### 1.2.1 Approximation unimodale

En prenant la transformée de Fourier de  $a_{\mathbf{r}}$ ,  $a_{\mathbf{q}} = (1/\sqrt{N_s}) \sum_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ , il vient pour les termes comprenant des opérateurs de phonons :

$$-\frac{g}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^\dagger) \hat{n}_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \omega_D \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}}. \quad (1.39)$$

Un seul mode sera conservé dans les sommes sur  $\mathbf{q}$  figurant à l'équation précédente. Il y a des raisons numériques et physiques à ce choix. Le nombre de phonons de chaque mode ou en chaque site étant illimité, l'espace des états phononique est infini. D'un point de vue numérique, cela cause un problème, car les représentations matricielles des opérateurs se doivent d'être de dimension finie. L'espace de Hilbert des phonons doit donc être tronqué, c'est-à-dire qu'il faut se définir un nombre maximal de phonons par site ou par mode. Soit  $n_s^{\max}$  le nombre maximal de phonons par site, en supposant que ce nombre est le même pour tout site. L'espace de Hilbert des phonons est alors de dimension  $(n_s^{\max} + 1)^{N_s}$ . Cette dimension augmente rapidement en fonction de  $n_s^{\max}$ , car  $N_s$  est supposé grand. Or, pour traiter un certain nombre de transitions de phase liées à l'interaction électron-phonon, notamment la transition de Peierls, c'est un mode donné qui se peuple macroscopiquement pour former un état cohérent. Il faut donc avoir la possibilité d'ajouter un nombre important de phonons dans ce mode pour les décrire, d'où la restriction à un mode.

Pour les raisons exposées aux sections 1.3.1 et 2.2.2, seuls les modes  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  et  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$  seront étudiés dans ce mémoire. Pour ceux-ci  $(a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^\dagger) \rightarrow (a_{\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^\dagger)$ . En effet, en revenant à la somme sur les modes pour le couplage,

$$\sum_{\mathbf{r}, \mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^\dagger) \hat{n}_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + a_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \hat{n}_{\mathbf{r}}. \quad (1.40)$$

Puisque

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{q} = \mathbf{0} \\ \pi \sum_{i=1}^D x_i & \text{si } \mathbf{q} = \boldsymbol{\pi} \end{cases}, \quad (1.41)$$

où  $x_i \in \mathbb{Z}$  est une composante en  $D$  dimensions du vecteur du réseau  $\mathbf{r}$ , il résulte que

$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$  pour  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  ou  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$ , d'où le résultat quand on se restreint à un mode.<sup>4</sup> Au final, nous avons donc l'hamiltonien suivant à étudier :

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{r}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}', \sigma} + c.h.) + U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} + \omega_D a^\dagger a - \frac{g}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{r}} (a + a^\dagger) \hat{n}_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.42)$$

avec la notation  $a_{\mathbf{q}} \rightarrow a$ .

### Non-localité de l'interaction

L'interaction de Holstein est locale : un électron au site  $\mathbf{r}$  n'influence que ce site et réciproquement. Cependant, il apparaît que la restriction à un mode de phonons a pour effet de délocaliser l'interaction. Pour le constater, il suffit de prendre la transformée de Fourier inverse des opérateurs d'échelle bosoniques dans  $\hat{H}_{\text{eph}}$  :

$$\hat{H}_{\text{eph}} = -\frac{g}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{r}} (a + a^\dagger) \hat{n}_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = -\frac{g}{N_s} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} (a_{\mathbf{r}'} + a_{\mathbf{r}'}^\dagger) \hat{n}_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}. \quad (1.43)$$

Cela signifie qu'un électron en  $\mathbf{r}$  est potentiellement couplé à tous les sites du réseau par l'entremise des phonons. Ce faisant, nous nous éloignons de l'hamiltonien de Holstein-Hubbard original. Ce n'est pas si grave compte tenu de l'objectif du travail rapporté dans ce mémoire, qui est d'inclure les degrés de liberté des phonons dans la VCA.

## 1.2.2 Transformations de l'hamiltonien de Holstein-Hubbard

### Transformation particule-trou

Sous la transformation particule-trou (1.14), le terme de couplage électron-phonon devient :

$$-\frac{g}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{r}\sigma} (a + a^\dagger) (1 - \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (1.44)$$

Puisque  $\sum_{\mathbf{r}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 2N_s \delta_{\mathbf{q}}$  (cf. annexe A.5) :

$$-\frac{g}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{r}\sigma} (a + a^\dagger) (1 - \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = -\frac{g}{\sqrt{N_s}} (a + a^\dagger) \left[ 2N_s \delta_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{r}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (1.45)$$

<sup>4</sup>En prenant la transformée de Fourier des opérateurs électroniques, on trouve un terme proportionnel à  $\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} (a_{\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^\dagger) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$ . L'apparente absence de conservation de l'impulsion se justifie en se rappelant que celle-ci n'est conservée que modulo un vecteur du réseau réciproque.

Visiblement, si  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$ , il suffit d'opérer la transformation  $a \rightarrow -a$  ( $a^\dagger \rightarrow -a^\dagger$ ) pour que l'hamiltonien de Holstein-Hubbard grand canonique avec  $\mu = U/2$  soit invariant sous la transformation composée  $\hat{V} = \hat{V}_e \otimes \hat{V}_{\text{ph}}$ . ( $\hat{V}_e$  est la transformation (1.14) alors que  $\hat{V}_{\text{ph}}$  est telle que  $\hat{V}_{\text{ph}} a^{(\dagger)} \hat{V}_{\text{ph}}^\dagger = -a^{(\dagger)}$ .) Puisque  $\hat{H}_{\text{eph}}$  commute avec l'opérateur nombre d'électrons, le fondamental contient un nombre bien défini d'électrons. L'hamiltonien de Holstein-Hubbard étant donc invariant sous  $\hat{V}$ , un raisonnement similaire à celui de la section 1.1.1 permet de conclure que pour  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$ ,  $U = 2\mu$  implique que le système est à demi rempli. Ce fait ne tient évident pas pour  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ .

### Transformation à faible couplage

Cette sous-section et la suivante présentent des transformations unitaires permettant l'élimination de l'interaction électron-phonon à la faveur d'une interaction électron-électron effective. Pour garder la discussion générale, nous considérons l'hamiltonien de Holstein multimodal (cf. 1.38 avec  $U = 0$ ). Prenant la transformée de Fourier, il vient :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \omega_D \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} - \frac{g}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} (a_{-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (1.46)$$

où  $\hat{H}_0$  est l'hamiltonien sans interaction. L'interaction électron-phonon peut être évitée en transformant  $\hat{H}$  via [22] :

$$\hat{H}_{\hat{s}} = e^{-\hat{s}} \hat{H} e^{\hat{s}} \quad (1.47)$$

$$= \hat{H}_0 + (\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{s}]) + \frac{1}{2} [(\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{s}]), \hat{s}] + \frac{1}{2} [\hat{H}_1, \hat{s}] + \dots, \quad (1.48)$$

où

$$\hat{s} = -\frac{g}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} (\alpha a_{-\mathbf{q}}^\dagger + \beta a_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

Les variables  $\alpha$  et  $\beta$  sont déterminées par la condition  $\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{s}] = 0$ . Il vient [22] :

$$\alpha^{-1} = \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \omega_D \quad (1.49)$$

$$\beta^{-1} = \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \omega_D. \quad (1.50)$$

L'hamiltonien résultant est [22] :

$$\hat{H}_s \approx \hat{H}_0 + \frac{1}{2}[\hat{H}_1, \hat{s}] \quad (1.51)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (1.52)$$

si les termes d'ordre supérieur à  $(\hat{H}_1)^2$  sont négligés et si tous les processus impliquant les phonons sont omis. Cette transformation est donc valable dans les limites  $g^2/N_s$  petit et  $\omega_D$  grand, car alors le nombre de phonons est petit. Le coefficient  $V_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$  est

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = \frac{2g^2\omega_D}{[\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k})]^2 - \omega_D^2} \quad (1.53)$$

Il est positif pour  $|\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k})| > \omega_D$  et négatif lorsque  $|\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k})| < \omega_D$ . Nous avons ainsi un hamiltonien effectif ne faisant intervenir que les électrons. En vertu des relations d'anticommutation des  $c_{\mathbf{k}\sigma}$ , on doit avoir  $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$  et  $\mathbf{k} + \mathbf{q} \neq \mathbf{k}' - \mathbf{q}$  dans le terme d'interaction. L'état fondamental de  $\hat{H}_0$  est la mer de Fermi. Si le terme d'interaction électron-électron est vu comme une perturbation, son rôle est de faire passer des électrons occupant cette mer de Fermi à des états d'énergie supérieure à  $\epsilon_F$ .

La restriction à un mode de phonons est simple : il suffit de supprimer la somme sur  $\mathbf{q}$  dans l'expression pour l'hamiltonien effectif (1.52). Les cas particuliers  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  et  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$  donnent :

$$\mathbf{q} = \mathbf{0}: \quad V_{\mathbf{k}\mathbf{0}} = -\frac{2g^2}{\omega_D} \quad \text{et} \quad \mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}: \quad V_{\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}} = \frac{2g^2\omega_D}{4[\epsilon(\mathbf{k})]^2 - \omega_D^2}, \quad (1.54)$$

où il a été fait usage de la propriété  $\epsilon(\mathbf{k} + \boldsymbol{\pi}) = -\epsilon(\mathbf{k})$ . Dans la limite où  $\omega_D$  est grand par rapport à l'énergie de saut des électrons, le potentiel effectif est attractif et vaut  $-2g^2/\omega_D$  pour tous les modes.

Ramenons maintenant le terme de Hubbard. Le réécrivant de la façon suivante

$$U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} = (U/2) \sum_{\mathbf{r}, \sigma, \sigma'} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma'} - (U/2) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}, \quad (1.55)$$

il résulte que l'hamiltonien de Holstein-Hubbard effectif peut s'écrire :

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}} \left( \epsilon(\mathbf{k}) - \frac{U}{2} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}', \sigma, \sigma'} (U + V_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \left( \epsilon(\mathbf{k}) - \frac{U}{2} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}', \sigma, \sigma'} \left( U + \right. \\
&\quad \left. \frac{2g^2\omega_D}{[\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}') - \epsilon(\mathbf{k})]^2 - \omega_D^2} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma},
\end{aligned} \tag{1.56}$$

où  $-U/2$  dans le premier terme peut être compris dans le potentiel chimique et  $\mathbf{q}$  correspond au mode choisi.

### Transformation de Lang-Firsov

Cette transformation est valable lorsque le couplage électron-phonon est fort. Elle est donnée par [23] :

$$\hat{H}_{\hat{s}} = e^{-\hat{s}} \hat{H} e^{\hat{s}} \tag{1.57}$$

avec

$$\hat{s} = \frac{g}{\omega_D} \sum_{\mathbf{r}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma} (a_{\mathbf{r}} - a_{\mathbf{r}}^\dagger). \tag{1.58}$$

Appliquant cette transformation à l'hamiltonien de Holstein-Hubbard multimodal, il vient [23] :

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\hat{s}} &= -\frac{g^2}{\omega_D} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma} - t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \sigma} e^{\hat{\xi}_{\mathbf{r}} - \hat{\xi}_{\mathbf{r}'}} (c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma} + c.h.) \\
&\quad + \left( U - \frac{2g^2}{\omega_D} \right) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} + \omega_D \sum_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}},
\end{aligned} \tag{1.59}$$

où  $\hat{\xi}_{\mathbf{r}} \equiv (g/\omega_D)(a_{\mathbf{r}}^\dagger - a_{\mathbf{r}})$ . En prenant la moyenne de cet hamiltonien dans le vide des phonons, il résulte l'hamiltonien effectif électronique

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\text{eff}} &= \langle 0_{\text{ph}} | \hat{H}_{\hat{s}} | 0_{\text{ph}} \rangle \\
&= -\frac{g^2}{\omega_D} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma} - t_{\text{eff}} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \sigma} (c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma} + c.h.) + U_{\text{eff}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow}
\end{aligned} \tag{1.60}$$

où l'amplitude de saut et le potentiel effectifs sont donnés par

$$U_{\text{eff}} = U - \frac{2g^2}{\omega_D} \quad (1.61)$$

$$t_{\text{eff}} = t \exp\left(-\frac{g^2}{\omega_D^2}\right). \quad (1.62)$$

Le fait de prendre la moyenne dans le vide des phonons implique que cet hamiltonien effectif n'est une bonne approximation que lorsque la fréquence de Debye est grande, comme pour la sous-section précédente. Un résultat similaire est obtenu pour le couplage intermédiaire [23]. L'opérateur  $\hat{s}$  de la transformation est alors donné par

$$\hat{s} = \eta \frac{g}{\omega_D} \sum_{\mathbf{r}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{r}\sigma} (a_{\mathbf{r}} - a_{\mathbf{r}}^\dagger)$$

où  $\eta \lesssim 1$  donne une mesure de la déformation du réseau ; la limite fort couplage est  $\eta = 1$ . On obtient

$$U_{\text{eff}} = U - \frac{2g^2}{\omega_D} \eta(2 - \eta) \quad (1.63)$$

$$t_{\text{eff}} = t \exp\left(-\frac{g^2}{\omega_D^2} \eta^2\right). \quad (1.64)$$

Il ressort des deux transformations précédentes les faits suivants :

1. Dans la limite anti-adiabatique ( $\omega_D$  grand), il est possible de récrire le modèle de Holstein-Hubbard sous la forme d'un hamiltonien effectif faisant intervenir une interaction locale effective électronique

$$U_{\text{eff}} = U - \frac{2g^2}{\omega_D}; \quad (1.65)$$

2. La quantité  $2g^2/\omega_D$  semble constituer une échelle d'énergie adéquate pour décrire le couplage électron-phonon dans cette même limite ;
3. Toujours dans la limite anti-adiabatique, si  $U = 2g^2/\omega_D$ ,  $U_{\text{eff}} = 0$  et l'interaction électron-électron est supprimée. Pour  $\omega_D$  un peu plus petit, on peut aussi imaginer que ce raisonnement est à peu près valable et que l'interaction électron-électron sera atténuée.



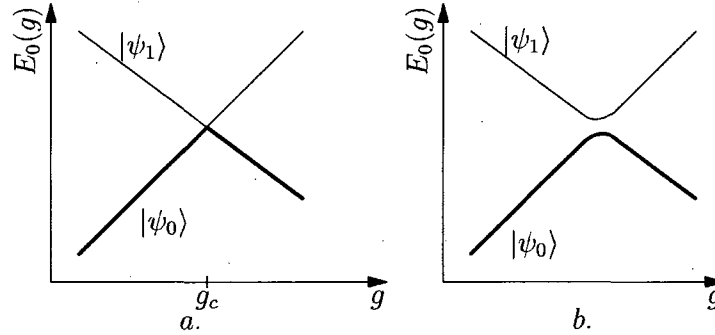


FIGURE 1.2 – Énergie du fondamental en fonction du paramètre sans dimension  $g$  pour un système de taille finie. Sur les deux figures, l'énergie du fondamental est donnée par la courbe plus épaisse. Dans le cas de la figure a, il y a croisement de niveau, alors qu'il y a évitement pour b. Dans la limite thermodynamique, la courbe inférieure de la figure b peut présenter un point non analytique. Adaptée de [24].

### 1.3 Symétries brisées

Les ondes de densité de charge dans un système unidimensionnel et la supraconductivité de type  $s$  dans un réseau bidimensionnel seront étudiées dans ce mémoire. Il s'agit d'états à symétrie brisée. La présente section vise à clarifier ce concept.

Considérons un hamiltonien  $\hat{H}(g)$ , dépendant d'un paramètre sans dimension  $g$ , décrivant un système de taille finie. Si  $\hat{H}$  peut s'écrire comme  $\hat{H}_0 + g\hat{H}_1$ , où  $[\hat{H}_0, \hat{H}_1] = 0$ , alors les états propres de  $\hat{H}$  sont indépendants de  $g$ , car  $\hat{H}_0$  et  $\hat{H}_1$  sont diagonalisables par le même ensemble de fonctions. L'énergie du fondamental,  $E_0(g)$ , quant à elle, dépend paramétriquement de  $g$ . Il n'est alors pas impossible que pour une valeur donnée  $g = g_c$ , il y ait changement de fondamental, c'est-à-dire un croisement de niveau [24]. Ce phénomène est illustré à la figure 1.2 a. L'énergie du fondamental du système devient non analytique à  $g = g_c$ . Il est alors possible que certaines propriétés du fondamental pour  $g > g_c$  soient différentes de celles du fondamental à  $g < g_c$ .

Pour un système fini, le fondamental appartient à l'une des représentations irréductibles du groupe de symétrie de  $\hat{H}$ . Donc, en se basant sur le fait que les états propres associés à deux valeurs propres distinctes sont orthogonaux, il apparaît que dans le cas exposé au paragraphe précédent un changement de représentation est survenu. L'un et l'autre des fondamentaux possèdent toutes les symétries de l'hamiltonien.

Dans la limite thermodynamique, c'est-à-dire quand le nombre de particules et le vo-

lume tendent vers l'infini pour une densité fixe, des brisures de symétrie peuvent survenir. Dans ce cas, l'énergie libre du système devient, comme précédemment, non analytique, mais pour une raison différente. Considérons la figure 1.2 b, où l'énergie du premier état excité d'un système fini s'approche de celle du fondamental, mais sans la croiser. Il est alors possible que dans la limite thermodynamique, le comportement de  $E_0(g)$  devienne non analytique en un point donné (sur la figure 1.2 b, ce point devrait être dans la région où la courbe inférieure change de direction). Là où la situation est différente du cas susmentionné est qu'il peut arriver que l'état du système ne soit pas invariant sous toutes les opérations de symétrie sous lesquelles  $\hat{H}$  est invariant pour  $g < g_c$  ou  $g > g_c$ . Par exemple, l'état pour  $g < g_c$  peut être plus symétrique que l'état pour  $g > g_c$ . Un tel état à symétrie brisée a ceci de spécial que certaines valeurs moyennes, nulles dans l'état symétrique, sont dorénavant non nulles ; on appelle ces valeurs moyennes non nulles paramètres d'ordre et la brisure de symétrie sous-jacente est dite spontanée. Généralement, toute valeur du paramètre  $g$  où l'énergie du fondamental d'un système infini devient non analytique constitue une transition de phase quantique, que cette non analyticité soit issue d'un croisement de niveau ou d'un évitement [24].

Si les interactions ne sont pas à grande portée, comme c'est le cas avec le modèle de Holstein-Hubbard (1.38), alors le théorème de Mermin-Wagner contraint les brisures de symétries continues (par exemple, une symétrie par rotation dans l'espace des spins) pour certains types de systèmes. Il est impossible pour un système 1D de s'ordonner en brisant une symétrie continue, car les fluctuations quantiques sont trop grandes. Un système 2D le peut, par contre, comme en témoigne l'existence d'ordre antiferromagnétique dans le modèle de Hubbard 2D, mais à  $T = 0$  seulement.

### 1.3.1 Onde de densité de charge

Une onde de densité de charge (ODC) consiste en une redistribution périodique de la charge dans un matériau, accompagnée par une modification de la structure de bandes de celui-ci. Elle est habituellement accompagnée d'une distorsion du réseau sous-jacent. Ce faisant, la symétrie de translation du réseau est brisée. Cet état apparaît le plus souvent dans les matériaux à symétrie réduite, tels les solides quasi-bidimensionnels et quasi-unidimensionnels [25].

L'exemple le plus simple d'une telle reconfiguration spatiale de la charge est illustré à la figure 1.3, où les électrons sont indépendants. En haut de la partie (a), le réseau

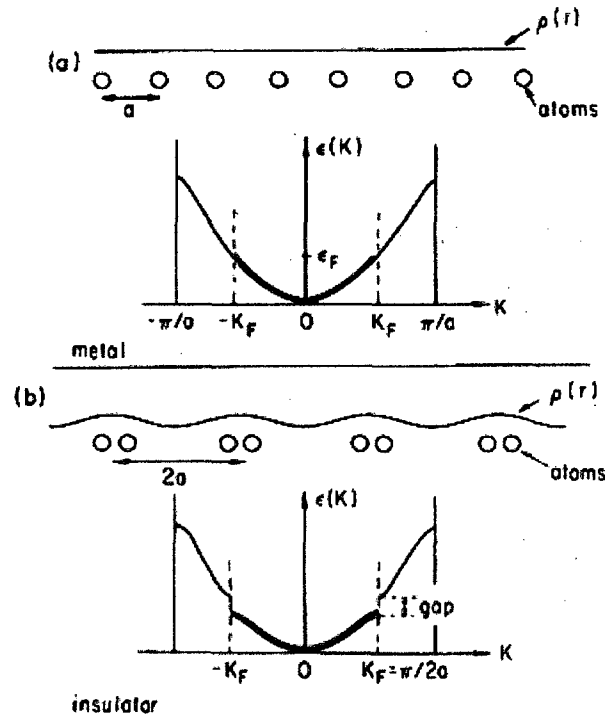


FIGURE 1.3 – Distortion de Peierls pour un système demi-rempli au zéro absolu : a) Métal ; b) Isolant de Peierls. Figure tirée de [26]

est statique et il n'interagit pas avec les électrons. À demi rempli, la bande est occupée jusqu'au vecteur d'onde de Fermi  $k_F = \pi/2a$ . La densité de charge est alors uniforme, puisque les états électroniques sont des ondes planes. Si les électrons interagissent avec le réseau statique, il y a ouverture d'un gap en  $k = \pi/a$  et la densité électronique a la périodicité du réseau.

D'après la théorie des bandes des solides, si la taille de la maille élémentaire est doublée, il y a ouverture d'un gap à  $\pm\pi/2a = \pm k_F$ ; cela fait du cristal unidimensionnel un isolant dit de Peierls, la bande de valence étant complètement remplie. Du fait de l'ouverture du gap, il advient que l'énergie électronique du système est diminuée. C'est évident sur la figure 1.3. Si l'énergie élastique nécessaire à la déformation est inférieure à la diminution d'énergie électronique, il apparaît que cette situation est privilégiée par rapport au cas métallique. Il naît alors une onde de densité de charge de longueur d'onde

$$\lambda = \pi/k_F = 2a.$$

### Réponse linéaire : Instabilité à $2k_F$ d'un gaz électronique

La formation d'une onde de densité de charge est liée à l'instabilité du gaz d'électrons face à un potentiel externe. Cette instabilité est accrue pour les systèmes à basse dimensionnalité. Soit  $\phi(\mathbf{x})$  un potentiel externe appliqué au gaz d'électrons. Si une composante de Fourier de ce potentiel est notée  $\phi(\mathbf{q})$ , alors la densité de charge électronique induite  $\delta\rho(\mathbf{q})$  est donnée, à température nulle, par :

$$\delta\rho(\mathbf{q}) = \chi(\mathbf{q})\phi(\mathbf{q}), \quad (1.66)$$

où  $\chi(\mathbf{q})$  est la fonction de réponse de Lindhard. En  $D$  dimensions, elle est donnée par [27] :

$$\chi(\mathbf{q}) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (1.67)$$

où  $f(\mathbf{k})$  est la fonction de Fermi donnée par  $f(\mathbf{k}) = \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k}))$  à  $T = 0$ . Pour  $\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = 0$ , le dénominateur s'annule, et cette divergence est d'autant plus grande lorsque le nombre d'états (lié au numérateur) est grand. Pour un système 1D, en particulier, il vient pour  $q \approx 2k_F$  ( $N(\epsilon_F)$  est la densité d'états au niveau de Fermi) :

$$\chi(q) \propto N(\epsilon_F) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|, \quad (1.68)$$

c'est-à-dire que la fonction de réponse diverge à  $q = 2k_F$ . Cela signifie que la composante  $\phi(2k_F)$  du potentiel externe produit une densité  $\delta\rho(2k_F)$  qui diverge. La redistribution de la charge électronique qui s'ensuit donne une onde de densité de charge de période  $2\pi/2k_F$ . Cette divergence dans la fonction de réponse est absente en 2D et en 3D.

### Ramollissement du mode $2k_F$

Pour mieux comprendre l'impact des phonons sur l'occurrence d'une onde de densité de charge, considérons l'hamiltonien de Holstein 1D, mais avec des phonons dispersifs ( $T \neq 0$  dans le développement qui suit et la constante de couplage  $g$  est indépendante de  $q$ ) :

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q - g \sqrt{\frac{2M\omega_q}{N_s}} \sum_{k,q,\sigma} c_{k+q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}^\dagger \hat{Q}_q. \quad (1.69)$$

La coordonnée normale  $\hat{Q}_q$  est donnée par :

$$\hat{Q}_q = \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}}(a_{-q}^\dagger + a_q).$$

Suivant [27], l'équation du mouvement de  $\hat{Q}_q$  est :

$$\frac{d^2\hat{Q}_q}{dt^2} = - \left[ [\hat{Q}_q, \hat{H}], \hat{H} \right] = -\omega_q^2 \hat{Q}_q + g\sqrt{\frac{2\omega_q}{MN_s}} \hat{\rho}(q), \quad (1.70)$$

où  $\hat{\rho}(q) = \sum_{k,\sigma} c_{k+q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  est la transformée de Fourier de l'opérateur densité électronique. Si maintenant on considère la valeur moyenne  $\langle \hat{Q}_q \rangle$ , la quantité

$$-g\sqrt{\frac{2M\omega_q}{N_s}} \langle \hat{Q}_q \rangle \quad (1.71)$$

peut être vue comme la transformée de Fourier d'un potentiel externe appliqué au gaz d'électrons. Alors, d'après (1.66), on peut écrire pour la moyenne de la transformée de Fourier de la densité électronique :

$$\langle \hat{\rho}(q) \rangle = -g\sqrt{\frac{2M\omega_q}{N_s}} \chi(q, T) \langle \hat{Q}_q \rangle. \quad (1.72)$$

Cela implique pour l'équation du mouvement de la moyenne de  $\hat{Q}_q$ ,  $\langle \hat{Q}_q \rangle$  :

$$\frac{d^2\langle \hat{Q}_q \rangle}{dt^2} = - \left[ \omega_q^2 - \frac{g^2}{N_s} 2\omega_q \chi(q, T) \right] \langle \hat{Q}_q \rangle. \quad (1.73)$$

L'évolution temporelle de la composante de Fourier du déplacement ionique est donc liée à une fréquence renormalisée :

$$\omega_{\text{ren},q}^2 = \omega_q^2 - \frac{g^2}{N_s} 2\omega_q \chi(q, T) \quad (1.74)$$

s'annulant pour  $q = 2k_F$  à la température de transition  $T_{\text{ODC}}$ . L'annulation de la fréquence renormalisée signifie que l'instabilité du système électronique unidimensionnel à  $2k_F$  entraîne un ramollissement de ce mode : le réseau est alors « gelé » à ce vecteur d'onde. Cette assertion — que le réseau est statique pour cette composante — est à la base du traitement champ moyen présenté à la prochaine sous-section.

**Application de la théorie du champ moyen à  $T = 0$** 

Soit maintenant le modèle de Holstein à demi rempli dans l'approximation unimodale. En vertu de la discussion de la sous-section précédente, nous choisissons  $q = \pi$  parmi les deux choix de mode donnés à la section 1.2.1 ; dans ce cas,  $q = 2k_F$ . La valeur moyenne non nulle caractéristique de l'état à symétrie brisée est  $\langle a + a^\dagger \rangle$ . Le réseau étant statique,  $\langle a \rangle = \langle a^\dagger \rangle$ , car l'impulsion  $\hat{P}_q$  est nulle. La simple existence de la valeur moyenne  $\langle a \rangle$  implique un état cohérent dû à l'occupation macroscopique du mode  $\pi$ . Remplaçant cette valeur moyenne dans l'hamiltonien de Holstein :

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \omega_D \langle a \rangle^2 - \frac{2g}{\sqrt{N_s}} \langle a \rangle \sum_{k,\sigma} c_{k+\pi\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (1.75)$$

celui-ci devient facilement diagonalisable. En effet, en utilisant la propriété d'emboîtement de la surface de Fermi en 1D,  $\epsilon(k) = -\epsilon(k + \pi)$ , il vient :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{|k| \leq k_F, \sigma} \epsilon(k) \left( c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - c_{k+\pi\sigma}^\dagger c_{k+\pi\sigma} \right) + \omega_D \langle a \rangle^2 - \frac{2g}{\sqrt{N_s}} \langle a \rangle \sum_{|k| \leq k_F, \sigma} \left( c_{k+\pi\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger c_{k+\pi\sigma} \right) \\ &= \sum_{k \leq k_F, \sigma} \begin{pmatrix} c_{k\sigma}^\dagger & c_{k+\pi\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon(k) & -\frac{2g}{\sqrt{N_s}} \langle a \rangle \\ -\frac{2g}{\sqrt{N_s}} \langle a \rangle & -\epsilon(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ c_{k+\pi\sigma} \end{pmatrix} + \omega_D \langle a \rangle^2 \end{aligned}$$

Diagonaliser la matrice  $2 \times 2$  est trivial. Il vient pour les valeurs propres de l'énergie :

$$E^\pm(k) = \pm \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta^2}, \quad (1.76)$$

où  $\Delta = 2g\langle a \rangle / \sqrt{N_s}$ . Il faudra bien entendu ajouter à cette énergie l'énergie élastique  $\omega_D \langle a \rangle^2$ . La figure 1.4 présente la forme du spectre électronique ; il existe un gap égal à  $2\Delta$  entre la bande inférieure et la bande supérieure. Cela fait du système un isolant à température nulle.

La valeur du gap  $\Delta$  est déterminée en minimisant l'énergie du système par rapport à ce dernier. En passant de la somme sur les vecteurs d'ondes à une intégrale sur l'énergie, il résulte :

$$E(\Delta) = -N(\epsilon_F) \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2} + \frac{\omega_D \Delta^2 N_s}{4g^2} \quad (1.77)$$

en faisant l'approximation que la densité d'états par spin est une constante sur tout le

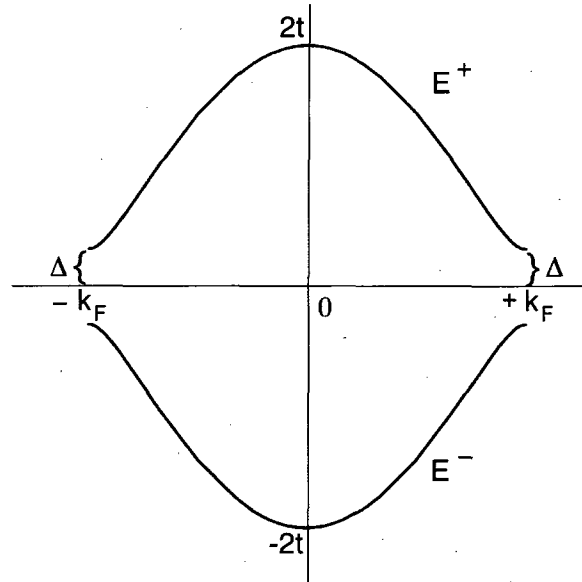


FIGURE 1.4 – Relation de dispersion électronique pour l'onde de densité de charge. Figure tirée de [28].

domaine des valeurs de l'énergie. Posant

$$\frac{\partial E(\Delta)}{\partial \Delta} = 0,$$

il vient pour le gap à l'équilibre [28] :

$$\Delta_0 = \frac{\epsilon_F}{\sinh(1/2V^2)} \quad (1.78)$$

avec

$$V^2 = \frac{N(\epsilon_F)g^2}{2M\omega_D^2 N_s}.$$

À faible couplage, c'est-à-dire pour  $V^2 \ll 1$  [28] :

$$\Delta_0 = 2\epsilon_F e^{-1/2V^2}. \quad (1.79)$$

Il apparaît donc que pour un couplage infinitésimal  $g$ , le gap est non nul, c'est-à-dire que

les électrons forment une onde de densité de charge, et le système est isolant.

### 1.3.2 Supraconductivité

L'un des phénomènes les plus ahurissants de toute la physique est celui de la supraconductivité. L'état supraconducteur est un état cohérent constitué de paires d'électrons, les paires de Cooper. Celles-ci ont l'étrange capacité de transporter le courant électrique sans résistance. Le phénomène de supraconductivité, découvert en 1911 par Kammerlingh Onnes, n'a reçu d'explication théorique complète que 46 ans plus tard, grâce au célèbre trio Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS). La supraconductivité décrite par la théorie BCS est celle des métaux, en particulier des métaux monoatomiques (Al, Hg, Ga, etc.).

La théorie BCS est basée sur le fait que « [...] l'interaction entre deux électrons résultant de l'échange virtuel de phonons est attractive quand la différence d'énergie entre les deux états électroniques impliqués est moindre que l'énergie phononique. » [29]. Donc, si l'attraction électron-électron due aux phonons réussit à surpasser en grandeur la répulsion coulombienne, il est possible que ceux-ci s'apparient pour former les paires de Cooper.

Se basant sur [22], on considère l'hamiltonien suivant, faisant intervenir les électrons, les phonons et leur interaction mutuelle :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} M_{\mathbf{q}} (a_{-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (1.80)$$

Le facteur  $M_{\mathbf{q}}$  couple les électrons à des phonons acoustiques longitudinaux et on fait l'hypothèse qu'il ne dépend pas de  $\mathbf{k}$  (approximation plausible si la fonction d'onde des électrons s'écarte peu d'une onde plane ; la relation de dispersion  $E(\mathbf{k})$  est alors donnée par  $E(\mathbf{k}) = \mathbf{k}^2/2m$ ). Par une démarche identique à celle de la sous-section 1.2.2, avec pour seules différences que  $M_{\mathbf{q}}$  remplace  $-g/\sqrt{N_s}$  et  $\omega_{\mathbf{q}}$  remplace  $\omega_D$ , nous obtenons un potentiel effectif entre les électrons. Explicitement,  $V_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$  est alors :

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} = \frac{2|M_{\mathbf{q}}|^2 \omega_{\mathbf{q}} N_s}{[E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k})]^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} \quad (1.81)$$

et il est négatif lorsque  $|E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k})| < \omega_{\mathbf{q}}$ .

Cooper [30] a simplifié l'hamiltonien effectif en observant que l'interaction attractive



entre deux électrons « au-dessus » d'une mer de Fermi sera maximale si ces électrons ont des impulsions et des spins opposés, et si leurs énergies respectives sont situées dans l'intervalle  $[E_F - \omega_{\mathbf{q}}, E_F + \omega_{\mathbf{q}}]$ . Pour simplifier davantage, il remplace  $\omega_{\mathbf{q}}$  par la fréquence de Debye  $\omega_D$  des phonons acoustiques, et prend pour  $V_{\mathbf{kq}}$  :

$$V_{\mathbf{kq}} = \begin{cases} -VN_s & \text{si } |E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k})| < \omega_D \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.82)$$

Avec ces spécifications, on obtient l'hamiltonien réduit BCS :

$$\hat{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{kq}\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}-\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}-\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (1.83)$$

où la seconde somme est restreinte aux vecteurs d'onde remplissant la condition  $|E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E(\mathbf{k})| < \omega_D$ . Pour résoudre cet hamiltonien, BCS ont considéré un état variationnel qui consiste en un assemblage cohérent de paires de Cooper :

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (1.84)$$

Pour assurer  $|\langle \text{BCS} | \text{BCS} \rangle|^2 = 1$ , il faut  $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ , où  $u_{\mathbf{k}}$  et  $v_{\mathbf{k}}$  sont choisis réels. Les valeurs de  $u_{\mathbf{k}}$  et  $v_{\mathbf{k}}$  sont déterminées en minimisant le grand potentiel  $\langle \text{BCS} | \hat{H}_{\text{BCS}} - \mu \hat{N} | \text{BCS} \rangle$ . Fixer le nombre moyen de particules est nécessaire car en développant le produit figurant dans (1.84), il résulte une superposition cohérente d'états contenant un nombre varié d'électrons.

Le processus de minimisation du grand potentiel et l'obtention des excitations élémentaires sont simplifiés en utilisant la transformation de Bogoliubov-Valatin [22] :

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow}, \end{aligned} \quad (1.85)$$

avec les conditions  $u_{\mathbf{k}} = u_{-\mathbf{k}}$  et  $v_{\mathbf{k}} = -v_{-\mathbf{k}}$ , lesquelles préservent les relations d'anticommutation canoniques des fermions.

### Paramètre d'ordre et gap supraconducteur dans la théorie BCS

À partir des valeurs obtenues pour  $u_{\mathbf{k}}$  et  $v_{\mathbf{k}}$  *via* la minimisation du grand potentiel, le gap supraconducteur peut s'obtenir par l'équation :

$$1 = \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{(E(\mathbf{k}) - E_F)^2 + \Delta^2}} \quad (1.86)$$

En passant au continu, on obtient l'expression approximative suivante, valable dans la limite  $VN(E_F) \ll 1$  :

$$\Delta = 2\omega_D \exp\left(\frac{-2}{N(E_F)V}\right), \quad (1.87)$$

où  $N(E_F)$  est la densité d'états à l'énergie de Fermi. Cette quantité est un gap car elle apparaît dans la relation de dispersion des quasi-particules définies par les opérateurs  $\alpha$ . Notamment, il faut fournir une énergie  $\Delta$  minimale pour créer une telle excitation élémentaire. C'est ce qui garantit la stabilité de l'état BCS. Le paramètre d'ordre supraconducteur, quant à lui, est défini par  $\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ . Il s'exprime, à  $T = 0$ , en fonction du gap [31] :

$$\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = -\frac{1}{2} \frac{\Delta}{\sqrt{(E_{\mathbf{k}} - E_F)^2 + \Delta^2}}. \quad (1.88)$$

Le moment cinétique des paires de Cooper étant nul, la partie spatiale de leur fonction d'onde est symétrique. Également, pour avoir une fonction d'onde globalement antisymétrique, il faut que ces paires soient des singulets de spin. Puisque le moment cinétique est nul, on dit qu'il s'agit de supraconductivité de type *s*.

## 1.4 Les phases du modèle de Holstein-Hubbard

Le modèle de Holstein-Hubbard à demi rempli fait intervenir quatre paramètres ( $\omega_D$ ,  $U$ ,  $g$ ,  $t$ ), lesquels sont en compétition pour déterminer l'état du système. Ils sont donnés en unités de  $t$  :  $t \equiv 1$  dans ce qui suit.

Pour une fréquence de Debye donnée, le tableau 1.1 met en lien ces différents paramètres avec l'état le plus probable. Une façon d'étudier la compétition entre les différentes échelles d'énergies est de considérer  $U_{\text{eff}} = U - 2g^2/\omega_D$ . Pour  $U_{\text{eff}} \approx 0$ , on peut anticiper qu'un état métallique sera favorisé. Lorsque  $U_{\text{eff}} > 0$ , c'est l'antiferromagnétisme qui domine. Finalement, une constante de couplage dominante ( $U_{\text{eff}} < 0$ ) fera en sorte que les électrons pourront s'attirer pour former une ODC ou de la supraconductivité.

Échelle dominante	État dominant
$t$	Métal
$2g^2/\omega_D$	ODC/SC
$U$	ODS

TABLEAU 1.1 – Lien entre l'échelle d'énergie dominante et l'état prévu correspondant du système. ODS = Onde de Densité de Spin, ODC = Onde de Densité de Spin et SC = Supraconductivité.

Pour une faible fréquence de Debye, on doit tenir compte des effets de retard. Le nombre de phonons est alors grand et l'interaction électron-électron effective n'est plus valable. La probabilité d'un état métallique diminue lorsque  $\omega_D$  diminue.

En 1D, nous devons remplacer ODS par isolant de Mott en raison de l'impossibilité d'une brisure d'une symétrie continue (symétrie de rotation dans l'espace des spins). Également, nous utiliserons de façon interchangeable les termes ODC et isolant de Peierls dans ce qui suit.

## Chapitre 2

# Théorie des perturbations interamas

Ce chapitre et le suivant décrivent la méthode de résolution du modèle. En théorie, lorsque l'hamiltonien d'un système et l'espace vectoriel sur lequel il agit sont donnés, il est possible d'obtenir toutes les quantités physiquement pertinentes du système. Dans les faits, le physicien doit rapidement se résoudre à utiliser des approximations tant la difficulté du problème croît rapidement en fonction de la taille du système. Dans le cas présent, la méthode d'approximation utilisée est la théorie des perturbations interamas (CPT, pour **C**luster **P**erturbation **T**heory). La CPT ([12,32]) fournit une approximation de la fonction de Green à une particule du système, laquelle nous permet de calculer plusieurs quantités physiques, telles des valeurs moyennes d'observables, des fonctions spectrales, etc.

Nous débutons ce chapitre en définissant la fonction de Green utilisée dans nos calculs ainsi que certaines de ses propriétés. Puisque la CPT repose sur la division du système original en plusieurs amas identiques découplés, nous donnerons une description détaillée des différents réseaux et sous-réseaux issus de cette décomposition dans la seconde section. Ces amas étant de petite taille, il devient possible de diagonaliser leur hamiltonien exactement, nous permettant ainsi d'obtenir la fonction de Green des amas. Il restera ensuite à inscrire ces amas dans le réseau et à décrire la façon d'obtenir la valeur moyenne d'observables *via* la fonction de Green.

## 2.1 Fonction de Green

À température nulle, la fonction de Green (retardée) est définie par [33] :

$$\begin{aligned} i\mathcal{G}_{\mathbf{r}\sigma,\mathbf{r}'\sigma'}(t,t') &= \langle F | \{c_{\mathbf{r}\sigma}(t), c_{\mathbf{r}'\sigma'}^\dagger(t')\} | F \rangle \Theta(t-t') \\ &= \langle F | c_{\mathbf{r}\sigma}(t) c_{\mathbf{r}'\sigma'}^\dagger(t') | F \rangle \Theta(t-t') + \langle F | c_{\mathbf{r}'\sigma'}^\dagger(t') c_{\mathbf{r}\sigma}(t) | F \rangle \Theta(t-t'). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Dans cette expression,  $c_{\mathbf{r}\sigma}(t)$  est l'opérateur de destruction, au temps  $t$ , d'un électron de spin  $\sigma$  dans une orbitale de Wannier centrée en un point  $\mathbf{r}$  du réseau original  $\gamma$ . Cet opérateur s'obtient de l'opérateur analogue dans la représentation de Schrödinger :

$$c_{\mathbf{r}\sigma}(t) = e^{i\hat{K}t} c_{\mathbf{r}\sigma} e^{-i\hat{K}t}, \quad (2.2)$$

où  $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ , avec  $\hat{H}$  l'hamiltonien complet,  $\mu$  le potentiel chimique et  $\hat{N} = \sum_{\mathbf{r},\sigma} c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma}$  l'opérateur nombre de particules.  $|F\rangle$  est l'état fondamental du système. Finalement,  $\Theta(t-t')$  est la fonction d'Heaviside préservant la causalité.

L'interprétation physique de la fonction de Green est la suivante. Le premier terme de (2.1) est l'amplitude de probabilité que le système dans l'état  $c_{\mathbf{r}'\sigma'}^\dagger(t')|F\rangle$  au temps  $t'$  se retrouve dans l'état  $c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger(t)|F\rangle$  au temps subséquent  $t$ . Ce terme traduit donc la propagation d'un électron ajouté au fondamental du système. Le second terme exprime, quant à lui, la propagation d'un trou, à partir du temps  $t'$  jusqu'au temps  $t$ .

Il est à noter que la définition (2.1) implique que  $i\mathcal{G}_{\mathbf{r}\sigma,\mathbf{r}'\sigma'}(t,t') = \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\delta_{\sigma,\sigma'}$  à  $t-t' = 0$ , ce qui est cohérent avec la définition de la fonction de Green d'un système à une particule. En effet, la particule dans l'état  $|\mathbf{r}\rangle$  au temps  $t$  y sera aussi au temps  $t' = t$ .

Pour un hamiltonien ne dépendant pas explicitement du temps, la fonction de Green est homogène dans le temps et ne dépend donc que des intervalles de temps  $t-t'$ . Qui plus est, les différentes composantes de l'hamiltonien de Holstein-Hubbard conservant le spin, il vient que la fonction de Green est diagonale par rapport aux indices de spin. La transformée de Fourier en temps de (2.1) s'écrit (laissant tomber l'indice de spin pour simplifier) :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(z) = -i \int_0^\infty \langle F | (e^{i\hat{K}t} c_{\mathbf{r}} e^{-i\hat{K}t} c_{\mathbf{r}'}^\dagger + c_{\mathbf{r}'}^\dagger e^{i\hat{K}t} c_{\mathbf{r}} e^{-i\hat{K}t}) | F \rangle e^{i(\omega+i\eta)t} dt, \quad (2.3)$$

où  $z = \omega + i\eta$ , avec  $i\eta$  ( $\eta > 0$ ) la petite partie imaginaire nécessaire à la convergence de

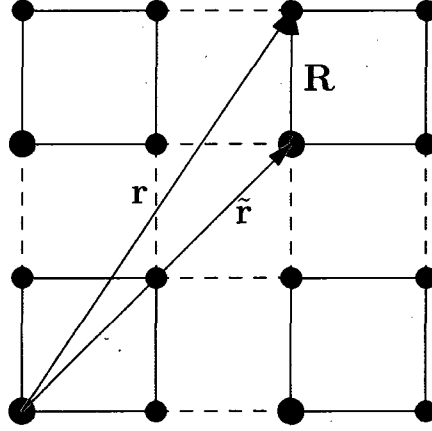


FIGURE 2.1 – Division du système en amas. Les amas comprennent 4 sites dans cet exemple. Les vecteurs  $\mathbf{r}$ ,  $\tilde{\mathbf{r}}$  et  $\mathbf{R}$  sont aussi représentés. Les lignes à tirets représentent les liens interamas.

la transformée de Fourier. Si  $\hat{K}|F\rangle = \Omega_{\text{fond.}}|F\rangle$ , l'équation (2.3) devient alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(z) &= -i \int_0^\infty \left( e^{i\Omega_{\text{fond.}}t} \langle F|c_{\mathbf{r}}e^{-i\hat{K}t}c_{\mathbf{r}'}^\dagger|F\rangle + \langle F|c_{\mathbf{r}'}^\dagger e^{i\hat{K}t}c_{\mathbf{r}}|F\rangle e^{-i\Omega_{\text{fond.}}t} \right) e^{izt} dt \\ &= \langle F| \left[ c_{\mathbf{r}} \frac{1}{z - (\hat{K} - \Omega_{\text{fond.}})} c_{\mathbf{r}'}^\dagger + c_{\mathbf{r}'}^\dagger \frac{1}{z + (\hat{K} - \Omega_{\text{fond.}})} c_{\mathbf{r}} \right] |F\rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

En l'absence d'un terme ne conservant pas le nombre de particules,  $\Omega_{\text{fond.}} = E_{\text{fond.}} - \mu N$  et la fonction de Green devient :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(z) = \langle F| \left[ c_{\mathbf{r}} \frac{1}{z + \mu - (\hat{H} - E_{\text{fond.}})} c_{\mathbf{r}'}^\dagger + c_{\mathbf{r}'}^\dagger \frac{1}{z + \mu + (\hat{H} - E_{\text{fond.}})} c_{\mathbf{r}} \right] |F\rangle. \quad (2.5)$$

## 2.2 Division du système en amas

La fonction de Green (2.4) est la fonction de Green complète du système. Nous désirons obtenir une approximation de celle-ci. La première étape, dans le cadre de la CPT, est de diviser le réseau initial  $\gamma$  de  $N_s$  sites en amas identiques de  $L$  sites, tel qu'illustré à la figure 2.1. La position des amas est donnée par les vecteurs  $\tilde{\mathbf{r}} \in \Gamma$ , où  $\Gamma$  est appelé super-réseau. Les  $L$  sites d'un amas seront notés  $\mathbf{R}$ . L'équivalence réseau  $\leftrightarrow$  (super-réseau + amas) permet d'écrire toutes les quantités dépendant des  $\mathbf{r}$  selon l'indice composé  $\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}$ . En vertu de cette division, l'hamiltonien du réseau  $\hat{H}$  peut s'écrire de

la façon suivante :

$$\hat{H} = \hat{H}' + \hat{V}.$$

$\hat{H}' = \sum_{\bar{r} \in \Gamma} \hat{H}'_{\bar{r}}$  est l'hamiltonien des  $N_s/L$  amas découplés et  $\hat{V}$  contient les termes de  $\hat{H}$  impliquant des sites situés sur des amas différents (notamment les sauts interamas  $t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$  où  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$  sont situés sur des amas différents). Ce dernier sera traité comme une perturbation. Dans la suite de ce chapitre, nous affublerons d'un prime (') toute quantité définie sur les amas et nous considérons un hamiltonien qui conserve le nombre de particules<sup>1</sup>.

À l'ordre le plus bas de la théorie des perturbations à couplage fort, la fonction de Green du réseau est donnée par [12] :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{-1}(z) \approx G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{-1}(z) = G'_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{-1}(z) - V_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}, \quad (2.6)$$

ou sous forme matricielle, avec les matrices de dimension  $N_s \times N_s$  pour une projection donnée du spin<sup>2</sup> :

$$G^{-1}(z) = G'^{-1}(z) - V. \quad (2.7)$$

Dans l'équation précédente,  $G'$  est la fonction de Green des amas découplés :

$$G'_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(z) = \langle F' | \left[ c_{\mathbf{r}} \frac{1}{z + \mu - (\hat{H}' - E_0)} c_{\mathbf{r}'}^\dagger + c_{\mathbf{r}'}^\dagger \frac{1}{z + \mu + (\hat{H}' - E_0)} c_{\mathbf{r}} \right] | F' \rangle, \quad (2.8)$$

où  $E_0$  est l'énergie du fondamental,  $|F'\rangle$ , de  $\hat{H}'$ . Les amas étant découplés, nous avons les propriétés suivantes :

- L'énergie du fondamental s'écrit

$$E_0 = \sum_{\bar{r}} e_0^{(\bar{r})} = \frac{N_s}{L} e_0,$$

où  $e_0^{(\bar{r})} = e_0$  est l'énergie d'un amas ;

- L'état fondamental  $|F'\rangle$  peut s'écrire comme un produit tensoriel des états fonda-

---

<sup>1</sup>Il n'est pas difficile d'adapter les résultats de la présente section au cas où le nombre de particules n'est pas conservé. En fait, il suffit de remplacer toutes les énergies par le grand potentiel  $\Omega$  (du système, d'un amas, etc.) et tous les hamiltoniens par l'opérateur  $\hat{K}$  associé, tout en posant  $\mu = 0$  dans les expressions des fonctions de Green.

<sup>2</sup>Les quantités matricielles seront représentées par des lettres sans sérif dans ce mémoire.

mentaux des amas, c'est-à-dire :

$$|F'\rangle = \bigotimes_{\tilde{r} \in \Gamma} |\Omega_{\tilde{r}}\rangle, \quad (2.9)$$

où  $|\Omega_{\tilde{r}}\rangle \equiv |\Omega\rangle$  est le même pour tous les amas, ceux-ci étant identiques ;

–  $G'(\omega)$  est diagonale dans les indices  $\tilde{r}$ , c'est-à-dire que  $G'_{\tilde{r}\tilde{r}'} = \delta_{\tilde{r},\tilde{r}'} G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$ .

Ces propriétés nous amènent à écrire la fonction de Green d'un amas comme :

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(z) = \langle \Omega | \left[ c_{\mathbf{R}} \frac{1}{z + \mu - (\hat{H}' - e_0)} c_{\mathbf{R}'}^\dagger + c_{\mathbf{R}'}^\dagger \frac{1}{z + \mu + (\hat{H}' - e_0)} c_{\mathbf{R}} \right] | \Omega \rangle, \quad (2.10)$$

où  $\hat{H}'$  représente dorénavant l'hamiltonien d'un amas.

D'autre part, la présence du terme d'interaction électron-phonon dans l'hamiltonien d'un amas implique que  $|\Omega\rangle$  doit s'écrire :

$$|\Omega\rangle = \sum_{\alpha, n} \langle \alpha, n | \Omega \rangle |\alpha, n\rangle \quad (2.11)$$

avec  $|\alpha, n\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |n\rangle$ . Le ket  $|n\rangle$  se rapporte aux états propres de l'opérateur nombre de phonons, alors que  $|\alpha\rangle$  est l'état électronique dans la représentation nombre d'occupation. Puisque l'hamiltonien  $\hat{H}'$  commute à la fois avec les opérateurs nombre total d'électrons ( $\hat{N}' = \sum_{\mathbf{R}, \sigma} c_{\mathbf{R}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}, \sigma}$ ), nombre d'électron de spin up ( $\hat{N}'_{\uparrow} = \sum_{\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \uparrow}$ ) et nombre d'électrons de spin down ( $\hat{N}'_{\downarrow} = \sum_{\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}, \downarrow}$ ) sur un amas, les kets  $|\alpha\rangle$  présents dans la somme sont ceux ayant un nombre d'électrons total et un spin total bien définis. Définissons  $N_{\uparrow}$  (resp.  $N_{\downarrow}$ ) le nombre d'électrons de spin  $\uparrow$  (resp.  $\downarrow$ ), et  $N' = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$  le nombre total d'électrons sur l'amas. On écrit un état électronique comme

$$(c_{\mathbf{R}_{1\uparrow}}^\dagger)^{n_{1\uparrow}} \dots (c_{\mathbf{R}_{N\uparrow}}^\dagger)^{n_{N\uparrow}} (c_{\mathbf{R}_{1\downarrow}}^\dagger)^{n_{1\downarrow}} \dots (c_{\mathbf{R}_{N\downarrow}}^\dagger)^{n_{N\downarrow}} |0\rangle, \quad (2.12)$$

de façon telle que  $\sum_{i=1}^L n_{i\uparrow} = N_{\uparrow}$  et  $\sum_{i=1}^L n_{i\downarrow} = N_{\downarrow}$ , avec  $n_{i,\sigma} = 0$  ou 1.

L'état fondamental et l'énergie lui étant associée sont calculés par la méthode exposée à la section 2.4.



### 2.2.1 Transformées de Fourier sur les réseaux

L'utilisation des transformées de Fourier (TF) sur les réseaux  $\gamma$  et  $\Gamma$  ainsi que sur les amas permet de simplifier quelque peu le problème. Pour les quantités ne dépendant que d'un indice de site, nous définissons les TF suivantes :

1. Sur le réseau :

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{r} \in \gamma} f_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad f_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k} \in ZB_\gamma} f(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.13)$$

2. Sur le super-réseau :

$$f(\tilde{\mathbf{k}}) = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}} \in \Gamma} f_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}}, \quad f_{\tilde{\mathbf{r}}} = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}} \in ZB_\Gamma} f(\tilde{\mathbf{k}}) e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \quad (2.14)$$

3. Sur l'amas :

$$f_{\mathbf{K}} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R} \in \text{Amas}} f_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}, \quad f_{\mathbf{R}} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K} \in (ZB_\gamma \cap \Gamma^*)} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \quad (2.15)$$

Dans ces expressions,  $ZB_{\gamma(\Gamma)}$  représente la zone de Brillouin du réseau  $\gamma(\Gamma)$  alors que  $\gamma^*$  (resp.  $\Gamma^*$ ) est le réseau réciproque de  $\gamma$  (resp.  $\Gamma$ ). La figure 2.2 illustre ces zones. La notation  $\mathbf{K} \in (ZB_\gamma \cap \Gamma^*)$  signifie que les  $\mathbf{K}$  sont les vecteurs du réseau réciproque de  $\Gamma$  appartenant aussi à la zone de Brillouin de  $\gamma$ . Pour les quantités dépendant de deux indices de site, en particulier les fonctions de Green, nous définissons :

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}. \quad (2.16)$$

Également, étant donnée l'équivalence  $\mathbf{r} \leftrightarrow \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}$ , on peut aussi écrire :

$$G_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}') = \frac{L}{N_s} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}'} G_{(\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R})(\tilde{\mathbf{r}}'+\mathbf{R}')} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{k}}' \cdot \tilde{\mathbf{r}}')}. \quad (2.17)$$

Il s'agit d'une TF partielle car seule la partie relative au super-réseau a été traduite dans l'espace de Fourier associé. D'autres informations utiles ainsi que certaines dérivations liées aux TF utilisées dans ce mémoire sont données à l'annexe A.

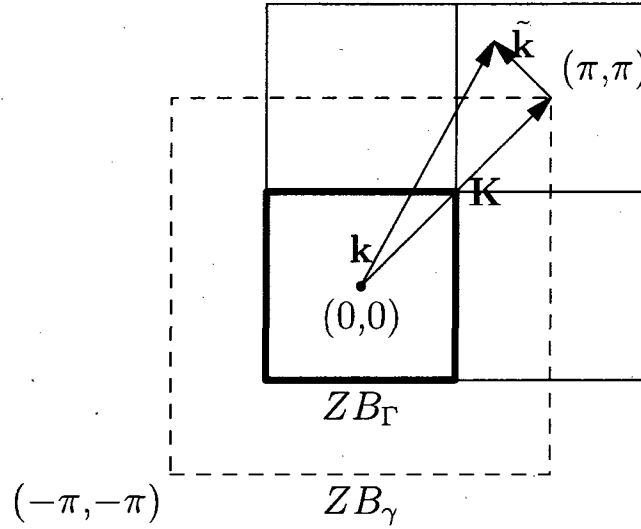


FIGURE 2.2 – Illustration des zones de Brillouin du réseau et du super-réseau de la figure 2.1. Les vecteurs  $\mathbf{k}$  et  $\tilde{\mathbf{k}}$  appartiennent respectivement à  $ZB_\Gamma$  et  $ZB_\gamma$ . L'aire de  $ZB_\gamma$  est quatre fois celle de  $ZB_\Gamma$ . Les vecteurs  $\mathbf{K}$  sont des éléments du réseau réciproque de  $\Gamma$  ainsi que de  $ZB_\gamma$ . L'équivalence  $\mathbf{k} \leftrightarrow \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$  est explicite.

L'invariance par translation dans le réseau  $\Gamma$  implique que les matrices exprimées dans la représentation mixte de (2.17) sont diagonales par rapport aux vecteurs  $\tilde{\mathbf{k}}$ . Ce faisant, la taille des matrices passe de  $N_s^2$  à  $L^2$ . Faisant la transformation partielle de (2.6), on obtient :

$$(G^{-1})_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = (G'^{-1})_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\omega) - \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} V_{0+\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}'} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}}. \quad (2.18)$$

## 2.2.2 Application à l'hamiltonien de Holstein-Hubbard

Pour fixer les idées, appliquons la division en amas exposée ci-dessus à l'hamiltonien de Holstein-Hubbard. Dans la représentation  $\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}$ , l'hamiltonien de Holstein-Hubbard multimodal s'écrit :

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -t \sum_{(\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}'+\mathbf{R}'), \sigma} \left( c_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}}'\mathbf{R}'\sigma} + c.h. \right) + U \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{R}} \hat{n}_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}\uparrow} \hat{n}_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}\downarrow} \\ & + \omega_D \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{R}} a_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}}^\dagger a_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}} - g \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{R}} \hat{n}_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}} (a_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}} + a_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}}^\dagger). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Dans ce cas, on a pour l'hamiltonien d'un amas :

$$\hat{H}' = -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} \left( c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c.h. \right) + U \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{R}\downarrow} + \omega_D \sum_{\mathbf{R}} a_{\mathbf{R}}^\dagger a_{\mathbf{R}} - g \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}} (a_{\mathbf{R}} + a_{\mathbf{R}}^\dagger). \quad (2.20)$$

En prenant la transformée de Fourier sur l'amas des opérateurs phononiques, il vient :

$$\begin{aligned} \hat{H}' = & -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} \left( c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c.h. \right) + U \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{R}\downarrow} \\ & + \omega_D \sum_{\mathbf{K}} a_{\mathbf{K}}^\dagger a_{\mathbf{K}} - \frac{g}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{K}} \hat{n}_{\mathbf{R}} (a_{\mathbf{K}} + a_{-\mathbf{K}}^\dagger) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

avec  $[a_{\mathbf{K}}, a_{\mathbf{K}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}$ . À l'annexe A, il est démontré que, pour un amas de taille  $L = L_1 \times L_2 \times \dots \times L_D$  en dimension  $D$ , la  $i$ -ème composante de  $\mathbf{K}$  est

$$K_i = \frac{2\pi m_i}{L_i},$$

où

$$m_i = -\frac{L_i}{2} + 1, -\frac{L_i}{2}, \dots, \frac{L_i}{2} - 1, \frac{L_i}{2}.$$

Par exemple, en 1D, pour  $L = 2$ ,  $K \in \{0, \pi\}$ ; pour  $L = 4$ ,  $K \in \{-\pi/2, 0, \pi/2, \pi\}$ . Ainsi, si nous voulons avoir accès à de plus petits amas, on doit choisir le mode de notre approximation parmi les modes  $\mathbf{0}$  et  $\boldsymbol{\pi}$ . Pour ces deux modes, nous avons démontré précédemment que  $a_{\mathbf{K}} + a_{-\mathbf{K}}^\dagger \rightarrow a_{\mathbf{K}} + a_{\mathbf{K}}^\dagger$ . Au final, l'hamiltonien d'un amas est :

$$\hat{H}' = -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} \left( c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c.h. \right) + U \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{R}\downarrow} + \omega_D a^\dagger a - \frac{g}{\sqrt{L}} (a + a^\dagger) \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}. \quad (2.22)$$

Dans la suite, nous poserons  $\lambda = g/\sqrt{L}$ .

## 2.3 Périodisation

La division du système en amas brise l'invariance par translation dans  $\gamma$ . En effet, au départ, c'est-à-dire avant le traitement perturbatif,  $\hat{H}$  commute avec l'opérateur de translation par un vecteur du réseau  $\gamma$  :  $[\hat{H}, \hat{T}_\gamma] = 0$ . Cependant, la séparation de cet hamiltonien en  $\hat{H}'$  et  $\hat{V}$ , lesquels ne commutent pas avec tous les  $\hat{T}_\gamma$ , vient briser cette invariance par translation dans  $\gamma$ , mais pas celle dans  $\Gamma$ . La périodisation de la fonction

de Green nous redonnera une fonction invariante sous translation dans  $\gamma$  en forçant cette invariance.

Nous voulons donc obtenir une expression pour la transformée de Fourier de  $G$  telle que  $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}')G(\mathbf{k})$  en fonction de  $G_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}, z)$ . Cette fonction de  $\mathbf{k}$  sera appelée fonction de Green CPT.

Tout d'abord, nous savons que la transformée en  $\tilde{\mathbf{k}} \in ZB_\Gamma$  de  $G$  est diagonale dans ces indices. Ainsi,  $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}')G(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, \tilde{\mathbf{k}}' + \mathbf{K}') = G(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}')$ , ce qui implique que  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  ne doivent différer que par un vecteur appartenant au super-réseau réciproque  $\Gamma^*$ . On a (cf. Annexe A, sous-section A.3.2) :

$$\begin{aligned} G(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}') &= \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\mathbf{K}_1, \mathbf{K}'_1} G_{\mathbf{K}_1, \mathbf{K}'_1}(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}) e^{i(\mathbf{K}_1 - \tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{K}) \cdot \mathbf{R}} e^{-i(\mathbf{K}'_1 - \tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R}'} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} G_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) e^{-i(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{R}} e^{i(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}') \cdot \mathbf{R}'}, \end{aligned}$$

c'est-à-dire :

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} G_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}'}. \quad (2.23)$$

Nous forçons maintenant la condition  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  (i.e.  $\mathbf{K} = \mathbf{K}'$ ) à être réalisée et, étant donné que la position de  $ZB_\Gamma$  dans  $\Gamma^*$  est sans importance, on peut remplacer  $\tilde{\mathbf{k}}$  dans l'équation précédente par  $\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K} = \mathbf{k}$ . La fonction de Green CPT s'écrit donc :

$$G_{CPT}(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} G_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\mathbf{k}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \quad (2.24)$$

## 2.4 Diagonalisation exacte de l'hamiltonien d'un amas

Le calcul de  $G_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\mathbf{k}, z)$ , selon (2.18), passe par le calcul du fondamental d'un amas donné  $|\Omega\rangle$  et de l'énergie associée  $e_0$ . Puisque  $\hat{H}$  conserve le nombre d'électrons d'un spin donné, les hamiltoniens restreints aux amas le conservent également. Il résulte que l'état fondamental appartient à un secteur donné de l'espace de Hilbert avec un nombre d'électrons de spin  $\uparrow$  et  $\downarrow$  bien défini. Ce secteur est choisi de façon à représenter le mieux possible l'état physique du système. Par exemple, pour un système à demi-rempli de spin total  $S_z = 0$ , le secteur adéquat est  $N_\uparrow = N_\downarrow = L/2$ . Ce sont tous les états répondant à cette description pour un amas donné qui entreront dans la somme figurant dans l'équation (2.11). Suivant la discussion de la section 1.2.1, le nombre de phonons

pour un amas est majoré par  $n_{\max}$ . La dimension du secteur est donnée, pour un amas de  $L$  sites et un nombre  $n_{\max}$  de phonons, par :

$$d = \left( \frac{L!}{N_{\uparrow}!(L - N_{\uparrow})!} \right) \left( \frac{L!}{N_{\uparrow}!(L - N_{\uparrow})!} \right) (n_{\max} + 1), \quad (2.25)$$

Le nombre de phonons moyen (pour le mode choisi) est donné par :

$$\bar{n} = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{n=n_{\max}} n |\langle \alpha, n | \Omega \rangle|^2. \quad (2.26)$$

En choisissant  $n_{\max}$  de façon telle que  $\bar{n} \lesssim n_{\max}/2$ , la troncature de l'espace de Hilbert n'est pas trop importante. La dimension du secteur lié aux états électroniques augmente rapidement avec  $L$ . En effet, pour un système demi-rempli, on a :

$$d_e(L) = \frac{(L!)^2}{\left(\frac{L}{2}\right)!^4}. \quad (2.27)$$

Par exemple :  $d_e(2) = 4$ ,  $d_e(4) = 36$ ,  $d_e(6) = 400$ ,  $d_e(8) = 4900$ ,  $d_e(10) = 63504$ , .... La taille de l'espace d'Hilbert appelle à l'utilisation d'une méthode de traitement de matrices énormes, en particulier dans la recherche de leurs valeurs et vecteurs propres. C'est fait à l'aide de l'algorithme de Lanczos.

### 2.4.1 Algorithme de Lanczos

L'algorithme de Lanczos [34] est une méthode itérative permettant d'obtenir (en particulier) la plus petite valeur propre et le vecteur propre associé d'une matrice donnée, laquelle est trop grande pour être diagonalisée immédiatement par des méthodes standards. Il est donc tout indiqué pour trouver l'état fondamental ainsi que la valeur propre associée de l'hamiltonien d'un amas. Il s'agit de résoudre le problème aux valeurs propres :

$$\hat{H}'|\psi\rangle = e|\psi\rangle. \quad (2.28)$$

La relation de fermeture dans l'espace  $\mathcal{E}$  des états de l'amas est donnée par :

$$\sum_{x \equiv (\alpha, n)} |x\rangle\langle x| = 1_{d \times d}. \quad (2.29)$$

En l'insérant dans l'équation précédente, il résulte :

$$\sum_x \langle x' | \hat{H}' | x \rangle \langle x | \psi \rangle = e \langle x' | \psi \rangle. \quad (2.30)$$

L'algorithme de Lanczos requiert de projeter l'équation précédente sur un sous-espace  $\mathcal{K}$ , appelé sous-espace de Krylov. Lorsque les vecteurs générant ce dernier sont convenablement orthogonalisés,  $\hat{H}'$  y adopte une forme tridiagonale facilement diagonalisable. Le sous-espace de Krylov est généré en appliquant itérativement l'opérateur  $\hat{H}'$  à un vecteur aléatoire  $|\phi_0\rangle$  :

$$\mathcal{K} = \text{span}\{|\phi_0\rangle, \hat{H}'|\phi_0\rangle, \hat{H}'^2|\phi_0\rangle, \dots, \hat{H}'^{m-1}|\phi_0\rangle\}, \quad (2.31)$$

Il s'agit d'un espace approximativement invariant sous l'action de  $\hat{H}'$  car : (1)  $\hat{H}'\mathcal{K}$  ne donne que  $\hat{H}'^m|\phi_0\rangle$  à l'extérieur de  $\mathcal{K}$  et (2)  $\hat{H}'^m|\phi_0\rangle$  tend vers un vecteur propre de  $\hat{H}'$  (celui associé à la plus grande valeur propre) quand  $m \rightarrow \infty$ . Les vecteurs de Krylov ne sont pas orthogonaux. Il est cependant possible de les construire pour qu'ils le soient<sup>3</sup>. Soit  $|\phi_{i+1}\rangle$  le vecteur obtenu lors de la  $(i+1)$ -ième application de  $\hat{H}'$ . En prenant

$$|\phi_{i+1}\rangle = \hat{H}'|\phi_i\rangle - a_i|\phi_i\rangle - b_i^2|\phi_{i-1}\rangle, \quad (2.32)$$

avec

$$a_i = \frac{\langle \phi_i | \hat{H}' | \phi_i \rangle}{\langle \phi_i | \phi_i \rangle} \quad b_i^2 = \frac{\langle \phi_i | \phi_i \rangle}{\langle \phi_{i-1} | \phi_{i-1} \rangle}, \quad (2.33)$$

et les conditions  $|\phi_{-1}\rangle = 0$  et  $b_0^2 = 0$ , nous obtenons des vecteurs mutuellement orthogonaux, que nous normalisons :  $|i\rangle = |\phi_i\rangle / \sqrt{\langle \phi_i | \phi_i \rangle}$ .

Formons maintenant le projecteur

$$P_m = \sum_{i=0}^{m-1} |i\rangle \langle i| \quad (2.34)$$

et insérons-le dans (2.30) pour donner :

$$\sum_x \langle x' | \hat{H}' | x \rangle \langle x | \psi \rangle \approx \sum_{x,i,j} \langle x' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | j \rangle \langle j | x \rangle \langle x | \psi \rangle. \quad (2.35)$$

Le signe d'approximation dans l'équation précédente vient du fait que nous projetons

<sup>3</sup>Nous faisons ici abstraction des pertes d'orthogonalité dues aux erreurs purement numériques.

les vecteurs appartenant à  $\mathcal{E}$  sur un sous-espace  $\mathcal{K} \subset \mathcal{E}$ . Pour sa part,  $T_{ij} \equiv \langle i|\hat{H}'|j\rangle$  est l'élément  $ij$  de la représentation tridiagonale de  $\hat{H}'$ . En notant  $\langle x|i\rangle = Q_{xi}$  et  $v$  le vecteur colonne représentant l'état  $|\psi\rangle$  dans la base  $\{|x\rangle\}$ , nous pouvons récrire l'équation ci-dessus sous forme matricielle comme

$$hv \approx QTQ^\dagger v \quad (2.36)$$

avec :

$$T = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_m \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

Ainsi,  $h \approx QTQ^\dagger$ . Si  $Tw = \lambda w$  est l'équation aux valeurs propres de  $T$ , et sachant que  $Q^\dagger Q = 1_{m \times m}$ , on écrit l'équation :

$$hQw \approx QTQ^\dagger Qw = \lambda Qw, \quad (2.38)$$

de laquelle on déduit que  $Qw$  est une approximation d'un vecteur propre de  $h$  avec la valeur propre  $\lambda$ . Donc, pour obtenir l'énergie du fondamental, on trouve, après chaque itération, la valeur propre la plus basse de  $T$ ,  $\lambda_{\min} = e_0$ . La séquence s'arrête lorsqu'un certain critère de convergence est rempli, par exemple quand  $\langle i|\Omega\rangle b_i < 10^{-12}$ . Il est établi que ce sont les valeurs propres extrêmes du spectre d'une matrice qui convergent le plus rapidement dans le cadre de l'algorithme de Lanczos [35].

Pour ce qui est du fondamental  $|\Omega\rangle$ , il est obtenu en appliquant la matrice  $Q$  au vecteur propre de  $T$  associé à la valeur propre  $\lambda_{\min}$ . Le fondamental ainsi obtenu l'est dans la base  $\{|i\rangle\}$ , alors que nous le voudrions dans la base  $\{|\alpha, n\rangle\}$ . Cette représentation du fondamental est obtenue en retraçant l'algorithme de Lanczos, car les  $|\phi_i\rangle$  ne sont pas gardés en mémoire. Connaissant les coefficients  $\langle i|\Omega\rangle$ , et sachant que

$$|\Omega\rangle = \sum_{\alpha, n} \langle \alpha, n|\Omega\rangle |\alpha, n\rangle \approx \sum_i \langle i|\Omega\rangle |i\rangle, \quad (2.39)$$

on obtient :

$$|\Omega\rangle \approx \sum_{\alpha, n, i} \langle i|\Omega\rangle \langle \alpha, n|i\rangle |\alpha, n\rangle. \quad (2.40)$$

Dans l'éventualité d'une dégénérescence du niveau fondamental, le vecteur  $|\Omega\rangle$  obtenu appartient au sous-espace propre associé à la valeur propre  $e_0$ . Dans ce cas, l'algorithme de Lanczos est retracé dans le but d'obtenir un second fondamental,  $|\Omega'\rangle$ , orthogonal au premier. Pour ce faire, la composante de  $|\Omega'\rangle$  le long du premier fondamental est retranchée à chaque itération. Quoiqu'improbables, des degrés de dégénérescence supérieurs à 2 sont possibles. On en tient compte de la même manière que le cas simplement dégénéré. La présence d'une dégénérescence de l'énergie du fondamental se répercutera sur l'expression de la fonction de Green, comme il sera vu ci-dessous.

### Décalage

Vue la tendance de l'hamiltonien de Holstein-Hubbard à former des ondes de densité de charge pour plusieurs valeurs des paramètres, le nombre de phonons moyen est habituellement grand. Mais qui dit grand nombre de phonons moyen dit grand temps de calcul et, surtout, possibilité de tronquer sévèrement l'espace d'Hilbert, advenant que  $n_{\max}$  n'est pas fixé assez haut. Pour pallier ce problème, un ajustement de la position des oscillateurs est fait au niveau de l'hamiltonien d'un amas. Nous voulons donc donner aux sites un décalage (« shift ») initial de façon à limiter  $\bar{n}$ . Pour ce faire, on considère la transformation unitaire :

$$\bar{a} = a - \frac{1}{2}\delta \quad \bar{a}^\dagger = a^\dagger - \frac{1}{2}\delta \quad (2.41)$$

où  $\delta$  est ledit décalage<sup>4</sup>. Avec les notations

$$\hat{O} = \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}},$$

$$\hat{H}'_e = -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma} \left( c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{R}'\sigma} + c.h. \right) + U \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{R}\downarrow}$$

et

$$\hat{N}' = \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}},$$

l'hamiltonien grand canonique d'un amas s'écrit :

$$\hat{K}' = \hat{H}' - \mu \hat{N}' = \hat{H}'_e - \mu \hat{N}' + \omega_D a^\dagger a - \lambda (a + a^\dagger) \hat{O}, \quad (2.42)$$

<sup>4</sup>En fait,  $\delta$  n'a évidemment pas les bonnes unités pour être un vrai décalage.



et son transformé *via* (2.41) est :

$$\hat{K}'(\delta) = \hat{H}'_e - \mu \hat{N}' + \omega_D \tilde{a}^\dagger \tilde{a} + \frac{\omega_D \delta}{2} (\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger) - \lambda (\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger) \hat{\mathcal{O}} - \lambda \delta \hat{\mathcal{O}} + \frac{\omega_D \delta^2}{4}. \quad (2.43)$$

Puisque (2.41) est une transformation unitaire, on doit avoir :

$$\Omega = \langle \Omega(\delta) | \hat{K}'(\delta) | \Omega(\delta) \rangle = \langle \Omega | \hat{K}' | \Omega \rangle, \quad (2.44)$$

c'est-à-dire que le grand potentiel doit être le même lorsque calculé à partir du fondamental de  $\hat{K}'(\delta)$  qu'à partir de l'hamiltonien initial. Lorsque  $\delta$  est fixé adéquatement,  $\langle \tilde{a}^\dagger + \tilde{a} \rangle$  doit être petit. La procédure pour déterminer  $\delta$  est la suivante : À l'étape initiale, on calcule la valeur moyenne de  $a + a^\dagger$  et  $\Omega$  dans le fondamental de l'amas avec un nombre de phonons maximal ( $n_{\max}$ ) donné ; ce dernier restera le même tout au long du calcul. La valeur initiale du décalage est donnée par cette valeur moyenne. La prochaine étape est de trouver le fondamental, la valeur moyenne  $\langle \tilde{a}^\dagger + \tilde{a} \rangle$  et le grand potentiel de

$$\hat{H}'_e - \mu \hat{N}' + \omega_D \tilde{a}^\dagger \tilde{a} + \frac{\omega_D \delta}{2} (\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger) - \lambda (\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger) \hat{\mathcal{O}} - \lambda \delta \hat{\mathcal{O}}.$$

L'énergie élastique  $\omega_D \delta^2/4$  est ajoutée au grand potentiel. On ajoute au décalage obtenu à l'étape initiale la valeur moyenne  $\langle \tilde{a}^\dagger + \tilde{a} \rangle$ . Si on note par  $\Omega_i$  la valeur du grand potentiel calculée à l'étape  $i$  et  $\Omega_{i-1}$  la même quantité mais à l'étape  $i-1$ , l'erreur relative est donnée par  $(\Omega_i - \Omega_{i-1})/\Omega_i$ . Tant et aussi longtemps que  $\langle \tilde{a}^\dagger + \tilde{a} \rangle$  ou l'erreur relative sur le grand potentiel sont supérieures à  $10^{-8}$  la procédure est poursuivie.

Dans le même ordre d'idées, en utilisant maintenant les équations (2.44) et (2.43) de concert avec le théorème d'Hellmann-Feynman, il vient que la dérivée du grand potentiel peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\frac{d\Omega}{d\delta} = \langle \Omega(\delta) | \frac{d\hat{K}'(\delta)}{d\delta} | \Omega(\delta) \rangle. \quad (2.45)$$

Cette dérivée doit être nulle en vertu du fait que le grand potentiel ne dépend pas de  $\delta$ . Ainsi,

$$0 = \frac{\omega_D}{2} \langle \tilde{a} + \tilde{a}^\dagger \rangle - \lambda \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle + \frac{\omega_D \delta}{2} \quad (2.46)$$

$$\Rightarrow \delta = \frac{2\lambda}{\omega_D} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle - \langle \tilde{a} + \tilde{a}^\dagger \rangle. \quad (2.47)$$

La valeur moyenne  $\langle \tilde{a} + \tilde{a}^\dagger \rangle$  étant petite, la quantité  $2\lambda \langle \hat{O} \rangle / \omega_D$  est une bonne estimation de la valeur finale du décalage.

## 2.4.2 Obtention de la fonction de Green I : algorithme de Lanczos

Le fondamental et l'énergie associée d'un amas donné étant connus, il est possible de calculer la fonction de Green à une particule d'un amas figurant dans le terme de droite de l'équation (2.18). Cette fonction s'écrit, pour un spin donné, comme<sup>5</sup> :

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(z) = G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) + G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',t}(z), \quad (2.48)$$

où

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) = \langle \Omega | c_{\mathbf{R}}(z - \hat{H}' + e_0)^{-1} c_{\mathbf{R}'}^\dagger | \Omega \rangle \quad (2.49)$$

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',t}(z) = \langle \Omega | c_{\mathbf{R}'}^\dagger(z + \hat{H}' - e_0)^{-1} c_{\mathbf{R}} | \Omega \rangle. \quad (2.50)$$

Les indices  $e$  et  $t$  signifient électron et trou, respectivement. Considérons tout d'abord le calcul de  $G'_{\mathbf{R}\mathbf{R},e}(z) = \langle \Psi_{\mathbf{R}} | \hat{A}^{-1} | \Psi_{\mathbf{R}} \rangle$ , où  $|\Psi_{\mathbf{R}}\rangle \equiv c_{\mathbf{R}}^\dagger | \Omega \rangle$  et  $\hat{A} \equiv (z - \hat{H}' + e_0)$  pour cette section. Pour évaluer cette quantité, on construit une base d'un sous-espace de Krylov de dimension  $M + 1$  en partant de :

$$|\phi_0\rangle \equiv \frac{|\Psi_{\mathbf{R}}\rangle}{\sqrt{\langle \Psi_{\mathbf{R}} | \Psi_{\mathbf{R}} \rangle}}. \quad (2.51)$$

Exprimée dans cette base,  $\hat{H}'$  a une forme tridiagonale comme en (2.37) ; la seule différence est que cette fois le secteur de l'espace de Hilbert est celui contenant  $N_\uparrow + 1$  électrons de spin  $\uparrow$  et  $N_\downarrow$  électrons de spin  $\downarrow$ . Insérant le projecteur sur le sous-espace de Krylov dans l'identité  $\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{I}$ , on obtient :

$$\sum_{n=0}^M A_{mn} [A^{-1}]_{nk} \approx \delta_{mk}, \quad (m, k = 0, 1, \dots, M). \quad (2.52)$$

Puisque  $G'_{\mathbf{R}\mathbf{R},e}(z) = \langle \Psi_{\mathbf{R}} | \Psi_{\mathbf{R}} \rangle [A^{-1}]_{00}$  dans la base de Krylov, nous posons  $k = 0$  dans l'équation précédente, ce qui donne un système linéaire d'équations couplées ( $x_i \equiv$

<sup>5</sup>Dans cette section  $z$  inclut le potentiel chimique. Pour faire plus général, nous aurions pu utiliser  $G'_{\alpha\alpha'}(z)$ , où  $\alpha$  inclut les indices de site, de spin et de bande.

$[A^{-1}]_{i0}$  :

$$\begin{aligned} x_0 A_{00} + x_1 A_{01} + \dots + x_M A_{0M} &\approx 1 \\ x_0 A_{10} + x_1 A_{11} + \dots + x_M A_{1M} &\approx 0 \\ &\vdots \\ x_0 A_{M0} + x_1 A_{M1} + \dots + x_M A_{MM} &\approx 0. \end{aligned}$$

La solution de ce système pour la quantité  $x_0$  est donnée par la règle de Cramer :

$$x_0 = \frac{\det B}{\det A},$$

où  $A$  est tridiagonale (*cf.* équations (2.32), (2.33 et (2.37) avec  $\hat{A}$  remplaçant  $\hat{H}'$ ), et  $B$  a les mêmes éléments que  $A$  sauf pour la première colonne qui est remplacée par le vecteur  $[1 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0]^T$ . Sachant que :

$$\det B = \det D_1 \quad (2.53)$$

$$\det A = A_{00} \det D_1 - A_{01}^2 \det D_2, \quad (2.54)$$

où  $D_n$  est la matrice obtenue en éliminant les  $n$  premières lignes et colonnes de  $A$ , on obtient facilement :

$$x_0 = \frac{1}{A_{00} - A_{01}^2 \det D_2 / \det D_1}. \quad (2.55)$$

Étant donné que  $\det D_n / \det D_{n-1}$  peut s'écrire sous la forme [36] :

$$\frac{1}{A_{n-1 \ n-1} - A_{n-1 \ n}^2 \det D_{n+1} / \det D_n}, \quad (2.56)$$

il vient, par un processus itératif, que [37]

$$G'_{\mathbf{RR},e}(z) = \langle \Psi_{\mathbf{R}} | \Psi_{\mathbf{R}} \rangle \frac{1}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - a_2 - \dots}}}, \quad (2.57)$$

où les  $a_i$  et  $b_i$  sont les éléments de matrice de  $\hat{H}'$  dans la base de Krylov formée à partir du vecteur en (2.51).

La représentation de la fonction de Green d'un amas par une fraction continue n'est

possible que dans le cas  $\mathbf{R} = \mathbf{R}'$ . Pour le calcul des autres cas, nous utilisons la quantité  $G_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}^+(z)$  définie par [37] :

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}^+(z) &= \langle \Omega | (c_{\mathbf{R}} + c_{\mathbf{R}'}) \hat{A}^{-1} (c_{\mathbf{R}} + c_{\mathbf{R}'})^\dagger | \Omega \rangle \\ G_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}^+(z) &= G'_{\mathbf{R}\mathbf{R},e}(z) + G'_{\mathbf{R}'\mathbf{R}',e}(z) + G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) + G'_{\mathbf{R}'\mathbf{R},e}(z). \end{aligned}$$

Cette quantité a une représentation en fraction continue. Puisque  $G'_{\mathbf{R}'\mathbf{R},e}(z) = G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z)$  (voir l'équation (2.65) et la discussion qui la suit), on obtient :

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) = \frac{1}{2} [G_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}^+(z) - G'_{\mathbf{R}\mathbf{R},e}(z) - G'_{\mathbf{R}'\mathbf{R}',e}(z)]. \quad (2.58)$$

Le calcul des  $G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z)$  se fait évidemment de la même façon.

Dans le cas où le fondamental est dégénéré, nous calculons les éléments matriciels de la fonction de Green à l'aide de l'expression :

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) = \frac{1}{2} \langle \Omega | c_{\mathbf{R}}(z - \hat{H}' + e_0)^{-1} c_{\mathbf{R}'}^\dagger | \Omega \rangle + \frac{1}{2} \langle \Omega' | c_{\mathbf{R}}(z - \hat{H}' + e_0)^{-1} c_{\mathbf{R}'}^\dagger | \Omega' \rangle, \quad (2.59)$$

où  $|\Omega\rangle$  et  $|\Omega'\rangle$  constituent une base du sous-espace propre associé à  $e_0$ . Cette expression se justifie de la façon suivante. Soit

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|\Omega\rangle\langle\Omega| + |\Omega'\rangle\langle\Omega'|),$$

la matrice densité du système dans son état fondamental. La moyenne de l'opérateur  $\hat{\mathcal{O}} = c_{\mathbf{R}}(z - \hat{H}' + e_0)^{-1} c_{\mathbf{R}'}^\dagger$  dans cet état est donné par (Tr est la trace)

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}]. \quad (2.60)$$

### 2.4.3 Obtention de la fonction de Green II : algorithme de Lanczos de bande

Il existe une autre procédure numérique donnant la fonction de Green à une particule d'un amas : l'algorithme de Lanczos de bande. Celui-ci est plus rapide que l'algorithme de Lanczos original, mais prend plus de mémoire. Il s'agit d'obtenir une forme en « bande » de l'hamiltonien, qui est ensuite diagonalisée afin d'en extraire les vecteurs propres  $|m\rangle$  ainsi que les valeurs propres associées.



dans la définition de  $G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'e}$  donnée en (2.49) :

$$\begin{aligned} G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'e} &\approx \sum_{i,j,m} \langle \Psi_{\mathbf{R}} | \phi_i \rangle \langle \phi_i | m \rangle (z - e_m + e_0)^{-1} \langle m | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \Psi_{\mathbf{R}'} \rangle \\ &= \sum_m \frac{Q_{\mathbf{R},m}^{(e)} Q_{\mathbf{R}',m}^{(e)*}}{z - \omega_m^{(e)}} \\ &= \left( Q^{(e)} \mathbf{g}^{(e)} Q^{(e)\dagger} \right)_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \end{aligned}$$

Dans cette dernière équation,  $Q^{(e)}$  est une matrice  $L \times N^{(e)}$  (spin up seulement<sup>7</sup>),  $\mathbf{g}^{(e)}$  est une matrice diagonale dont les éléments sont donnés par  $1/(z - \omega_m^{(e)})$ , avec  $\omega_m^{(e)} = e_m - e_0 > 0$  l'énergie des excitations élémentaires à une particule. La même opération pour la partie trou de la fonction de Green à une particule, avec pour différences que les vecteurs de Krylov appartiennent au secteur  $(N_{\uparrow} - 1, N_{\downarrow})$  et que  $\omega_n^{(t)} = e_0 - e_n < 0$ , donne :

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \approx \sum_m \frac{Q_{\mathbf{R},m}^{(e)} Q_{\mathbf{R}',m}^{(e)*}}{z - \omega_m^{(e)}} + \sum_n \frac{Q_{\mathbf{R},n}^{(t)} Q_{\mathbf{R}',n}^{(t)*}}{z - \omega_n^{(t)}}. \quad (2.64)$$

Il est possible [37] de mettre ce résultat sous une forme plus condensée :

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(z) \approx \sum_p \frac{Q_{\mathbf{R},p} Q_{\mathbf{R}',p}^*}{z - \omega_p} = \left( Q \mathbf{g}(z) Q^\dagger \right)_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \quad (2.65)$$

La matrice  $Q$  est obtenue en joignant la matrice  $Q^{(t)}$  à droite de la matrice  $Q^{(e)}$ . Les  $\omega_p$ , d'autre part, appartiennent à l'ensemble  $\{\omega_0^{(e)}, \dots, \omega_{N^{(e)}}^{(e)}, \omega_0^{(t)}, \dots, \omega_{N^{(t)}}^{(t)}\}$ . L'équation (2.65) est la représentation de Lehmann de la fonction de Green d'un amas. À noter que les éléments de la matrice  $Q$  peuvent être pris comme réels car la matrice représentant  $\hat{H}'$  dans la base  $|\alpha, n\rangle$  est réelle.

## Symétries

Tenir compte des symétries d'un corps physique constitue souvent une façon de simplifier le calcul de quantités physiques décrivant ce système. « La symétrie d'un corps est déterminée par l'ensemble des transformations qui amènent ce corps à coïncider avec lui-même [...] » [39] Le corps considéré ici est un amas. Nous nous bornerons à donner la façon la plus simple d'utiliser à profit les symétries de l'amas dans le calcul des fonctions

<sup>7</sup>Lorsque la partie down est prise en compte,  $Q^{(e)}$  devient une matrice  $2L \times N^{(e)}$ .

de Green.

Soit  $\mathcal{H}$  le groupe de symétrie de l'hamiltonien d'un amas. Par exemple, pour un amas  $2 \times 2$  avec des phonons du mode  $(\pi, \pi)$ , le groupe de symétrie est  $C_2$ , c'est-à-dire que l'amas se confond avec sa configuration initiale après une rotation de  $\pi$  radians. À cette rotation, on doit bien sûr ajouter l'omniprésente opération identité. Ce groupe a deux représentations irréductibles, correspondant respectivement aux états pairs ou impairs sous l'opération de rotation par  $\pi$ . Par ce fait, il est profitable d'utiliser des états de bases de l'espace d'Hilbert qui se transforment selon l'une des représentations irréductibles : l'élément de matrice de  $\hat{H}'$  par rapport à deux états appartenant à des représentations irréductibles différentes est nul.

Plus souvent qu'autrement, le fondamental d'un amas appartient à la représentation triviale (par exemple la représentation paire dans le cas du groupe  $C_2$ ). Une façon de tenir compte des symétries dans l'évaluation des fonctions de Green est de considérer des combinaisons d'opérateurs  $c_a$  ( $a =$  orbitale et/ou spin et/ou bande) se transformant comme les représentations irréductibles. Par exemple, pour le groupe  $C_2$ , prenons un amas de 4 sites 1D (numérotés de 1 à 4 de gauche à droite) avec des phonons du mode  $q = 0$ . La rotation par  $\pi$  équivaut à un miroir placé entre les sites 2 et 3 : 1 devient 4 et 2 devient 3 sous la transformation. Nous considérons les combinaisons [37]

$$\begin{aligned} c_1^{(A)} &= c_1 + c_4 & c_1^{(B)} &= c_1 - c_4 \\ c_2^{(A)} &= c_2 + c_3 & c_2^{(B)} &= c_2 - c_3 \end{aligned}$$

où  $A(B)$  est la représentation paire (impaire). Donc, clairement, si le fondamental  $\in A$  alors les combinaisons du type

$$\langle \Omega | c_i^{(A)} (z - \hat{H}' + e_0)^{-1} c_j^{(B)} | \Omega \rangle \quad (2.66)$$

sont nulles. Ce fait peut être utilisé avec profit pour réduire le nombre de fonctions de Green à évaluer [37].

## 2.5 Calcul des quantités physiques à partir de la fonction de Green

Ayant obtenu la fonction de Green (2.18) ou son analogue « périodisée » (2.24), il est temps de montrer comment calculer la moyenne d'observables. Seuls les opérateurs à un corps seront considérés - comme l'opérateur énergie cinétique ou l'opérateur nombre de particules - étant donné que nous ne calculons que des fonctions de Green à un corps.

L'expression générique d'un opérateur à un corps est la suivante :

$$\hat{O} = \sum_{a,b} s_{ab} c_a^\dagger c_b, \quad (2.67)$$

où les indices  $a$  et  $b$  représentent les indices de site et de spin :  $a = (\mathbf{r}, \sigma)$ . Par exemple, l'expression de  $s_{ab}$  pour l'opérateur énergie cinétique est :

$$s_{ab} = -t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (2.68)$$

Pour l'opérateur nombre, on a trivialement :  $s_{ab} = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta_{\sigma,\sigma'}$ . Le but du jeu est de calculer la valeur moyenne de  $\hat{O}$  par site, donc la densité moyenne

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{a,b} s_{ab} \langle c_a^\dagger c_b \rangle / N_s. \quad (2.69)$$

Nous voulons prouver l'équation suivante :

$$\langle c_a^\dagger c_b \rangle = \int_{C_-} \frac{dz}{2\pi i} \mathcal{G}_{ba}(z), \quad (2.70)$$

où  $C_-$  est un contour entourant la partie négative de l'axe des réels.

Le théorème des résidus stipule que pour un contour  $\gamma$  fermé :

$$\oint_{\gamma} f(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(f, a_k). \quad (2.71)$$

Les  $a_k$  sont les pôles situés à l'intérieur du contour  $\gamma$  et  $\text{Res}(f, a_k)$  sont les résidus à ces pôles. Pour des pôles simples, comme c'est le cas pour la fonction de Green :

$$\text{Res}(f, c) = \lim_{z \rightarrow c} (z - c) f(z). \quad (2.72)$$



On a ainsi

$$\begin{aligned} \int_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} \mathcal{G}_{ba}(z) &= \int_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} \left( \langle F|c_b \frac{1}{z - \hat{H} + E_{\text{fond.}}} c_a^\dagger |F\rangle + \langle F|c_a^\dagger \frac{1}{z + \hat{H} - E_{\text{fond.}}} c_b |F\rangle \right) \\ &= \int_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} \left( \sum_m \frac{\langle F|c_b|m\rangle \langle m|c_a^\dagger|F\rangle}{z - E_m + E_{\text{fond.}}} + \sum_n \frac{\langle F|c_a^\dagger|n\rangle \langle n|c_b|F\rangle}{z + E_n - E_{\text{fond.}}} \right), \end{aligned}$$

où les états  $|m\rangle$  (resp.  $|n\rangle$ ) sont les états propres de  $\hat{H}$  avec un électron de plus (resp. de moins) que le fondamental. Les pôles inclus dans le contour sont en  $z = E_{\text{fond.}} - E_n$ . Il vient donc :

$$\int_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} \mathcal{G}_{ba}(z) = \sum_n \langle F|c_a^\dagger|n\rangle \langle n|c_b|F\rangle = \langle c_a^\dagger c_b \rangle.$$

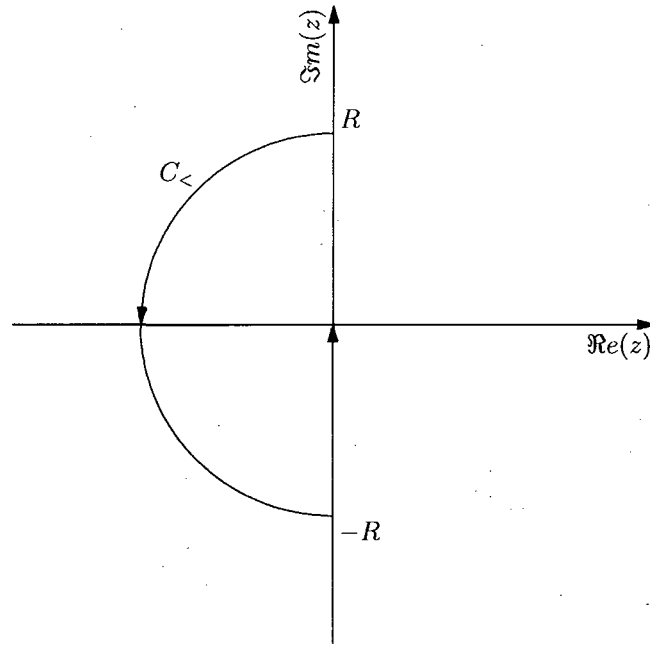
Ainsi, on arrive à l'expression suivante pour la densité moyenne d'un opérateur à un corps obtenue à partir de la fonction de Green :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{ab} \int_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} s_{ab} \mathcal{G}_{ba}(z) = \frac{1}{N_s} \int_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} \text{tr}\{s\mathcal{G}(z)\}. \quad (2.73)$$

En substituant la fonction de Green  $G$  pour  $\mathcal{G}$ , nous obtenons la densité moyenne dans le cadre de la CPT. Dans la représentation mixte (sites d'un amas et vecteur d'onde de la zone de Brillouin de  $\Gamma$ ), la trace devient, en utilisant le fait que  $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$  est diagonal par rapport aux indices de spin :

$$\begin{aligned} \text{tr}\{sG(z)\} &= \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'\sigma\sigma'} s_{\mathbf{r}\sigma,\mathbf{r}'\sigma'} G_{\mathbf{r}',\mathbf{r}}(z) \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= \frac{L^2}{N_s^2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'\tilde{\mathbf{k}}\tilde{\mathbf{k}}'\sigma} s_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{R}'\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}', z) e^{i\tilde{\mathbf{k}}'\cdot(\tilde{\mathbf{r}}-\tilde{\mathbf{r}})} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot(\tilde{\mathbf{r}}-\tilde{\mathbf{r}}')} \\ &= \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'\tilde{\mathbf{k}}\sigma} s_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{R}'\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}, z) \\ &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{tr}\{s(\tilde{\mathbf{k}})G(\tilde{\mathbf{k}}, z)\}. \end{aligned} \quad (2.74)$$

À la seconde ligne, nous nous sommes servis de la condition  $s_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}') = s_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) \delta_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}'}$ ; cela implique que  $s$  est invariant par translation dans le réseau  $\Gamma$ . C'est le cas pour la plupart des opérateurs (*cf.* les deux quantités données en exemple ci-dessus). Par le

FIGURE 2.3 – Contour d'intégration pour le calcul d'observables ( $R = \infty$ ).

remplacement de (3.13) dans (2.73), il résulte :

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \int_{C_<} \frac{dz}{2\pi i} \text{tr}\{s(\tilde{\mathbf{k}})G(\tilde{\mathbf{k}}, z)\}. \quad (2.75)$$

Numériquement, cette intégrale se calcule comme suit. Prenons pour le contour  $C_<$  celui illustré à la figure 2.3, où  $R$  doit être infini pour que le demi-cercle atteigne tous les pôles. Compte tenu du comportement asymptotique en  $1/z$  de  $G(z)$ , l'ajout de la quantité suivante à l'intégrande de (2.75) :

$$-\frac{\text{tr}[s(\tilde{\mathbf{k}})]}{z - p}, \quad (2.76)$$

a pour effet de changer le comportement asymptotique de l'intégrande de  $1/z$  à  $1/z^2$ . Ici,  $p$ , bien que quelconque, se doit d'être positif pour que le pôle soit exclu de la région délimitée par le contour. Cette modification a une grande importance puisqu'alors, par le lemme de Jordan, l'intégrale sur le demi-cercle est nulle. L'intégrale restante se fait le long de l'axe imaginaire et converge. Une division de cette dernière intégrale en deux parties — l'une au-dessus de l'axe imaginaire avec le changement de variable  $z \rightarrow ix$  et

l'autre au-dessous avec  $z \rightarrow -ix$ , alliée à la propriété d'hermiticité des fonctions de Green, c'est-à-dire que  $G(\tilde{\mathbf{k}}, z^*) = G^\dagger(-\tilde{\mathbf{k}}, z)$ , donne :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \int_0^\infty \frac{dx}{\pi} \Re e \left( \text{tr} \{ \mathbf{s}(\tilde{\mathbf{k}}) G(\tilde{\mathbf{k}}, ix) \} - \frac{\text{tr}[\mathbf{s}(\tilde{\mathbf{k}})]}{ix - p} \right), \quad (2.77)$$

à laquelle nous devons adjoindre la condition d'hermiticité de la matrice  $\mathbf{s}(\tilde{\mathbf{k}})$ .

Il nous reste à répondre à la question suivante : Comment calculer la valeur moyenne d'opérateurs phononiques, notamment l'opérateur nombre de phonons,  $a^\dagger a$ , et le déplacement,  $a + a^\dagger$ ? Il est impossible de le faire à l'aide de la fonction de Green des électrons, évidemment. C'est pourquoi il faut se rabattre sur la moyenne dans le fondamental d'un amas,  $\langle \hat{\mathcal{O}}_{ph} \rangle \equiv \langle \Omega | \hat{\mathcal{O}}_{ph} | \Omega \rangle$ , ce qui donne le nombre moyen de phonons par amas.

## 2.6 Courte discussion de la méthode

La théorie des perturbations interamas permet de traiter la classe d'hamiltoniens électroniques de la forme [32] :

$$\hat{H} = \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} \hat{H}'_{\tilde{\mathbf{r}}} + \sum_{\substack{\tilde{\mathbf{r}} \neq \tilde{\mathbf{r}}' \\ \mathbf{R}, \mathbf{R}'}} V_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}'+\mathbf{R}'} C_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}}^\dagger C_{\tilde{\mathbf{r}}'\mathbf{R}'}. \quad (2.78)$$

L'une des grandes utilités de cette méthode est qu'elle permet de calculer la fonction spectrale, qui donne la distribution de l'énergie  $\omega$  d'un électron de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  [40]. Elle s'obtient de la fonction de Green par

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -2 \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im m [G_{\text{CPT}}(\mathbf{k}, \omega + i\eta)]. \quad (2.79)$$

Par exemple, pour  $U = 0$ ,  $A(\mathbf{k}, \omega) \propto \delta(\omega - \epsilon(\mathbf{k}))$ . L'obtention de cette quantité permet une comparaison directe avec les expériences ARPES (spectroscopie de photoémission résolue en angle). Un exemple d'application est l'étude du pseudogap des supraconducteurs à haute température dopés aux trous et aux électrons [41].

Malgré le fait que la fonction de Green soit obtenue par un développement perturbatif à fort couplage, la CPT est exacte dans les deux limites  $U \rightarrow 0$  et  $t \rightarrow 0$ . En effet, la fonction de Green exacte de l'hamiltonien complet peut s'écrire à l'aide de l'équation de

Dyson (cf. section 3.1) :

$$\mathcal{G}^{-1} = \mathcal{G}_0^{-1} - \Sigma, \quad (2.80)$$

où  $\Sigma$  est la self-énergie exacte de l'hamiltonien et  $\mathcal{G}_0^{-1}$  est le propagateur libre. À la section 3.1, il est montré que  $\mathcal{G}_0^{-1}$  est donné par :

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, z) = z + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) \quad (2.81)$$

dans l'espace de Fourier. Dans le cas  $U = 0$ , la self-énergie est nulle car il n'y pas d'interaction, d'où :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{k}, z) &= z + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) \\ &= z + \mu - \sum_{\mathbf{r}} t_{0\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ &= z + \mu - \sum_{\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}} (t_{0\mathbf{R}} \delta_{0\bar{\mathbf{r}}} + V_{0\bar{\mathbf{r}}+\mathbf{R}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (2.82)$$

où la seconde ligne vient de l'équation suivant (A.29) de l'annexe A. La parenthèse de la troisième ligne représente quant à elle la séparation de la matrice de sauts entre les sauts intraamas et interamas. Puisque  $U = 0$ , la fonction de Green des amas est donnée par le propagateur libre défini sur les amas, c'est-à-dire que  $G'^{-1}(\mathbf{k}, z) = z + \mu - \sum_{\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}} t_{0\mathbf{R}} \delta_{0\bar{\mathbf{r}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . En incluant la TF des amplitudes de saut interamas,  $V(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} V_{0\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , le résultat voulu s'ensuit :

$$\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{k}, z) = G'^{-1}(\mathbf{k}, z) - V(\mathbf{k}). \quad (2.83)$$

Dans la limite où  $t = 0$ , le propagateur libre du réseau (c'est-à-dire de l'hamiltonien complet) vaut  $\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, z) = z + \mu$ . Puisque les amas sont trivialement découplés, la self-énergie exacte est diagonale par rapport aux indices d'amas. Cela veut dire que la self-énergie du réseau est la self-énergie des amas. On peut donc écrire :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{k}, z) &= z + \mu - \Sigma(\mathbf{k}, z) \\ &= z + \mu - \Sigma'(\mathbf{k}, z) \\ &= G'^{-1}(\mathbf{k}, z), \end{aligned} \quad (2.84)$$

où, à la troisième étape, nous avons utilisé l'équation de Dyson pour la fonction de Green de l'amas.

## Chapitre 3

# Théorie des perturbations interamas variationnelle

La théorie des perturbations interamas se révèle insuffisante en ce qui concerne le traitement des états à symétrie brisée, telles les ondes de densité de charge et la supraconductivité. Dans ces cas, nous utilisons une extension de la CPT, l'approximation interamas variationnelle (VCPT ou encore VCA, pour Variational Cluster Approximation) due à M. Potthoff [42]. Elle émerge de l'assertion que le grand potentiel thermodynamique du réseau est le point stationnaire d'une fonctionnelle de la self-énergie. Dans ce traitement, l'approximation est faite au niveau du choix des self-énergies considérées. Dans notre cas, c'est la self-énergie des amas découplés qui est retenue.

Résumons l'approche de cette méthode. Un terme, devant pousser le système vers un état à symétrie brisée donné, est ajouté à l'hamiltonien d'un amas,  $\hat{H}'$ . Nous écrivons ce terme de façon générale comme suit :

$$\hat{H}'(X) = X\hat{O}_X, \quad (3.1)$$

où  $X$  est un paramètre du type champ de Weiss et  $\hat{O}_X$  est un opérateur électronique. Par exemple, pour l'onde de densité de charge de vecteur d'onde  $\pi$  dans un système unidimensionnel, nous avons  $X = W$  et  $\hat{O}_W = \hat{n}_1 - \hat{n}_2 + \hat{n}_3 - \dots - \hat{n}_L$ . Ensuite, le grand potentiel thermodynamique et la fonction de Green (resp.  $\Omega'$  et  $G'$ ) associés à l'hamiltonien d'un amas sont obtenus pour plusieurs valeurs de  $X$ . Ces quantités sont utilisées pour calculer une approximation du grand potentiel thermodynamique du réseau,  $\Omega$ . Finalement, on trouve le point stationnaire de ce potentiel par rapport au champ de

Weiss. Si  $\Omega(X = 0) - \Omega(X = X_0) > 0$ , c'est-à-dire si la solution à symétrie brisée est plus favorable énergétiquement que l'état plus symétrique, nous conservons la valeur non nulle du champ de Weiss. En ce point stationnaire, la valeur de la fonctionnelle donne le grand potentiel approximatif du système.

Pour décrire le traitement VCA des états à symétrie brisée, nous explorerons en premier le concept de self-énergie, laquelle sera utilisée dans l'expression de la fonctionnelle dont on trouvera le point stationnaire. Puis, nous verrons comment écrire le grand potentiel thermodynamique à température nulle en fonction de la fonction de Green et de cette self-énergie. Finalement, le processus de « stationnarisation » sera décrit en détail.

### 3.1 Self-énergie

Afin de comprendre la signification et la portée du concept de self-énergie, commençons avec un système très simple : un gaz d'électrons sans interaction en trois dimensions. Son hamiltonien (grand canonique) est donné par

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) c_{\sigma}(\mathbf{k}) \quad (\epsilon(\mathbf{k}) = k^2/2m - \epsilon_F), \quad (3.2)$$

avec un fondamental répondant à l'équation  $\hat{n}_{\sigma}(\mathbf{k})|F\rangle = \theta(-\epsilon(\mathbf{k}))|F\rangle$ , c'est-à-dire que les états (ondes planes) sont occupés jusqu'au niveau de Fermi. La fonction de Green est proportionnelle à l'amplitude de probabilité que le système dans l'état  $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(0)|F\rangle$  au temps  $t = 0$  se retrouve dans l'état  $c_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger}(t)|F\rangle$  au temps subséquent  $t$ , comme mentionné à la section 2.1. En raison de l'absence d'interactions, un électron en  $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(0)|F\rangle$  ne peut sortir de cet état. On a ainsi :

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', t) = \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, t) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'}. \quad (3.3)$$

En prenant la transformée de Fourier en temps de cette expression, on trouve facilement

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega + i\eta)t} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\omega + i\eta - \epsilon(\mathbf{k})}. \quad (3.4)$$

L'inverse de la partie infinitésimale  $\eta$  est proportionnelle au temps de vie de l'électron ajouté dans l'état  $\mathbf{k}\sigma$ ; il est infini puisqu'il n'y a pas de diffusion. Les pôles de cette fonction de Green donnent le spectre d'énergie du système.

Si on incorpore des interactions à deux corps entre les électrons (force de Coulomb, interaction due aux phonons, etc.), les ondes planes ne sont plus les états propres des particules et celles-ci peuvent alors diffuser vers d'autres états que leur état initial : la mer de Fermi se met à écumer. Malgré les interactions, il est possible d'écrire la partie diagonale de la fonction de Green de ce système. C'est fait à l'aide de l'équation de Dyson [43] :

$$\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega). \quad (3.5)$$

$\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$  est la self-énergie (irréductible). Celle-ci est complexe et peut donc s'écrire  $\Sigma = \Sigma_R + i\Sigma_I$ . Pour trouver sa signification, on remplace tout d'abord l'expression pour le propagateur libre  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \omega)$  dans l'expression précédente, pour donner :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (3.6)$$

où la petite partie infinitésimale  $\eta$  a été négligée par rapport à  $\Sigma_I$ . Les pôles de cette fonction donne le spectre énergétique en résolvant l'équation auto-cohérente :

$$\omega = \epsilon(\mathbf{k}) + \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega) + i\Sigma_I(\mathbf{k}, \omega). \quad (3.7)$$

On suppose  $\Sigma_I$  petit par rapport à  $\Sigma_R$ . Au premier ordre, on obtient [43] :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{\zeta(\mathbf{k})}{\omega - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + i\tau^{-1}(\mathbf{k})}, \quad (3.8)$$

où

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) + \Sigma_R(\mathbf{k}, \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})) \quad (3.9)$$

$$\tau^{-1}(\mathbf{k}) = -\frac{\Sigma_I(\mathbf{k}, \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}))}{1 - \left. \frac{\partial \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}} \quad (3.10)$$

$$\zeta(\mathbf{k}) = \frac{1}{1 - \left. \frac{\partial \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}} \quad (3.11)$$

En comparant cette expression avec celle de la fonction de Green sans interaction, il est possible de dégager la signification de la self-énergie : sa partie imaginaire correspond *grosso modo* à l'inverse du temps de vie de l'électron dans l'état  $\mathbf{k}\sigma$  ajouté au système ; la partie réelle, pour sa part, représente au premier ordre le décalage en énergie par rapport au spectre des électrons indépendants. Le résidu des fonctions de Green représente la

valeur de la discontinuité dans la fonction de distribution au niveau de Fermi. Elle vaut 1 pour le cas sans interaction car  $n_\sigma(\mathbf{k}) = \theta(-\epsilon(\mathbf{k}))$ . Avec les interactions, la discontinuité diminue de 1 à  $\zeta(\mathbf{k}) < 1$ , la dérivée de  $\Sigma_R$  par rapport à  $\omega$  étant négative — des électrons de plus haute fréquence ont moins de temps pour interagir, grossièrement parlant [43].

À noter pour finir qu'une telle façon d'écrire la fonction de Green n'est possible que dans les cas où les interactions ne sont pas trop fortes, c'est-à-dire pour lesquels le temps de vie des excitations élémentaires est suffisamment grand. L'équation de Dyson, pour sa part, est rigoureusement exacte et sert de définition de la self-énergie.

## 3.2 Fonctionnelle de Luttinger-Ward et grand potentiel thermodynamique

Pour un système donné à température, potentiel chimique et volume fixés, la quantité thermodynamique d'importance est le grand potentiel,  $\Omega$ . À température nulle, celui-ci est donné par  $E_0 - \mu\langle N \rangle$ , où  $E_0$  est l'énergie du fondamental à  $\mu$  fixé et  $\langle N \rangle$  est le nombre moyen d'électrons. (À noter que le potentiel chimique des phonons n'intervient pas car leur nombre n'est conservé en aucun temps.) L'autre quantité sous observation est la fonction de Green. La fonctionnelle<sup>1</sup> de Luttinger-Ward (FLW),  $\hat{\Phi}_U[\cdot]$ , fait le lien entre les quantités statiques (le grand potentiel et ses dérivées) et dynamiques (la fonction de Green et la self-énergie) du système. Pour l'hamiltonien  $\hat{H}(t, U) = \hat{H}(t) + \hat{H}(U)$ ,  $t$  et  $U$  représentant respectivement les paramètres à un corps ( $t$  et  $\omega_D$ ) et à deux corps ( $U$  et  $\lambda$ ), le grand potentiel du système est donné par [44] :

$$\Omega_{t,U} = \Phi_{t,U} - \text{Tr}[\Sigma_{t,U}\mathcal{G}_{t,U}] + \text{Tr}[\ln(\mathcal{G}_{t,U})], \quad (3.12)$$

où  $\Sigma_{t,U}$ ,  $\mathcal{G}_{t,U}$  et  $\Phi_{t,U}$  sont respectivement la self-énergie exacte (une matrice), la fonction de Green exacte (aussi une matrice) et la FLW évaluée à la fonction de Green exacte (un nombre),  $\Phi_{t,U} = \hat{\Phi}_U[\mathcal{G}_{t,U}]$ . La trace (Tr) est prise sur les indices de sites, de spins et sur les fréquences, soit, au zéro absolu :

$$\text{Tr}[\mathbf{A}] = \int_{C_<} \frac{dz}{2\pi i} \sum_{r\sigma} \mathbf{A}_{r\sigma,r\sigma} = \int_{C_<} \frac{dz}{2\pi i} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr}[\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{k}})], \quad (3.13)$$

<sup>1</sup>Suivant Potthoff [44], nous affublerons les fonctionnelles d'un accent circonflexe. De même, les dépendances explicites seront mises en indices.



où le contour  $C_<$  est celui de la figure 2.3 et  $A$  est une matrice générique  $2N \times 2N$ .  $\text{tr}$  dénote la trace sur les sites d'un amas et sur les spins (la matrice  $A$  est supposée diagonale en  $\bar{\mathbf{k}}$ ). Le logarithme népérien, quant à lui, est obtenu en calculant sa série de Taylor (l est la matrice identité) :

$$\ln(\mathcal{G}) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - \mathcal{G})^n}{n}. \quad (3.14)$$

La fonction de Green et la self-énergie exactes sont reliées par l'équation de Dyson :

$$\mathcal{G}_{t,U}^{-1} = \mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t,U}, \quad (3.15)$$

où  $\mathcal{G}_{t,0}$  est la fonction de Green sans interaction de l'hamiltonien  $\hat{H}(t, U)$ .

La FLW possède en particulier deux propriétés qui seront utiles pour la suite. La première est que sa dérivée fonctionnelle<sup>2</sup> par rapport à la fonction de Green donne la self-énergie, dépendant fonctionnellement de la fonction de Green :

$$\frac{\delta \hat{\Phi}_U[\mathbf{G}]}{\delta \mathbf{G}} = \hat{\Sigma}_U[\mathbf{G}] \quad \left( \frac{\delta \hat{\Phi}_U[\mathbf{G}]}{\delta G_{ij}} = \hat{\Sigma}_{ji}[\mathbf{G}] \right). \quad (3.16)$$

Dans cette expression,  $\mathbf{G}$  est une variable libre, c'est-à-dire qu'elle n'est pas liée à la self-énergie *via* l'équation de Dyson (dans ce qui suit, les variables libres matricielles seront dénotées par des majuscules grasses).  $\mathbf{G}$  est une fonction ayant tous les attributs analytiques d'une fonction de Green. La fonctionnelle  $\hat{\Sigma}[\mathbf{G}]$  est telle que  $\hat{\Sigma}[\mathcal{G}_{t,U}] = \Sigma_{t,U}$ .

La seconde propriété stipule que la FLW est universelle, c'est-à-dire qu'elle ne dépend pas explicitement du paramètre à un corps  $t$ . Donc, deux hamiltoniens partageant la même interaction  $U$  partagent également la même FLW (d'où l'écriture du paramètre  $U$  en indice de la FLW). Ce fait devient évident en considérant sa définition diagrammatique (à couplage faible) présentée à la figure 3.1. Les lignes doubles y représentent la fonction de Green avec interaction, alors que les pointillées constituent les interactions. La FLW ne dépend du paramètre à un corps que lorsqu'elle est évaluée à la fonction de Green

<sup>2</sup>La dérivée d'une fonctionnelle  $F$  est formellement définie par :

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f(x)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f + \epsilon \delta_x] - F[f]}{\epsilon},$$

où  $\delta_x(x') = \delta(x - x')$ . Cette définition n'est pas très utile quand vient le temps de dériver une fonctionnelle donnée ; à la place, on développe  $F[f + \epsilon g]$ , avec  $g = g(x)$  une fonction régulière quelconque, autour de  $f$  et on garde le terme de premier ordre.

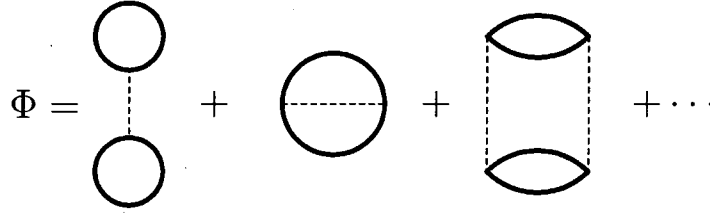


FIGURE 3.1 – Définition diagrammatique de la fonctionnelle de Luttinger-Ward pour un système purement électronique ( $\lambda = 0$ ).

exacte de l'hamiltonien  $\hat{H}(t, U)$ .

### 3.3 Fonctionnelle de la self-énergie

Une procédure permettant de donner une bonne approximation du grand potentiel thermodynamique du système est requise. Le point de départ est le fait que le grand potentiel véritable du système peut s'obtenir du point stationnaire d'une fonctionnelle de  $\mathbf{G}$  [45] :

$$\hat{\Omega}_{t,U}[\mathbf{G}] = \hat{\Phi}_U[\mathbf{G}] - \text{Tr}[(\mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \mathbf{G}^{-1})\mathbf{G}] + \text{Tr}[\ln(\mathbf{G})]. \quad (3.17)$$

Dans cette expression,  $\mathcal{G}_{t,0}^{-1} = (z + \mu - t)$ , avec  $(t)_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = -t\delta_{\langle\mathbf{r}\mathbf{r}'\rangle}$  la matrice de saut. En utilisant la relation (3.16), il vient en dérivant l'expression de la fonctionnelle :

$$\frac{\delta \hat{\Omega}_{t,U}[\mathbf{G}]}{\delta \mathbf{G}} = \hat{\Sigma}_U[\mathbf{G}] - \mathcal{G}_{t,0}^{-1} + \mathbf{G}^{-1}. \quad (3.18)$$

Évaluée à la fonction de Green exacte, le côté droit de cette équation donne zéro en vertu de l'équation de Dyson. En ce point stationnaire, la fonctionnelle (3.17) donne le grand potentiel exact.

Comment utiliser ce principe variationnel ? La principale difficulté est que la FLW est définie comme une série infinie de diagrammes irréductibles à deux particules, série ne pouvant être tronquée dans le cas présent : le couplage  $U$  est supposé fort. La façon de s'en tirer est d'obtenir une expression exacte pour la FLW, mais sur un espace restreint de fonctions de Green. Dans ce but, Potthoff *et al.* [42, 46] ont transformé la fonctionnelle (3.17) en une fonctionnelle de la self-énergie. En supposant que la relation (3.16) puisse être inversée localement pour obtenir la fonctionnelle  $\hat{\mathbf{G}}_U[\Sigma]$ — c'est le cas si le système

n'est pas au point critique d'une transition de phase [44] —, il vient :

$$\hat{\Omega}_{t,U}[\Sigma] = \hat{F}_U[\Sigma] - \text{Tr}[\ln(\mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma)]. \quad (3.19)$$

$\hat{F}_U[\Sigma]$  est la transformée de Legendre de la FLW :

$$\hat{F}_U[\Sigma] = \hat{\Phi} [\hat{\mathbf{G}}_U[\Sigma]] - \text{Tr} [\Sigma \hat{\mathbf{G}}_U[\Sigma]], \quad (3.20)$$

et il a été fait usage de la relation fonctionnelle [44]

$$\hat{\mathbf{G}}_U[\Sigma] = (\mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma)^{-1}. \quad (3.21)$$

À noter que la fonctionnelle  $\hat{F}_U[\Sigma]$  est universelle au même titre que la FLW. Aussi, puisque

$$\frac{\delta \hat{F}_U[\Sigma]}{\delta \Sigma} = -\hat{\mathbf{G}}_U[\Sigma], \quad (3.22)$$

il résulte que la fonctionnelle de self-énergie (3.19) est stationnaire à la self-énergie exacte du système.

La self-énergie exacte de l'hamiltonien du réseau  $\hat{H}(t, U)$  n'est bien entendu pas connue. Ce sera la self-énergie d'un système dit de référence qui sera utilisée, nommément l'hamiltonien des amas découplés (ou, ce qui revient au même, l'hamiltonien d'un amas,  $\hat{H}'(t', U)$ ), auquel seront ajoutées les composantes poussant le système vers un état à symétrie brisée donné. Au total, l'hamiltonien  $\hat{H}'(t', U) + \hat{H}'(X)$  partage la même interaction que l'hamiltonien véritable et, du fait de la propriété d'universalité, la même FLW.

Évaluée à la self-énergie exacte des amas découplés  $\Sigma_{t',X,U}$ , la fonctionnelle (3.19), alliée à (3.21), donne :

$$\hat{\Omega}_{t',X,U}[\Sigma_{t',X,U}] = \hat{F}_U[\Sigma_{t',X,U}] - \text{Tr}[\ln(\mathcal{G}_{t',X,0}^{-1} - \Sigma_{t',X,U})], \quad (3.23)$$

ce qui permet d'extraire  $\hat{F}_U[\Sigma_{t',X,U}] = \hat{\Omega}_{t',X,U}[\Sigma_{t',X,U}] + \text{Tr}[\ln(\mathcal{G}_{t',X,0}^{-1} - \Sigma_{t',X,U})]$ . Il s'agit d'une approximation de  $\hat{F}_U[\Sigma_{t,X,U}]$ . Si on réinjecte cette quantité dans (3.19), il est possible d'écrire l'approximation suivante pour le grand potentiel du réseau :

$$\hat{\Omega}_{t,U}[\Sigma_{t',X,U}] = \hat{\Omega}_{t',X,U}[\Sigma_{t',X,U}] + \text{Tr}[\ln(\mathcal{G}_{t',X,0}^{-1} - \Sigma_{t',X,U})] - \text{Tr}[\ln(\mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t',X,U})]. \quad (3.24)$$

On reconnaît en  $\mathcal{G}_{t,X,0}^{-1} - \Sigma_{t',X,U}$  la fonction de Green (inverse) des amas découplés,  $G'^{-1}$ . En notant  $\hat{\Omega}_{t',X,U}[\Sigma_{t',X,U}] \equiv \frac{N}{L}\Omega'$ , où  $\Omega'$  est le grand potentiel calculé pour un amas, il vient :

$$\hat{\Omega}_{t,U}[\Sigma_{t',X,U}] = \frac{N}{L}\Omega' + \text{Tr}[\ln(G'^{-1})] - \text{Tr}[\ln(\mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t',X,U})]. \quad (3.25)$$

Également, remarquons que

$$\mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t',X,U} = z + \mu - t' - V - \Sigma_{t',X,U} \quad (3.26)$$

$$= G'^{-1} - V, \quad (3.27)$$

donne la fonction de Green de la CPT (2.7). D'après les propriétés de la trace ( $\text{Tr}(A+B) = \text{Tr}A + \text{Tr}B$ ) et du logarithme d'une matrice inversible ( $A^{-1} = e^{-\ln(A)}$ ), et en utilisant pour la trace (3.13), il vient finalement pour le grand potentiel du réseau par amas (en gardant la même notation pour le potentiel) :

$$\hat{\Omega}_{t,U}[\Sigma_{t',X,U}] = \Omega' - \frac{L}{N} \int_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \ln \left\{ \det \left[ 1 - V(\tilde{\mathbf{k}})G'(\tilde{\mathbf{k}}, z) \right] \right\}, \quad (3.28)$$

où nous avons aussi utilisé l'équivalence  $\text{tr} \ln \equiv \ln \det$  ( $\det = \text{déterminant}$ ). L'utilisation de cette équivalence est davantage une question d'esthétisme que de pragmatisme, quoique le logarithme d'un scalaire (ici, le déterminant) est plus facile à imaginer que le logarithme d'une matrice.

Selon le principe variationnel de Potthoff, une approximation du grand potentiel thermodynamique est donnée par la valeur de la fonctionnelle (3.28) au point  $X = X_0$  telle que :

$$\frac{\partial \hat{\Omega}_{t,U}[\Sigma_{t',X,U}]}{\partial X} \Big|_{X=X_0} = 0. \quad (3.29)$$

L'extension à plusieurs paramètres variationnels concourants est triviale.

### 3.4 Champs de Weiss

Dans ce mémoire, nous étudions, en premier lieu, les ondes de densité de charge (ODC) dans un système unidimensionnel décrit par l'hamiltonien de Holstein-Hubbard. En second lieu, ce sera la supraconductivité de type  $s$  dans un système bidimensionnel d'électrons et de phonons interagissant *via* le modèle de Holstein ( $U = 0$ ). Pour les ODC,

le terme ajouté à l'hamiltonien d'un amas, dit terme de Weiss, est :

$$\hat{H}'(W) = W\hat{O}_W = W \sum_{\mathbf{R}} \hat{n}_{\mathbf{R}} e^{i\pi \cdot \mathbf{R}}. \quad (3.30)$$

Pour la supraconductivité, c'est le terme

$$\hat{H}'(S) = S\hat{O}_S = S \sum_{\mathbf{R}} \left( c_{\mathbf{R}\uparrow} c_{\mathbf{R}\downarrow} + c_{\mathbf{R}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\uparrow}^\dagger \right) \quad (3.31)$$

qui poussera les électrons à s'apparier, et le traitement par la VCA nous dictera si le système supporte bien cet appariement.

Un mot sur la notation et la terminologie. À chaque fois que nous parlerons d'un paramètre d'ordre, il s'agira de la densité moyenne de l'opérateur  $\hat{O}_X$  — telle que calculée par la méthode exposée à la section 2.5 — avec le paramètre  $X$  fixé à sa valeur d'équilibre. Le paramètre d'ordre relié à l'opérateur  $\hat{O}_X$  sera noté  $\langle X \rangle$ . La valeur d'équilibre du champ de Weiss,  $X_0$ , sera notée sur les figures par  $X$ , de façon à alléger la notation. Lorsque cette valeur est nulle, nous dirons qu'il s'agit de la solution normale ; si elle est non nulle, il s'agira de la solution ordonnée ou à symétrie brisée.

## 3.5 Courte discussion de la méthode

### 3.5.1 Limite thermodynamique

L'impossibilité d'une brisure de symétrie pour un système fini (*cf.* section 1.3) justifie, en quelque sorte, l'addition du terme de Weiss à l'hamiltonien des amas découplés. Sans ce terme, jamais un état à symétrie brisée ne peut surgir, et nous retombons sur la CPT. Dans la limite thermodynamique, néanmoins, il ne doit rester aucun vestige de cet ajout, mise à part l'existence d'un paramètre d'ordre non nul. Pour illustrer ce point, définissons une quantité,  $F \in [0, 1]$ , appelée facteur d'échelle, représentant la qualité d'un amas. À la limite thermodynamique,  $F = 1$  et les amas sont de tailles infinies ; le nombre de liens interamas est nul. En  $D$  dimensions pour des sauts aux plus proches voisins seulement, le facteur d'échelle peut s'écrire

$$F = \frac{\mathcal{L}}{DL}, \quad (3.32)$$

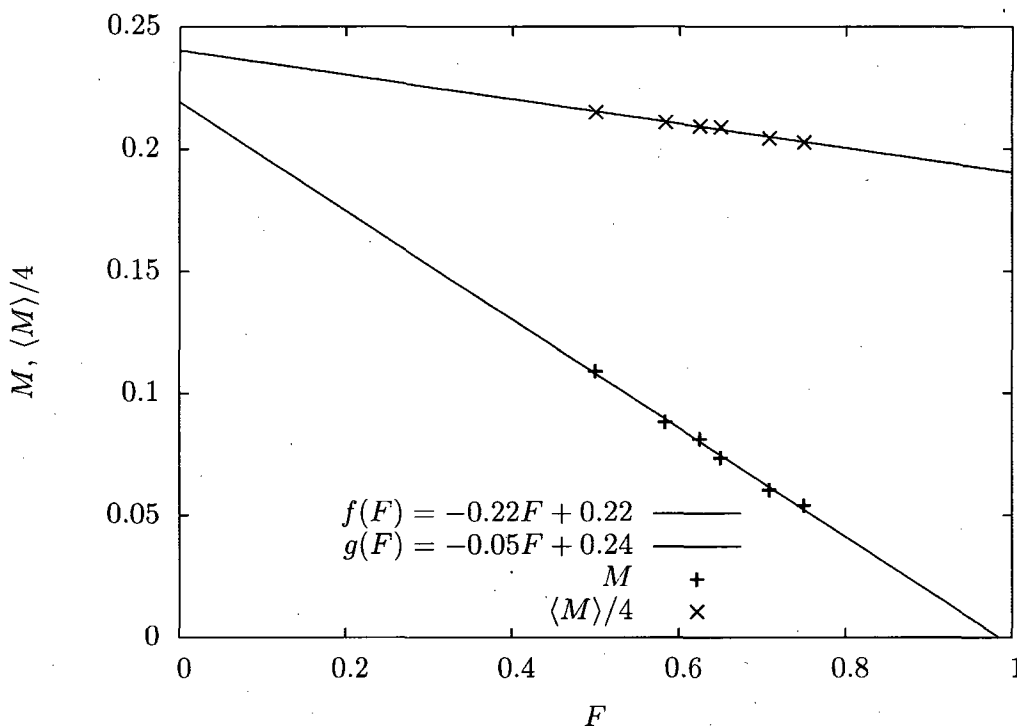


FIGURE 3.2 – Champ de Weiss  $M$  et paramètre d'ordre  $\langle M \rangle$  (divisé par 4) antiferromagnétiques à l'équilibre pour le modèle de Hubbard demi-rempli avec  $U = 16$  en fonction du facteur d'échelle. Les amas utilisés sont, en partant du point le plus à gauche :  $2 \times 2$ ,  $2 \times 3$ ,  $2 \times 4$ ,  $B10$ ,  $3 \times 4$  et  $4 \times 4$ .  $B10$  signifie un amas de 10 sites et sa forme est donnée à la figure 1 de la référence [37]. La figure est adaptée de cette même référence.

où  $\mathcal{L}$  est le nombre de liens intraamas. En particulier, pour des amas  $x \times y = L$ , il vient :

$$F = \frac{y(x-1) + x(y-1)}{2xy}, \quad (3.33)$$

de sorte que

$$\lim_{x,y \rightarrow \infty} F = 1. \quad (3.34)$$

Pour les amas unidimensionnels, on prendrait plutôt  $F = (L-1)/L = 1 - 1/L$ .

La figure 3.2 présente le comportement dans la limite thermodynamique du champ de Weiss et du paramètre d'ordre antiferromagnétiques pour le modèle de Hubbard. Le système est à demi rempli et ces quantités sont données en fonction du facteur d'échelle

pour plusieurs types d'amas 2D. Dans la limite  $F = 1$ , le champ de Weiss  $M$  tend vers (presque) zéro, alors que le paramètre d'ordre reste fini et non nul. C'est la signature d'une brisure spontanée de la symétrie (dans ce cas-ci des symétries, car pour l'antiferromagnétisme, ce sont à la fois la symétrie de rotation dans l'espace des spins et la symétrie de translation du réseau qui sont brisées).

### 3.5.2 Détermination des points stationnaires de la fonctionnelle

La fonctionnelle de Potthoff est calculée numériquement pour un nombre fini de valeurs du(des) paramètre(s) variationnels, et il nous incombe de trouver les points stationnaires. Ceux-ci peuvent être des extrema locaux ou absolus ou des points de selle et peuvent être trouvés par l'algorithme de Newton-Raphson. Également, la méthode du gradient conjugué peut être utilisée avec profit lorsque le point stationnaire est un minimum.

## Chapitre 4

# Ondes de densité de charge en 1D

Ce chapitre présente les résultats obtenus de l'étude par la VCA des ondes de densité de charge (ODC) pour le modèle de Holstein-Hubbard 1D à demi rempli. Ce système a fait l'objet de maintes publications : [3], [4], [5], [6], [7], etc. À titre d'exemple, Hardikar *et al.* obtiennent les diagrammes de phase illustrés à la figure 4.1 pour  $\omega_D = 0.5, 1, 5$ . Comme pressenti à la section 1.4, les phases isolantes de Peierls (ODC) et de Mott occupent une majeure partie de ces diagrammes de phase. Près de la ligne tiretée correspondant à la condition  $U_{\text{eff}} = U - 2g^2/\omega_D = 0$ , ils trouvent également une phase métallique (étiquetée *I* sur la figure). L'étendue de celle-ci augmente pour une fréquence de Debye croissante. Pour  $\omega_D = 5$ , la phase métallique empiète de façon significative sur l'isolant de Peierls, alors que la phase de Mott reste imperturbée.

La phase métallique n'est cependant pas omniprésente dans les articles susmentionnés. Le tableau 4.1 résume l'état des choses. Dans ce chapitre, nous nous proposons donc d'obtenir le diagramme de phase de ce système par la VCA dans l'approximation unimodale.

Compte tenu de l'instabilité à  $2k_F$  d'un système unidimensionnel, nous choisissons le mode de phonons  $q = \pi$ . La taille des amas varie entre  $L = 2$  et  $L = 10$ . Ces valeurs de  $L$  sont choisies de façon à ce qu'un amas contienne un nombre entier de longueurs d'onde. À des fins de comparaison avec la littérature existante et pour favoriser l'occurrence de la phase métallique, les paramètres  $U$  et  $\omega_D$  auront les valeurs suivantes :  $U \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6\}$  et  $\omega_D = 5$ . Les gammes de valeurs retenues pour  $\lambda$  dépendent, quant à elles, des valeurs données aux autres paramètres. Il importe seulement que la plage de valeurs soit suffisamment étendue pour bien représenter les phases du systèmes. Aussi, poser  $\mu = U/2$  assure, d'après la sous-section 1.2.2, que le système est à demi rempli.



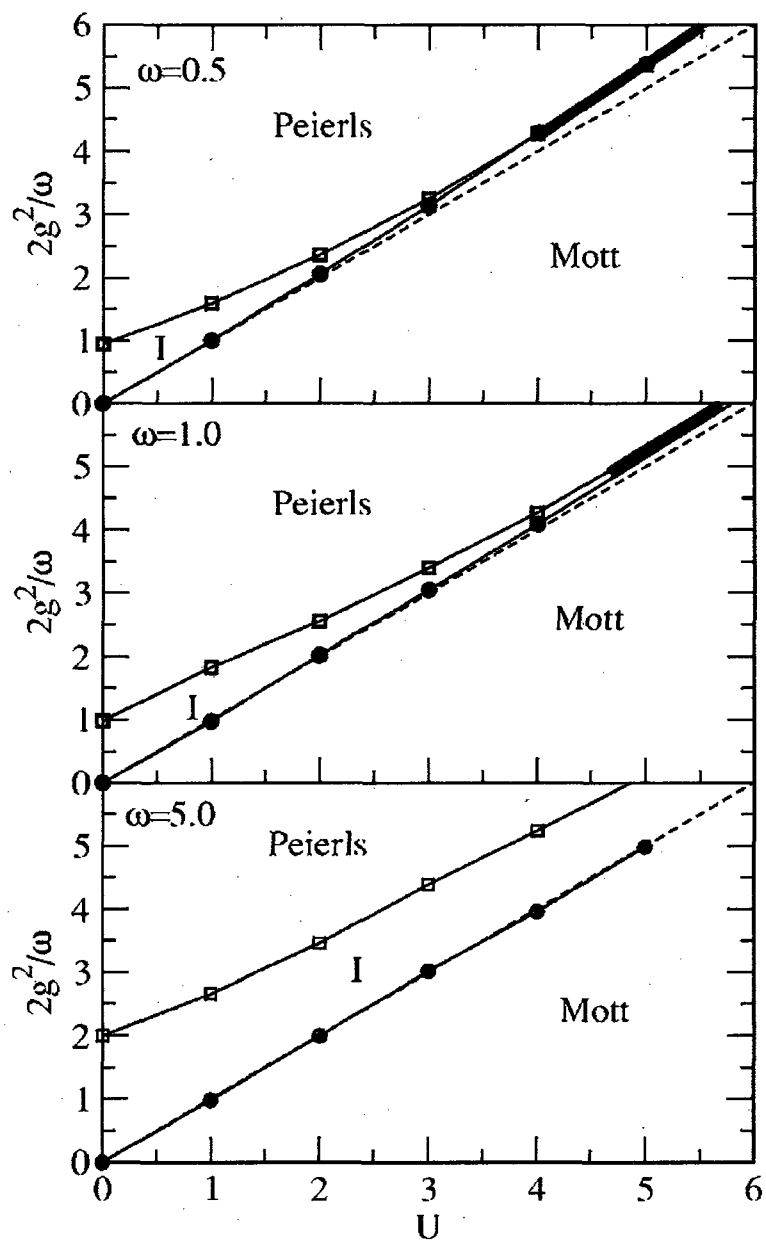


FIGURE 4.1 – Diagramme de phase pour le modèle de Holstein-Hubbard unidimensionnel (local) à demi rempli tel qu’obtenu par Hardikar *et al.* [47]. La lettre *I* dénote la phase intermédiaire métallique.

Méthode	Auteurs	Phase métallique
DMRG	Tezuka [48], Fehske [6]	Présente
LF	Takada [23]	Présente
SSE QMC	Hardikar [47]	Présente
MFRG	Tam [7]	Absente

TABLEAU 4.1 – Résumé de ce qui a été obtenu par différents auteurs et différentes techniques pour la phase métallique. DMRG : Density Matrix Renormalization Group ; LF : Transformation de Lang-Firsov ; SSE-QMC : Stochastic Series Expansion Quantum Monte Carlo ; MFRG : Multiscale Functional Renormalization Group.

Ce chapitre est divisé de la façon suivante. À la section 4.1, un graphique illustre l'allure générale des différentes quantités physiques obtenues par la VCA. Nous verrons que pour un faible couplage électron-phonon, ces quantités ont des comportements inattendus. La section 4.2 aura pour but de déterminer la nature du système pour ces valeurs de  $\lambda$ . La VCA fait appel à des amas finis dans sa méthodologie. Nous regarderons donc de plus près la limite thermodynamique à la section 4.3. En clôture de chapitre (4.4), le diagramme de phase du système étudié sera présenté, de même qu'une comparaison avec les résultats des articles mentionnés plus haut.

## 4.1 Graphique générique

Un graphique générique est présenté à la figure 4.2. Pour  $U = 5$  et  $\omega_D = 5$ , nous y illustrons quatre courbes en fonction de la valeur de  $\lambda = \lambda' / \sqrt{2M\omega_D L}$  pour un amas de  $L = 6$  sites. Pour une valeur donnée de  $\lambda$ , les valeurs correspondantes de  $W$  et  $\langle W \rangle$  (cf. équation (3.30)) constituent les valeurs absolues à l'équilibre telles que dictées par le principe variationnel de Potthoff (ces valeurs seront par la suite appelées solutions). Les valeurs du décalage  $\delta$  et du nombre de phonons moyen  $n_{\text{ph}} = \langle \Omega | a^\dagger a | \Omega \rangle$  ont été obtenues conformément aux méthodes explicitées aux sections 2.4.1 et 2.5, respectivement. Dans la limite  $\lambda \rightarrow 0$ , les quatre courbes doivent tomber à zéro. En absence de couplage électron-phonon, le nombre de phonons est trivialement nul. Il est alors impossible d'avoir une migration de la position d'équilibre des oscillateurs. Dans cette limite, ce doit donc être la solution plus symétrique (ci-après appelée solution normale) qui prévaut, et la valeur à l'équilibre du champ de Weiss  $W$  doit s'annuler, tout comme  $\delta$  et  $\langle W \rangle$ . Suivant ce raisonnement, comment se fait-il que  $\langle W \rangle$  tende vers une valeur finie à  $\lambda = 0$ ? Il est

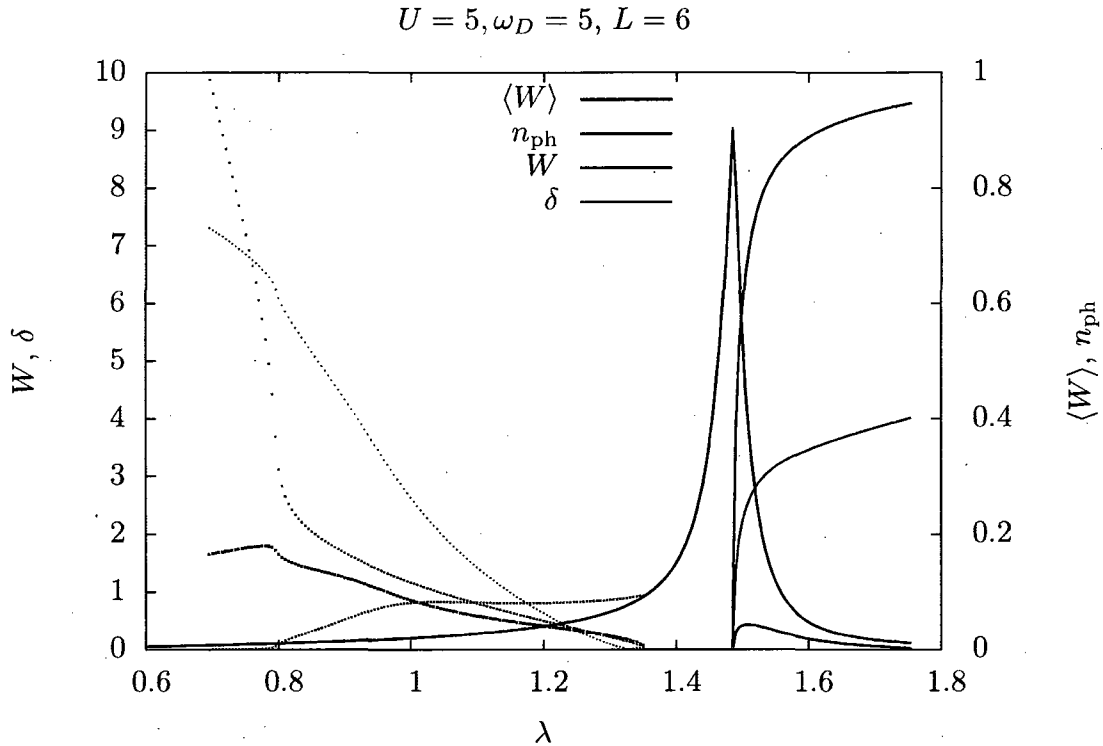


FIGURE 4.2 – Faits saillants de l'étude des ODC par VCA dans le cadre de l'approximation à un mode. Toutes les valeurs sont absolues. Les portions de courbe aberrantes sont en pointillées. La solution normale ( $W = 0$ ) pour  $n_{ph}$  a été prolongée à gauche et c'est pourquoi il y a deux courbes vertes sur une portion du graphique. Sur la portion non pointillée,  $W$  est multiplié par 10.

implicite dans la méthode de Potthoff que le champ de Weiss ne doit pas être trop grand. Dans la limite thermodynamique, la valeur de ce champ doit d'ailleurs tendre vers zéro, tel que démontré à la section 3.5.1. Informellement, si un grand champ de Weiss est requis — comme c'est le cas pour  $\lambda \lesssim 1$  sur la figure —, cela signifie que le système n'aura pas tendance à s'ordonner spontanément.

Plaçons-nous maintenant dans la région à gauche du « gap » avec  $W < 1$  (c'est-à-dire  $1 \lesssim \lambda < 1.36$ ). D'après la discussion du paragraphe précédent, les solutions à  $W$  et  $\langle W \rangle$  non nuls y sont plausibles dans le cadre de la VCA. Par contre, elles constituent le prolongement de la solution pathologique à  $\lambda \lesssim 1$  et doivent donc être analysées de la même façon. Ainsi, dans la suite de ce mémoire, la solution ordonnée à faible couplage

obtenue par la VCA (portions pointillées de la figure 4.2) sera systématiquement ignorée ; ce sera la solution normale ( $W = 0$ ) qui sera retenue.

Quelques arguments supplémentaires permettent d'écarter cette solution. Premièrement, celle-ci n'existe pas dans la littérature mentionnée plus haut : l'ordre de charge apparaît pour un  $\lambda$  critique donné (ici,  $\lambda_c = 1.485$ ). Deuxièmement, le pic dans le nombre de phonons, indicateur de la transition, est absent pour cette seconde transition. Il n'est certes pas impossible que cette solution aberrante constitue une première manifestation négative de l'approximation à un mode. Spéculativement, on peut parier que la présence des autres modes tuerait tout ordre de charge. En ne conservant que le mode dans lequel des phonons se condensent pour un système demi-rempli, l'ODC se forme aisément.

Passons maintenant à la solution viable. Passé la transition, la valeur du paramètre d'ordre sature rapidement pour un  $\lambda$  croissant. Pour cette gamme de valeurs du couplage électron-phonon, le champ de Weiss est  $\lesssim 10^{-3}$ , c'est-à-dire que le système s'ordonne spontanément. À noter que  $\delta$  semble être un bon indicateur de la transition, bien qu'il ne soit calculé qu'à partir du fondamental d'un amas.

Bien que le graphique 4.2 représente l'allure des résultats obtenus, nous tenons à souligner que les solutions ordonnées à faible couplage ne sont pas observées à  $U = 0$ , comme le montre la figure 4.3. À noter sur cette figure que l'ODC apparaît pour une valeur non nulle du couplage, soit  $\lambda_c = 0.635$ . Le rôle exact joué par  $U$  dans l'avènement des solutions ordonnées ODC à faible couplage demeure mystérieux.

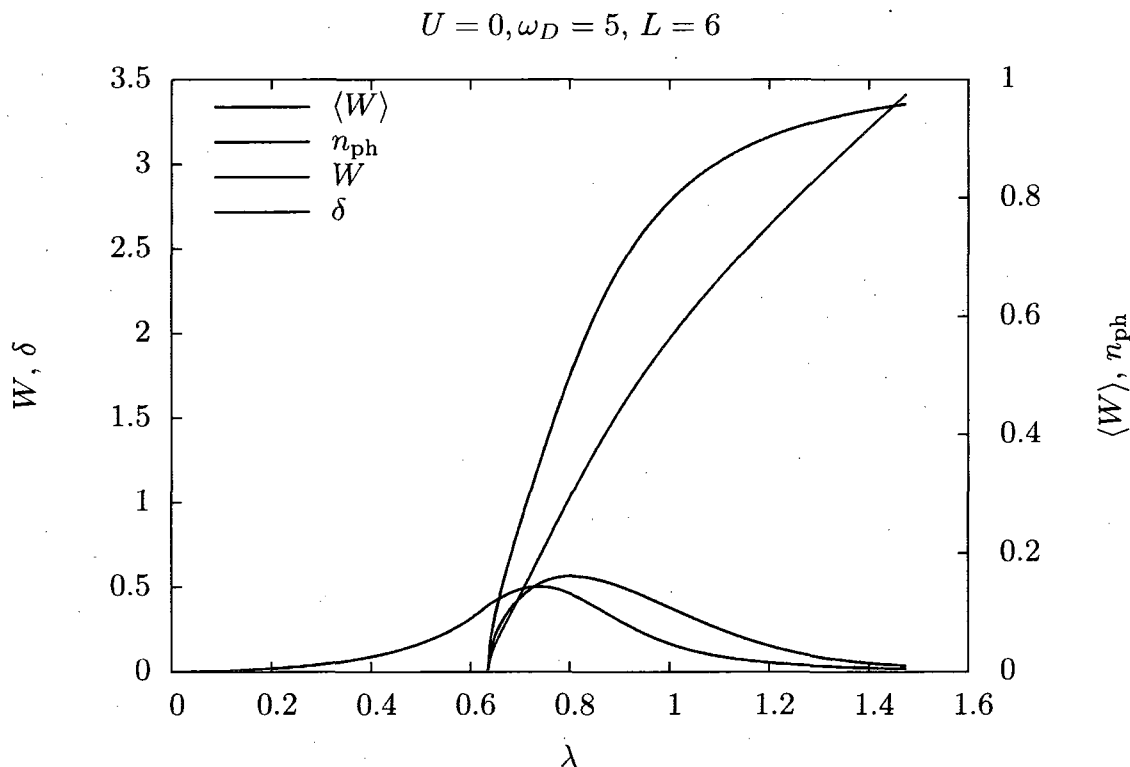
## 4.2 Nature de la solution à faible couplage

Pour  $\lambda > \lambda_c$ , le paramètre d'ordre de l'onde de densité de charge est non nul et le système forme un isolant dit de Peierls. Ce paramètre d'ordre tend asymptotiquement vers 1 à mesure que le couplage électron-phonon est augmenté. Dans la limite  $\lambda \rightarrow \infty$ , il apparaît donc que les électrons occupent les sites deux à deux, en laissant un site vide entre chacun des sites doublement occupés.

Il nous incombe maintenant d'établir la nature de la phase dans le régime à faible couplage  $\lambda$ . Les faits suivants nous seront utiles :

1. Un métal peut être défini par l'absence d'un gap de charge. Celui-ci est défini de la façon suivante dans [6] :

$$\Delta_{c1} = [E_0^+(1/2) - E_0(0)] + [E_0^-(-1/2) - E_0(0)]. \quad (4.1)$$

FIGURE 4.3 – Môme graphique que la figure 4.2, mais pour  $U = 0$ .

$E_0^{(\pm)}(S_z)$  est l'énergie du fondamental à demi rempli (hors demi-remplissage) avec  $N_s$  ( $N_s \pm 1$ ) électrons et un spin total  $S_z$ ;

2. En dimension un, un isolant de Mott est caractérisé par (1) la séparation spin-charge, c'est-à-dire que les excitations de charge et de spin ont une dynamique différente et (2) par un gap de charge non nul [6]. Le gap de spin, défini par [6]

$$\Delta_s = E_0(1) - E_0(0), \quad (4.2)$$

(avec la même notation) peut être nul ou non ;

3. Par la nature même des fonctions de Green utilisées dans la CPT et la VCA, seul le gap des excitations à une particule est accessible ;
4. Si le gap à une particule est nul, les gaps de charge et de spin sont nuls aussi ;
5. Si le gap de spin ou le gap de charge est non nul, alors le gap à une particule est

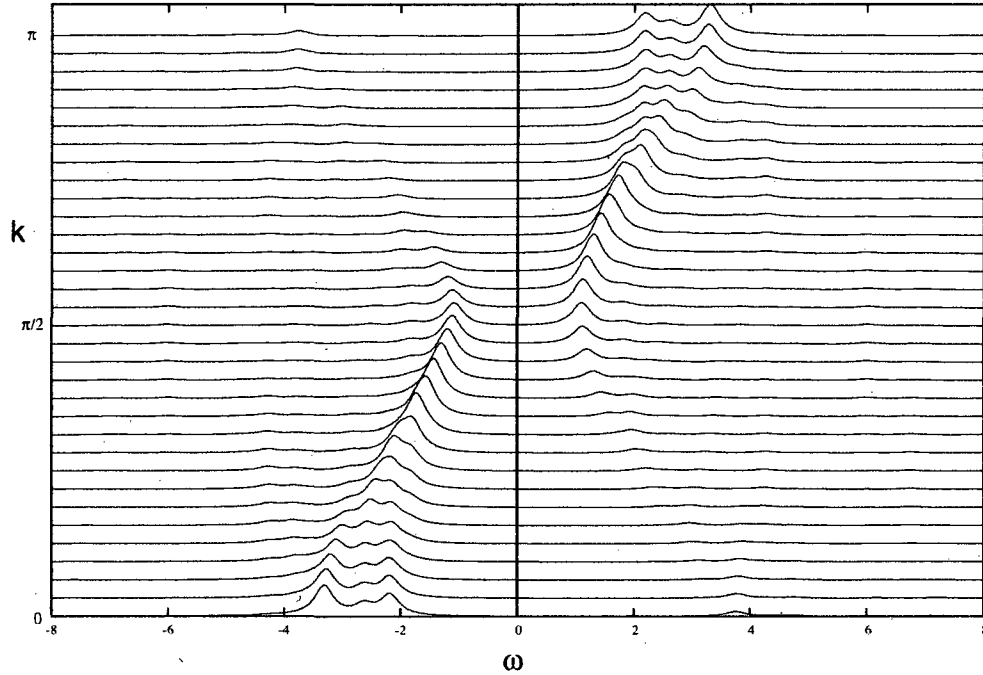


FIGURE 4.4 – Fonction spectrale pour les paramètres suivants :  $L = 6$ ,  $U = 2\mu = 5$ ,  $\omega_D = 5$ ,  $\lambda = 1$ . En ordonnée : le vecteur d'onde  $k$ ; en abscisse : l'énergie  $E = \omega$ .  $\eta$  est fixé à 0.2.  $\omega = 0$  est le niveau de Fermi.

non nul.

Pour déterminer le caractère isolant ou métallique dans la région à faible couplage, nous calculons le gap à une particule en fixant  $W = 0$ . S'il s'annule, il s'agit d'une phase métallique; s'il demeure non nul, nous avons un isolant de Mott.

### 4.2.1 Gap

Pour le déterminer, la fonction spectrale est utilisée. Celle-ci est donnée par :

$$A(k, \omega) = -2 \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im m [G_{\text{CPT}}(k, \omega + i\eta)] \quad (4.3)$$

Dans la pratique, on donne à  $\eta$  une petite valeur, laquelle représente l'élargissement des pics, tels qu'illustrés à la figure 4.4. Cette figure présente, en lien avec le graphique générique ci-dessus, la fonction spectrale pour  $\lambda = 1$ , c'est-à-dire pour la solution normale. Le gap est représenté par la différence d'énergie entre les sommets des pics situés en

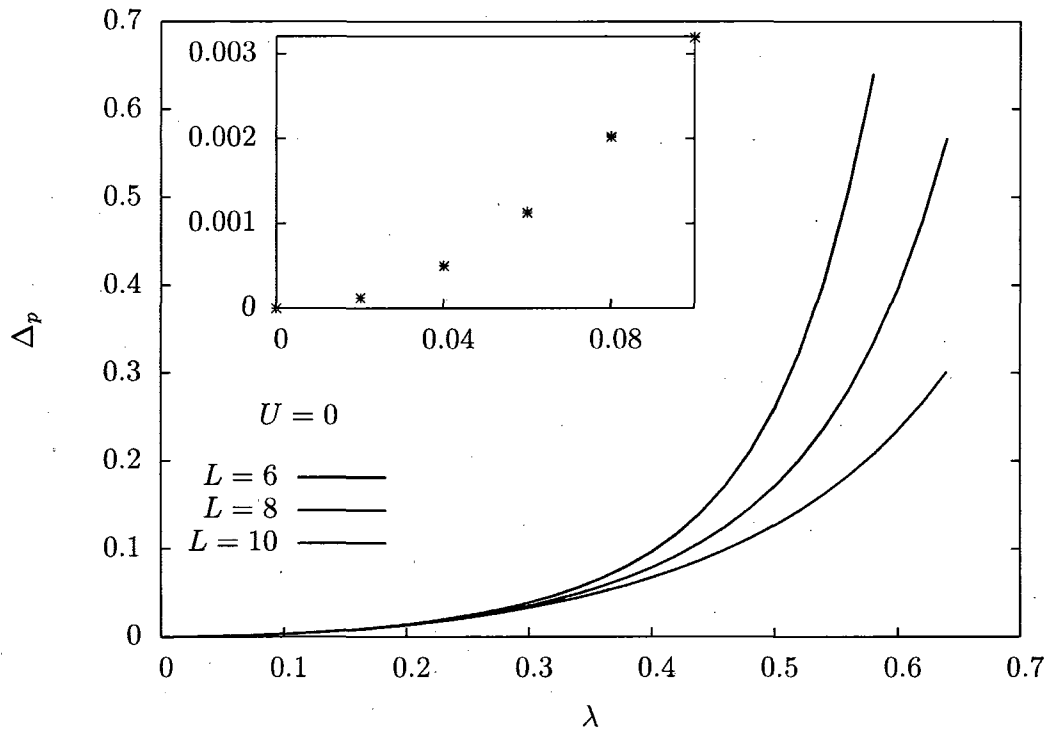


FIGURE 4.5 – Pour  $L = 6, 8, 10$  et  $U = 0$ , valeur du gap de charge en fonction du couplage. L'insert montre que la courbe ne tombe à zéro qu'à  $\lambda = 0$ .

$k = \pi/2$ . Sur la figure, cette valeur du vecteur d'onde est située à mi-chemin le long de l'axe des ordonnées. On aperçoit près de  $k = 0$  et  $k = \pi$  la signature de la séparation spin-charge. À noter que le décalage est nul pour la solution normale.

Pour  $U = 0$  et pour de faibles valeurs de  $\lambda$ , il serait raisonnable de penser que le gap s'annule. Ce n'est pas le cas d'après la figure 4.5. Comme les courbes figurant sur celle-ci correspondent à des valeurs de  $L$  toujours plus grandes, et que ces courbes coïncident lorsque  $\lambda$  est très faible (*cf.* insert), on conclut que le gap à une particule ne s'annule qu'en  $\lambda = 0$  à la limite thermodynamique. D'après ces résultats, il ne semble pas y avoir de phase métallique pour tout  $\lambda > 0$  lorsque  $U = 0$ .

La figure suivante, 4.6, présente les valeurs du gap pour  $U > 0$ . Pour  $U > 2$ , il y a apparition d'un minimum pour  $\lambda$  un peu plus petit que  $\lambda_c$ .

Pour tester la validité du traitement du gap (c'est-à-dire *via* la fonction spectrale), nous l'avons calculé pour le modèle de Hubbard à demi rempli avec  $U = 4$ . La figure

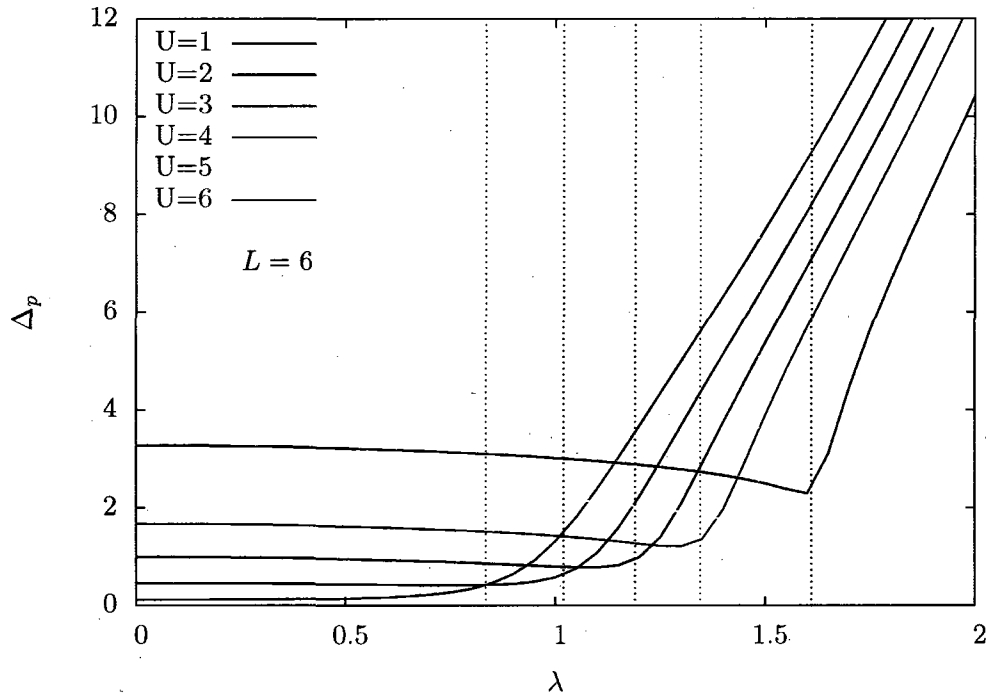


FIGURE 4.6 – Pour  $L = 6$  et  $U = 1, 2, 3, 4$ , valeur du gap de charge en fonction du couplage. Les droites pointillées correspondent à l'équation  $\lambda = \lambda_c$ .

4.7 présente ces résultats. En lissant la suite de points obtenus à l'aide d'une fonction quartique, il advient que l'intersection de cette courbe avec l'axe des ordonnées coïncide assez bien avec la valeur exacte, cette valeur étant issue de la solution de Lieb et Wu [14] du modèle de Hubbard.

Lorsque les phonons sont présents, pour une taille d'amas donnée, la courbe du gap en fonction de  $\lambda$  passe par un minimum,  $\lambda_{\text{Gap}} < \lambda_c$  (figure 4.6), pour  $U > 2$ . La suite de ronds bleus de la figure 4.7 donne la valeur du gap en ce minimum pour  $L$  allant de 2 à 12. La position en  $\lambda$  dudit minimum est évaluée en faisant passer une parabole à travers trois points entourant une estimation de ce minimum ; il vient  $\lambda_{\text{Gap}} = -b/2a$ , si  $a$  et  $b$  sont respectivement les coefficients des termes quadratique et linéaire de la fonction lissante.

Le lissage par une fonction polynomiale dans le cas sans phonons redonne la solution exacte. Ce fait peut être extrapolé en disant que le gap se comporte de manière analytique en fonction de la taille des amas. Ce faisant, il y a fort à parier que les données



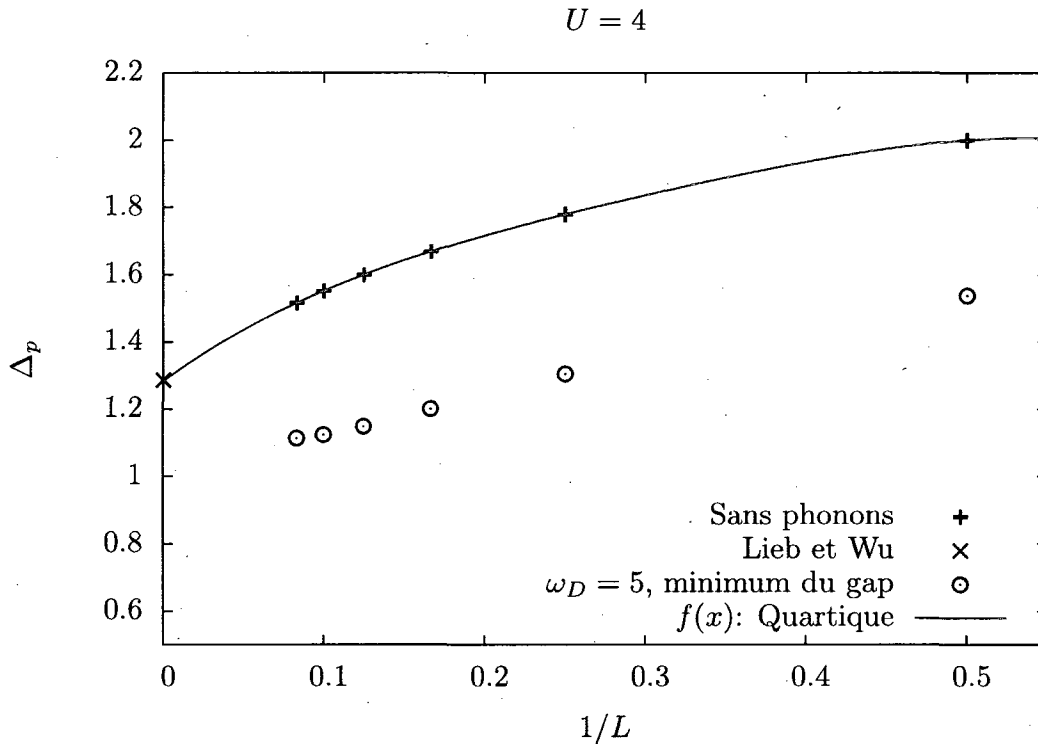


FIGURE 4.7 – Gap à une particule en fonction de  $1/L$ . La courbe pleine rouge est un lissage quartique des croix noires uniquement, lesquelles représentent les valeurs du gap pour un système exempt de phonons. Le « x » vert représente la valeur exacte telle que donnée dans [14]. Les ronds bleus correspondent au minimum du gap en fonction de  $\lambda$ .

correspondantes pour le modèle de Holstein-Hubbard se comporte de la même façon. Cela implique que la courbe bleue de la figure peut être prolongée de façon lisse (analytique) vers  $1/L = 0$ , prolongement qui aboutit sans trop forcer l'imagination à une valeur finie non nulle. Il apparaît donc que le gap de charge ne s'annule jamais dans la région à faible couplage : le système demeure un isolant. Toutefois, ce fait ne permet pas de dire si celui-ci est bel et bien un isolant de Mott. La prochaine sous-section éclaircit ce point.

#### 4.2.2 Nature de l'isolant : Double occupation

Dans la limite de couplage nul ( $U = \lambda = 0$ ), le système est, d'après la section 1.1.2, un métal. Dans ce cas, la double occupation (D.O.) est égale à  $1/4$ ; celle-ci correspond à la

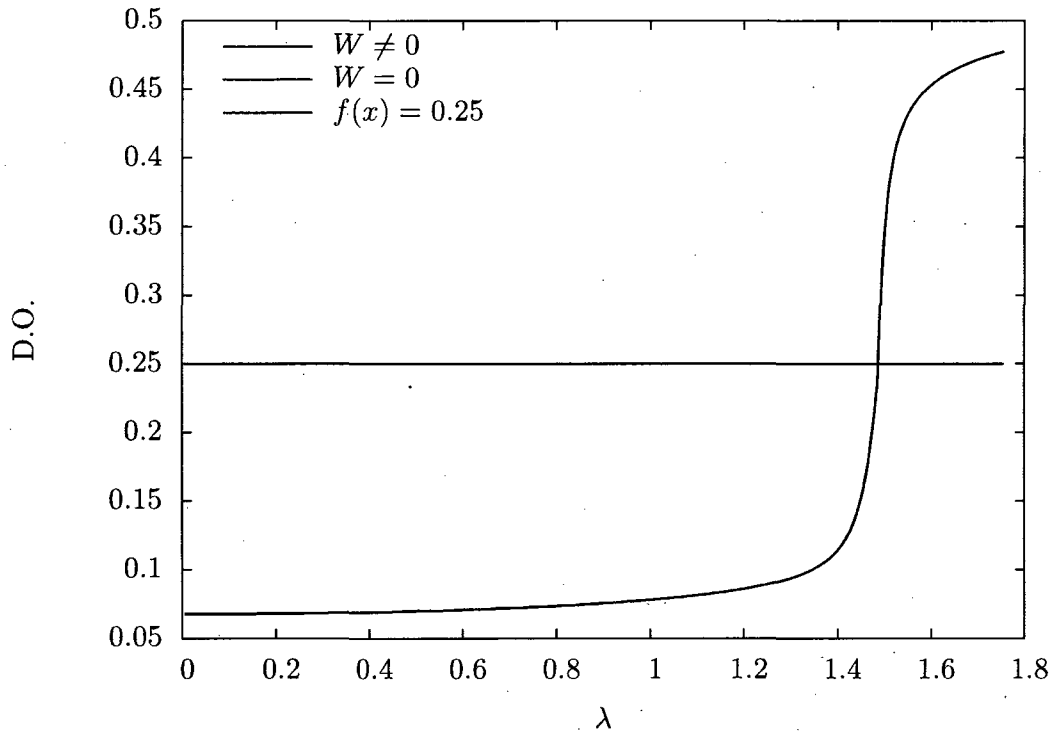


FIGURE 4.8 – Double occupation (D.O.) en fonction de  $\lambda$ . La courbe rouge est celle qui correspond aux données de la figure 4.2. La courbe verte représente la D.O. pour la solution normale. Le point où les courbes rouge et verte se rencontre correspond à  $\lambda_c$ . La courbe bleue, quant à elle, sert de référence (voir texte).

probabilité qu'un site soit doublement occupé. En effet, pour une relation de dispersion ne dépendant pas de l'orientation du spin, la probabilité qu'un site soit occupé par un électron de spin  $\uparrow$  ou  $\downarrow$  est de  $1/2$ , car il n'y a pas de corrélation entre les électrons. Donc, la probabilité qu'un site soit occupé par un électron  $\uparrow$  et un électron  $\downarrow$  est  $1/2 \times 1/2 = 1/4$ . À l'opposé, dans la limite où  $\lambda \rightarrow \infty$  pour un  $U$  donné, cette double occupation tend vers  $1/2$ . Il y a alors saturation du paramètre d'ordre ODC et les électrons se retrouvent deux à deux sur les sites, à tous les deux sites.

La figure 4.8 présente la D.O. en fonction de  $\lambda$  pour les paramètres de la figure 4.2. Il s'agit de la moyenne des D.O. de chaque site de l'amas, calculée à l'aide du fondamental de l'amas. Pour la courbe rouge, qui inclut la solution pathologique, la D.O. sature à  $1/2$  pour  $\lambda \rightarrow 0$  et  $\lambda \rightarrow \infty$ . La courbe verte est obtenue en imposant  $W = 0$  sur la

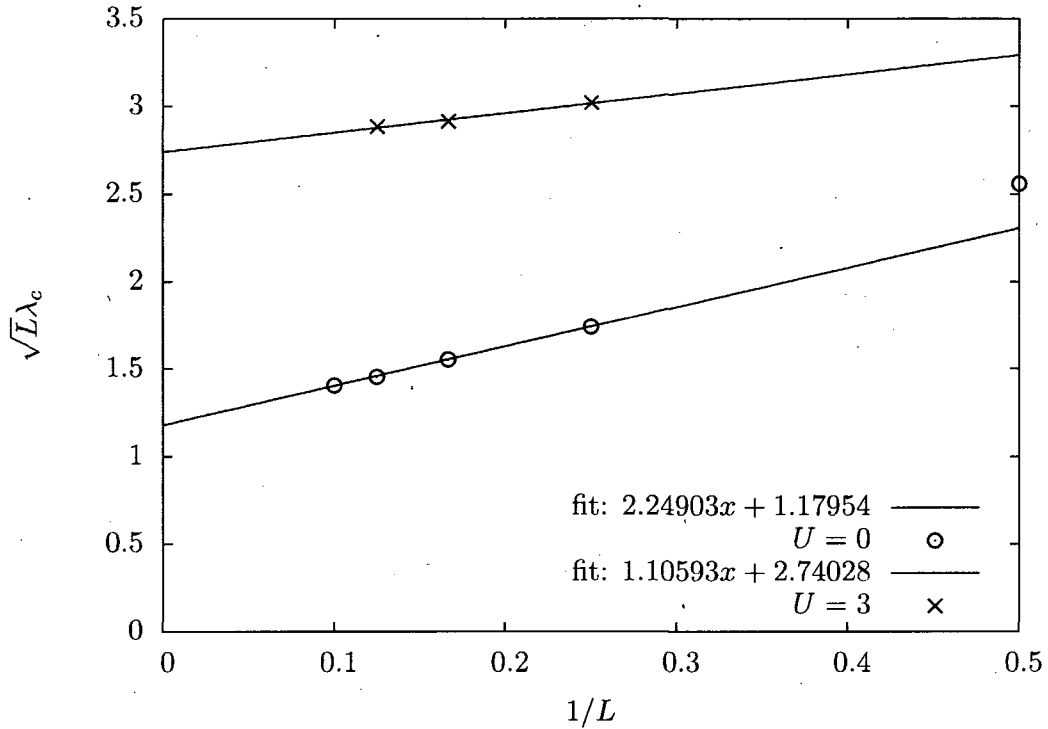


FIGURE 4.9 – Comportement de  $\lambda_c$  en fonction de l'inverse de la taille de l'amas à  $U = 0$  et  $U = 3$ .  $\lambda_c$  est multiplié par  $\sqrt{L}$  pour tenir compte du scaling intrinsèque de  $\lambda$  (voir texte).

gamme des valeurs de  $\lambda$  correspondant à la solution pathologique. Pour cette courbe, la double occupation tend vers une valeur inférieure à  $1/4$  dans la limite  $\lambda \rightarrow 0$ ; c'est alors le couplage  $U$  qui domine et qui musèle la D.O. des sites par les électrons. Il apparaît donc qu'à gauche de  $\lambda_c$ , c'est le couplage électron-électron qui domine le comportement isolant : c'est un isolant de Mott.

### 4.3 Comportement à $L \rightarrow \infty$ de $\lambda_c$

Une brisure spontanée de symétrie n'est possible que dans la limite thermodynamique. Dans le cadre de la VCA, cette limite est obtenue en faisant tendre la taille d'un amas vers l'infini; les liens interamas n'existent plus. La figure 4.9 présente ce processus de limite dans les cas  $U = 0$  et  $U = 3$ . En ordonnée, c'est la valeur critique de  $\lambda$  multipliée

par la racine carrée de  $L$ . Cette mise à l'échelle (scaling) préliminaire est nécessaire car le  $\lambda$  qui nous concerne est donné par (cf. équation (2.22))

$$\lambda = \frac{\lambda'}{\sqrt{2M\omega_D L}}. \quad (4.4)$$

Pour  $L \geq 4$ , l'alignement des points suggère une droite, comme en témoigne le lissage linéaire. L'équation linéaire du fit et le rejet de la donnée à  $L = 2$  pour  $U = 0$  sont purement empiriques ; il n'est certes pas impossible que le scaling adopte en réalité une forme plus bizarre. Nous nous faisons ainsi les avocats du rasoir d'Occam.

La limite  $1/L \rightarrow 0$  correspond à la limite thermodynamique. Dans la suite, nous prendrons

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{L}\lambda \quad (4.5)$$

comme la meilleure estimation de la valeur à la limite thermodynamique du couplage électron-phonon.

## 4.4 Diagramme de phase

Se basant sur la section précédente, il nous est maintenant possible de tracer le diagramme de phase du système. Il est présenté à la figure 4.10. À des fins de comparaison avec la littérature, l'axe des ordonnées représente la quantité

$$\frac{2g^2}{\omega_D} = \frac{2 \left[ \lim_{L \rightarrow \infty} (\sqrt{L}\lambda) \right]^2}{\omega_D}. \quad (4.6)$$

(La courbe bleue correspond à la valeur critique de cette quantité.) Pour  $U > 2$ , les points calculés suivent assez bien le raisonnement de la section 1.4 : la ligne de transition donnée par la VCA se confond presque avec la condition  $U_{\text{eff}} = 0$ . Les effets de retard dus à la valeur finie de la fréquence de Debye semblent prendre de plus en plus d'importance à mesure que  $U$  est diminué sous 2.

D'après les résultats des sections précédentes, le système est isolant sur toute l'étendue du diagramme, excepté le point  $U = g = 0$ , où il est métallique. Donc, pour la VCA dans le cadre de l'approximation unimodale, il n'y a pas de phase métallique.

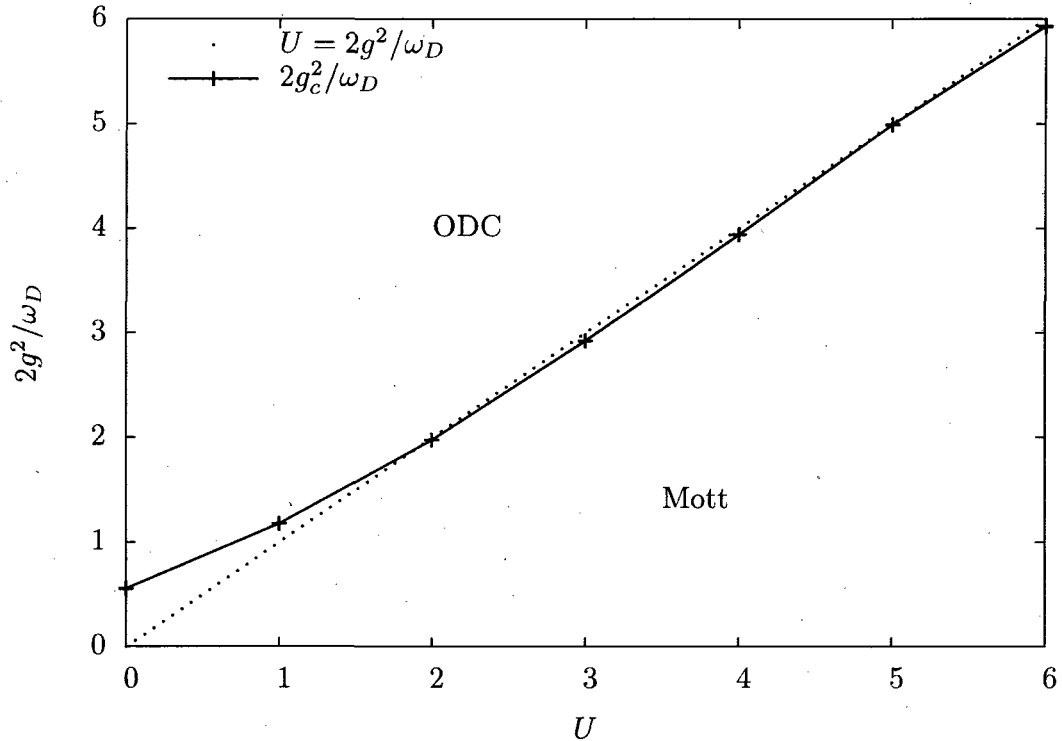


FIGURE 4.10 – Diagramme de phase pour le modèle de Holstein-Hubbard unidimensionnel à demi rempli dans l'approximation unimodale. La droite pointillée représente la condition  $U_{\text{eff}} = U - 2g^2/\omega_D = 0$ .

#### 4.4.1 Comparaison avec la littérature

Selon Hardikar et coll. [47] (cf. figure 4.1), il existe un métal entre les phases isolantes de Peierls et de Mott du diagramme de phase. La nature de ce métal se précise en regardant la figure 4.11 tirée de l'article de Fehske *et al.* [6]. La phase métallique est divisée en deux parties. Pour un liquide bipolaronique, le gap de charge à une particule et le gap de spin sont non nuls, alors que le gap de charge à deux particules est nul. Ces trois gaps sont nuls pour le liquide de Luttinger. Près de la phase isolante de Peierls, le métal est un liquide bipolaronique ; près de la phase de Mott, il s'agit du liquide de Luttinger.

La seule région de la figure 4.10 qui pourrait représenter une phase non isolante est celle située entre la courbe bleue et la courbe pointillée pour  $U \in [0, 2]$ , ce qui n'est

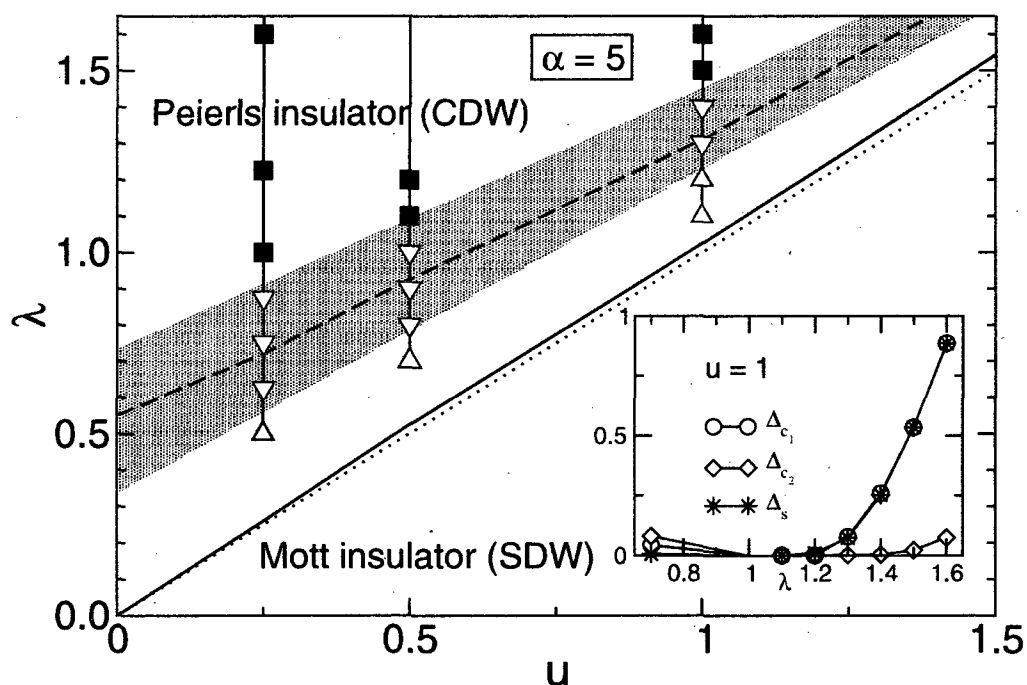


FIGURE 4.11 – Diagramme de phase pour le modèle de Holstein-Hubbard unidimensionnel (local) à demi rempli tel qu’obtenu par Fehske *et al.* [6]. Ici,  $\lambda = g^2/2\omega_D$  (où  $g$  est celui de la figure 4.1) et  $u = U/4$ . La droite tiretée est la solution d’Hardikar. La zone gris foncé dénote le liquide bipolaronique alors que la gris pâle représente le liquide de Luttinger. L’insert donne les gaps de charge à une et deux particules, de même que le gap de spin.

pas le cas d’après nos résultats. Cependant, en vertu de l’existence probable d’un liquide bipolaronique, cela ne nous permet pas de conclure à l’absence d’une phase métallique dans le diagramme de phase élaboré par la VCA. Si cette phase existait, elle devrait se trouver près de la phase de Peierls, pour toute la gamme  $0 < U < 6$ . Or, pour  $U > 2$ , la courbe de la transition ODC/isolant de Mott issue de la VCA se superpose à la droite pointillée, témoignant de la robustesse de la phase isolante de Peierls. Cela pourrait être lié à l’approximation unimodale : n’ayant conservé que le mode responsable de l’instabilité donnant l’ODC, les autres modes ne peuvent intervenir pour aider à éliminer cet ordre de charge. L’existence même de la solution ODC à faible couplage électron-phonon tend à corroborer cette hypothèse.

# Chapitre 5

## Supraconductivité et coexistence dans le modèle de Holstein 2D

Dans le cas unidimensionnel du chapitre 4, le choix du mode  $q = \pi$  s'imposait de lui-même de par la divergence de la composante correspondante de la fonction de réponse (section 1.3.1). Également, la brisure spontanée d'une symétrie continue n'étant pas possible en 1D, l'ODC était le seul état à considérer dans l'approche variationnelle de Pothoff. En 2D, la situation est différente, car (1) cette divergence est absente et (2) d'autres états à symétries brisées, tels l'antiferromagnétisme et la supraconductivité (SC), peuvent s'ajouter.

Dans le présent chapitre, c'est le modèle de Holstein ( $U = 0$ ) qui est étudié. À demi rempli, il ressort des études Monte Carlo que la SC de type  $s$  et l'ODC de vecteur d'onde  $\pi$  y sont en compétition [49–51]. À faible couplage électron-phonon, c'est la SC qui domine ; à fort couplage, c'est l'ODC. À couplage intermédiaire, il y a coexistence des deux phases [52].

Le chapitre est divisé de la façon suivante. En premier lieu, la SC causée par les phonons du mode  $(0, 0)$  sera examinée. Ensuite, ce sera le tour du mode  $(\pi, \pi)$ . Le choix de ces modes est en partie dicté par le fait que seuls des amas  $2 \times 2$  seront utilisés. D'après (2.27), passer d'un amas  $2 \times 2$  à un amas  $4 \times 4$  implique, à demi rempli, une augmentation d'un facteur  $10^6$  de la dimension de l'espace de Hilbert électronique ; il apparaît donc difficile d'utiliser des amas autres que  $2 \times 2$ . Comme dans la référence [52], la SC de type  $d$  n'est pas étudiée car nous n'en avons trouvé aucune trace lors des calculs.

Étant donnée la propension du système à ordonner sa charge par l'entremise des phonons  $(\pi, \pi)$ , nous étudierons également la compétition entre l'ODC et la SC pour ce

mode. Dans tous les cas, il s'agira de SC de type  $s$ , c'est-à-dire à la BCS, et la fréquence de Debye  $\omega_D = 1$ . Cette valeur est souvent utilisée [53, 54] pour dichotomiser les régimes adiabatique et non-adiabatique, c'est-à-dire [55] :

$$\begin{aligned}\omega_D < 1 &\Rightarrow \text{régime adiabatique} \\ \omega_D > 1 &\Rightarrow \text{régime non - adiabatique.}\end{aligned}$$

L'utilisation d'une fréquence relativement petite implique que les effets de retard seront passablement grands. Les arguments basés sur l'hamiltonien effectif issu des transformations de la sous-section 1.2.2 doivent donc être utilisés et compris avec circonspection.

## 5.1 Supraconductivité

### 5.1.1 Mode $\mathbf{q} = (0, 0)$

Pour le mode  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ , poser  $\mu = U/2 = 0$  ne fixe pas la densité électronique  $n$  au demi-remplissage, d'après la sous-section 1.2.2. Pour y remédier,  $\mu$  est fixé de façon à ce que la densité électronique soit  $n = 1$ . C'est fait, pour une valeur donnée de  $\lambda$ , en donnant une valeur de départ à  $\mu$ , valeur pour laquelle on trouve le point stationnaire de la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss  $S$ . La densité électronique peut alors être calculée. Si  $n \neq 1$ ,  $\mu$  est ajusté et on calcule à nouveau la densité. Ce processus est répété jusqu'à l'obtention de  $n = 1$  à 0.001 près.

La figure 5.1 présente les résultats pour le champ de Weiss et le paramètre d'ordre SC, ainsi que pour le nombre de phonons moyen. Selon la section 1.2.2, à faible couplage  $\lambda$ , l'interaction électron-phonon peut être transformée pour donner une interaction électron-électron effective. Pour  $\mathbf{q} = (0, 0)$ , celle-ci est négative pour tous les vecteurs d'ondes électroniques (*cf.* équation (1.54)). Bien que la fréquence de Debye ne soit pas assez grande ici pour que l'hamiltonien de Holstein devienne un modèle purement électronique avec un bon degré de précision, on pourrait penser qu'un appariement des électrons est favorisé. Cela ne semble pas être le cas selon la figure 5.1. En effet,  $\langle S \rangle$  est petit pour un champ de Weiss  $\sim 2$ . Dans la limite thermodynamique, il est donc à prévoir que la SC est faible, sinon absente, pour cette gamme de valeurs et ce, jusqu'à la discontinuité en  $\lambda \approx 0.13$ . Celle-ci constitue une transition du premier ordre ; la figure 5.2 montre que le minimum de la fonctionnelle de Potthoff  $\Omega$  se déplace de  $S \sim 2$  à  $S \sim 1$  lorsque l'on



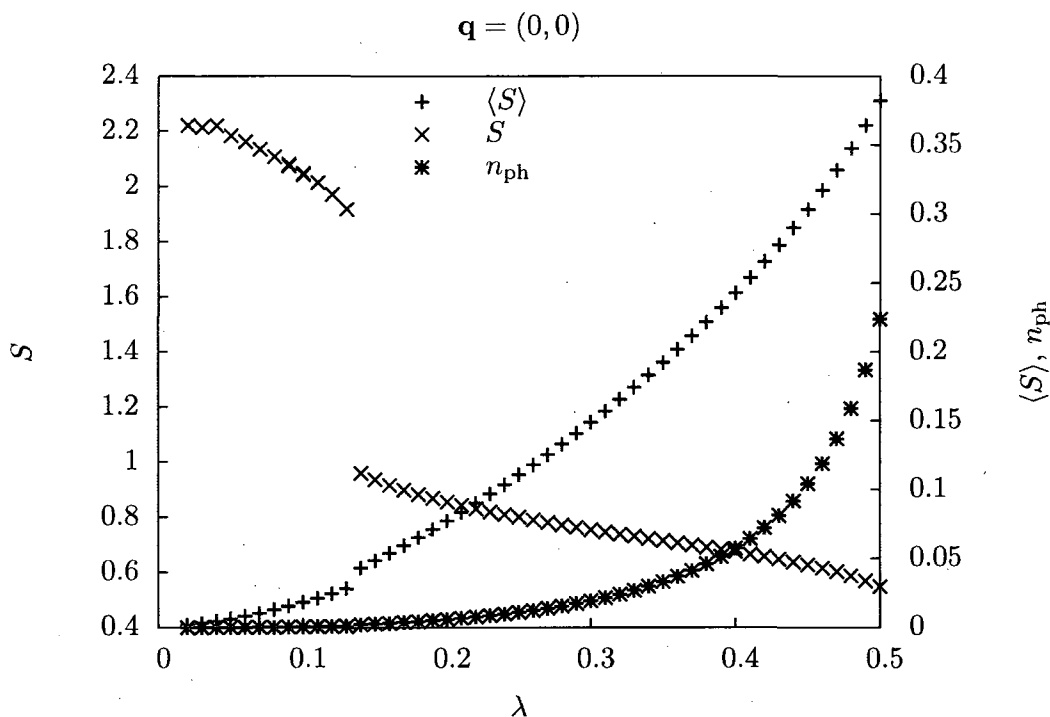


FIGURE 5.1 – SC dans le modèle de Holstein 2D pour l’approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (0, 0)$ ).

franchit la transition.

La solution SC est présente pour  $\lambda \leq 0.5$ . Passé cette valeur, le système ne réussit pas à remplir la condition  $n = 1$  et oscille entre  $n \approx 0.6$  et  $n \approx 1.4$  : il cherche à établir une variation de la densité électronique, bien que cela ne brise pas une symétrie à  $\mathbf{q} = (0, 0)$ . Physiquement, cela pourrait se traduire par l’établissement de domaines (par analogie aux domaines magnétiques) où  $n = 0.6$  ou  $n = 1.4$ . Cette quête d’une densité inhomogène par le système souligne que la restriction au mode  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  est fort peu adéquate lorsque  $\lambda > 0.5$ . Se basant sur ce résultat, c’est une onde de densité de charge qui devrait dominer pour ces valeurs du couplage (*cf.* section 5.2).

### 5.1.2 Mode $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$

Les résultats obtenus pour le mode  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$  sont présentés à la figure 5.3. Une région normale sépare deux gammes de solutions SC. La présence de cette phase est suspecte ;

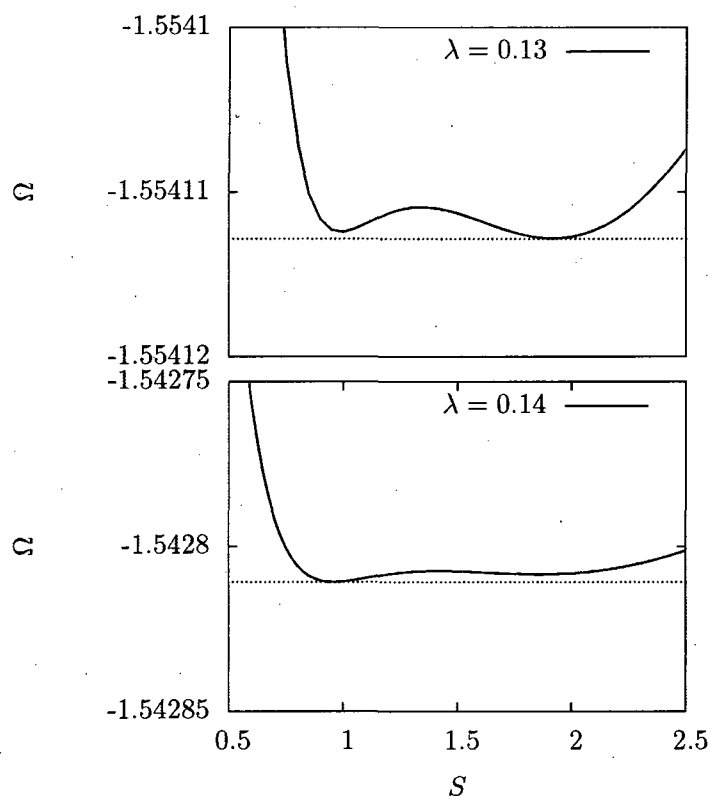


FIGURE 5.2 – Valeur de la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss SC pour  $\lambda$  un peu plus petit (haut) et un peu plus grand (bas) que la valeur à la transition ( $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ).

nous y reviendrons à la section 5.2. Comme  $\langle S \rangle$  est très petit ( $\lesssim 10^{-2}$ ) pour un  $S$  appréciable, nous prévoyons que la solution SC à fort couplage disparaît dans la limite thermodynamique. Argument supplémentaire : pour cette portion du graphique, le décalage est non nul et augmente en fonction de  $\lambda$ , indiquant la propension du système à former une ODC, au détriment de la SC. C'est sans parler du nombre moyen de phonons qui augmente de façon drastique lorsque  $\lambda$  s'approche de 0.5. Comme mentionné à la section 4.1 du chapitre précédent, il s'agit d'une bonne indication que le système effectue une transition vers une onde de densité de charge à partir de cette valeur.

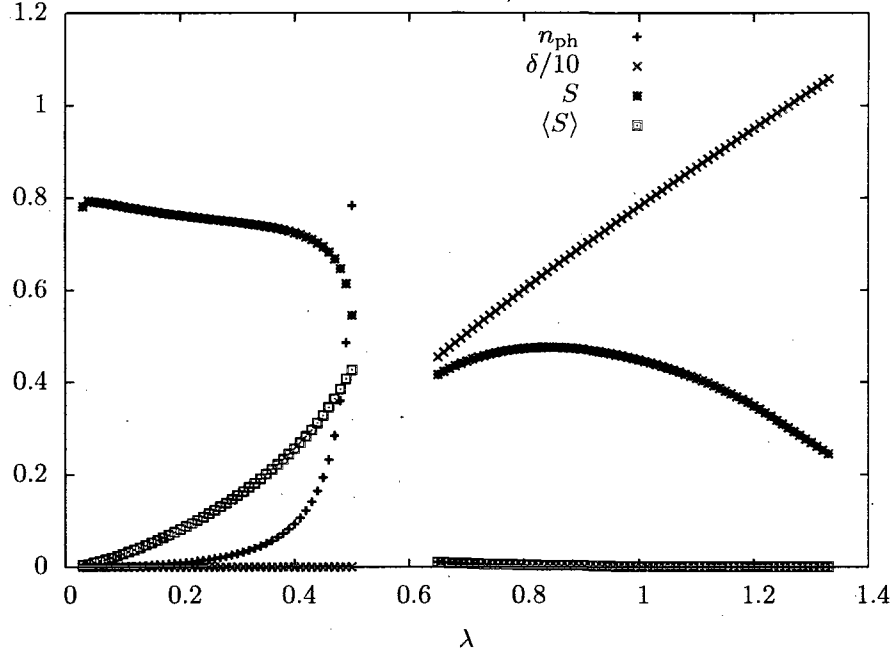


FIGURE 5.3 – SC dans le modèle de Holstein 2D pour l’approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ). Le décalage,  $\langle a + a^\dagger \rangle$ , y est divisé par 10 pour une question d’échelle.  $n_{\text{ph}}$  est nul sur la portion de droite.

### 5.1.3 Comparaison entre les modes $\mathbf{q} = 0$ et $\pi$

Dans certains cas, par exemple pour l’onde de densité de charge traitée au chapitre précédent, un seul mode de phonons domine la physique du système. Est-ce le cas pour la SC de type  $s$  survenant dans le modèle de Holstein ? Pour le vérifier, nous comparons la SC pour les deux modes de phonons retenus en calculant l’énergie de condensation, soit la différence entre l’énergie de l’état normal et celle de l’état SC (cf. figure 5.4) :

$$E_C(\mathbf{q}) = E_N(\mathbf{q}) - E_{\text{SC}}(\mathbf{q}), \quad (5.1)$$

où  $E_N(\mathbf{q}) = \Omega_N + \mu n$  (resp.  $E_{\text{SC}}(\mathbf{q}) = \Omega_{\text{SC}} + \mu n$ ) est l’énergie par site pour l’état normal (resp. l’état SC). À noter que  $E_N(\mathbf{q})$  est différent pour chaque mode et que  $\mu = 0$  pour  $\mathbf{q} = \pi$ . Pour  $\lambda \lesssim 0.13$ , c’est-à-dire avant la discontinuité dans le paramètre d’ordre SC, nous avons, d’une part, que

$$E_C(\pi) > E_C(\mathbf{0}),$$

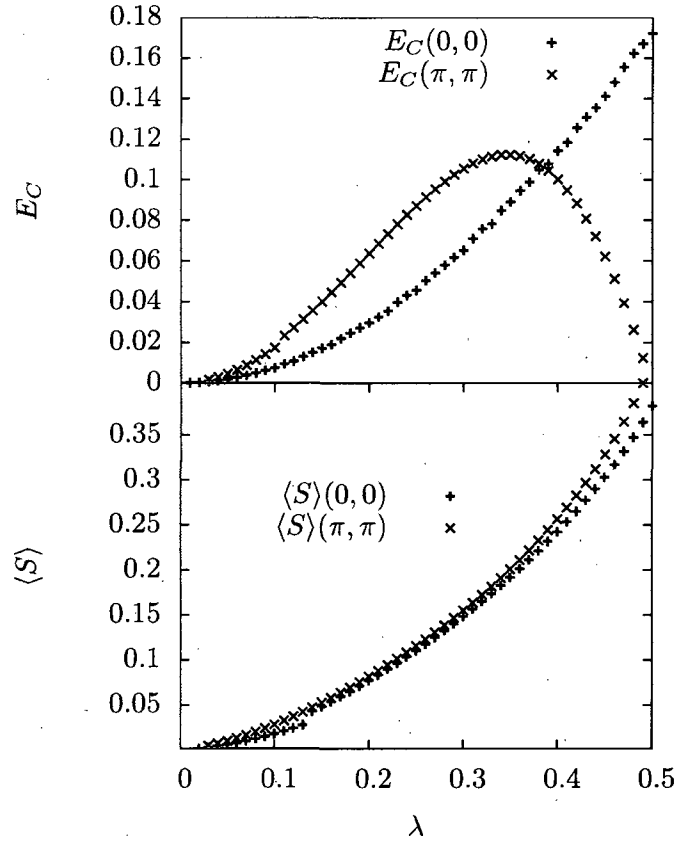


FIGURE 5.4 – Comparaison des énergies de condensation ( $E_C$ ) et des paramètres d'ordre SC pour les deux modes sous études. Noter que nous nous restreignons à l'intervalle  $\lambda \in [0, 0.5]$ .

et, d'autre part, que  $\langle S \rangle(\mathbf{0})$  est petit ou nul dans la limite thermodynamique, selon la section 5.1.1. Donc, pour ce domaine de valeurs du couplage, il semble que c'est le mode  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$  qui détermine le comportement supraconducteur du système. Passé la discontinuité, l'énergie de condensation pour le mode  $\boldsymbol{\pi}$  est encore supérieure à celle du mode  $\mathbf{0}$ ; les paramètres d'ordre SC, eux, sont à peu près les mêmes jusqu'à  $\lambda \approx 0.38$ . Dans la dernière portion du graphique,  $E_C(\mathbf{0}) > E_C(\boldsymbol{\pi})$ . Bien que les énergies de condensation diffèrent beaucoup, la similarité des paramètres d'ordre pour les deux modes fait qu'il est difficile de déterminer quel mode domine pour  $\lambda > 0.13$ .

## 5.2 Coexistence SC/ODC pour le mode $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$

Pour  $\lambda > 0.5$ , il semble, d'après la figure 5.3, que le modèle de Holstein unimodal avec  $\mathbf{q} = \pi$  devrait supporter la formation d'une ODC. Nous nous proposons donc d'étudier les états SC et ODC simultanément pour ce mode. Le résultat est présenté à la figure 5.5. Cette fois, le point stationnaire de la fonctionnelle de Potthoff est situé dans l'espace 2D constitué des champs de Weiss SC et ODC. Le graphique peut être divisé en trois régions :

1. Pour  $\lambda \in [0, 0.21]$ , le paramètre d'ordre ODC est nul. Le paramètre d'ordre SC culmine en  $\lambda = 0.22$ , ayant augmenté de façon monotone à partir de l'origine. À noter que son comportement diffère de la théorie BCS. Le paramètre d'ordre SC

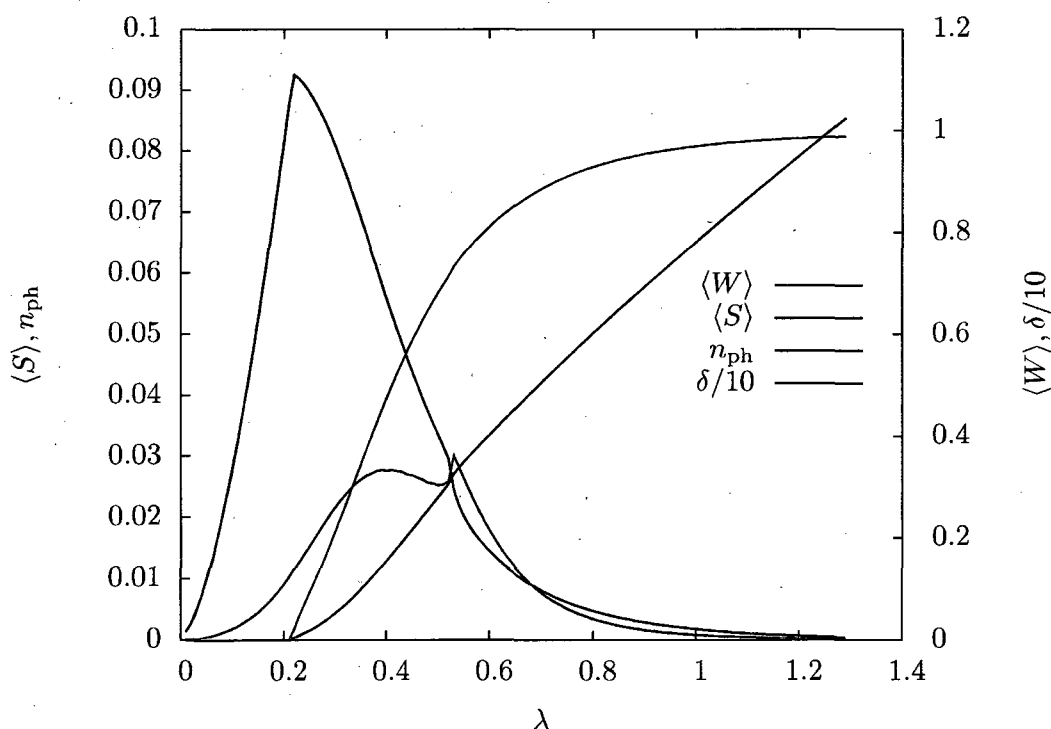


FIGURE 5.5 – Coexistence ODC/SC dans le modèle de Holstein 2D pour l'approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ). Le décalage,  $\langle a + a^\dagger \rangle$ , y est divisé par 10 pour une question d'échelle.

s'écrivant sur le réseau  $\gamma$  de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\langle S \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \langle c_{\mathbf{r}\uparrow} c_{\mathbf{r}\downarrow} + c_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle,\end{aligned}$$

le rapprochement se fait facilement avec le gap BCS :

$$\Delta \propto \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle. \quad (5.2)$$

Or, d'après la section 1.3.2, ce gap est donné par<sup>1</sup>  $\Delta \propto 2\omega_D e^{-1/a\lambda^2}$ , où  $a$  est une constante dont les détails sont peu importants pour l'argumentation présente.

Advenant que le paramètre d'ordre SC se comporte comme le gap BCS dans cette région, alors la courbe de  $\langle S \rangle$  en fonction de  $1/\lambda^2$  devrait donner une droite sur un graphique semi-log. D'un autre côté, si le paramètre d'ordre est une loi de puissance — c'est-à-dire  $\langle S \rangle \propto (\frac{1}{\lambda^2})^b$  — alors le graphique log-log donnera une droite. Ce cas est illustré à la figure 5.6. Il apparaît que le paramètre d'ordre SC suit une loi de puissance avec  $\langle S \rangle \propto \lambda^{1.52}$  pour  $\lambda \in [0.04, 0.21]$ , et s'en écarte dans la limite  $\lambda \rightarrow 0$ . Sykora *et al.* [52] obtiennent l'exposant  $\approx 2$  pour  $\omega_D = 0.1$ .

2. La seconde région est celle située entre  $\lambda = 0.22$  et  $\lambda \approx 0.53$ , soit tout juste à gauche du maximum absolu du nombre de phonons. Due à l'apparition d'un paramètre d'ordre ODC non nul au début de cette région, il y a une diminution drastique du paramètre d'ordre SC : il y a compétition entre la SC et l'ODC dans le modèle de Holstein 2D à demi rempli. Dans cette région, les champs de Weiss SC et ODC sont passablement grands (figure 5.7). En raison de la valeur importante de  $W$ , le décalage (courbe verte de la figure 5.5) ne varie pas linéairement en fonction de  $\lambda$ . En effet, selon la sous-section 2.4.1,  $W$  et la quantité  $2\lambda/\omega_D$  se couplent à l'opérateur  $\hat{O} = \sum_R \hat{n}_R (-1)^R$ ; si  $W$  ne varie pas de façon assez linéaire en fonction de  $\lambda$ , le décalage ne sera pas linéaire.
3. Au début de la dernière région,  $\lambda > 0.53$ , il y a un point où les courbes de la figure 5.5 ne sont pas lisses (c'est-à-dire non différentiables) mais continues. Le paramètre

<sup>1</sup>À noter que les expressions données ici sont approximatives. Par exemple, le fait d'utiliser  $\lambda$  dans l'expression du gap est incorrecte. N'ayant pas accès à la valeur de  $\sqrt{L}\lambda$  dans la limite thermodynamique, nous nous en accommodons.

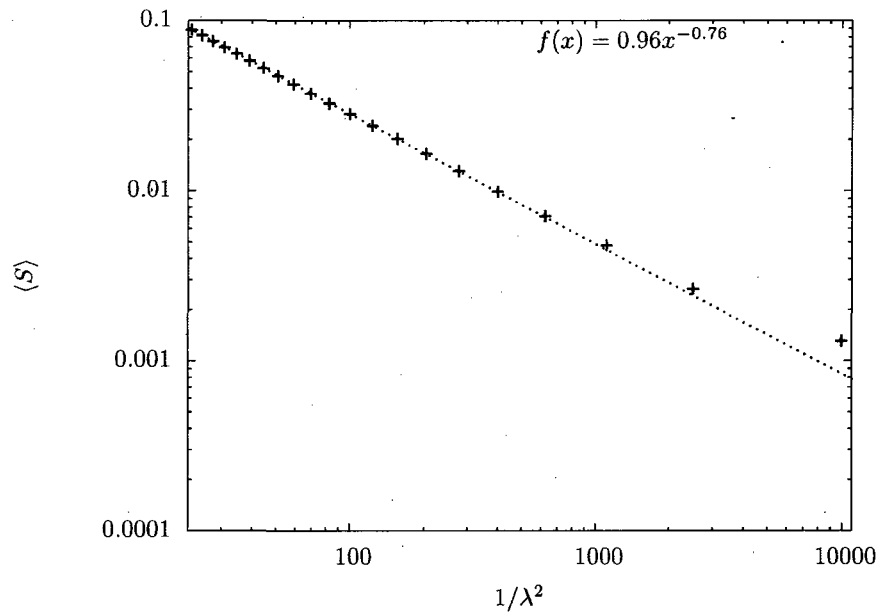


FIGURE 5.6 – Graphique log-log du paramètre d'ordre SC en fonction de  $1/\lambda^2$  à faible couplage  $\lambda$ .

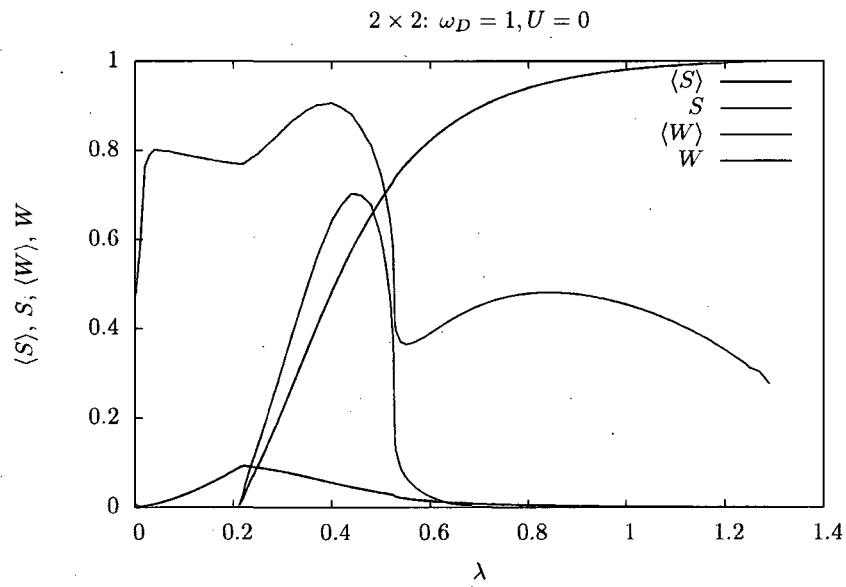


FIGURE 5.7 – Coexistence ODC/SC dans le modèle de Holstein 2D pour l'approximation unimodale ( $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ).

d'ordre passe alors brusquement d'un régime approximativement linéaire en  $\lambda$  à un régime non linéaire. Nous ne voyons pas d'explication triviale à l'existence de ce point. Passé celui-ci, le paramètre d'ordre SC diminue rapidement pour tendre vers zéro dans la limite  $\lambda = \infty$ . Comme il se doit, le paramètre d'ordre ODC sature à mesure que  $\lambda$  augmente.

Il est également intéressant de comparer la solution SC obtenue en présence de l'ODC avec celle obtenue en son absence. La différence entre ces deux cas se situe, d'après la figure 5.8, au niveau de la région de coexistence. C'est d'ailleurs ce que nous aurions pu prévoir *a priori*. Au début de cette région ( $\lambda = 0.22$ ), dans le cas où il y a coexistence, le champ de Weiss SC augmente subitement de façon à pallier l'arrivée de l'ODC. Le décalage devient également non nul plus rapidement pour la solution de coexistence, ce qui a pour effet de freiner l'augmentation du nombre moyen de phonons. Dans le cas de la SC sans ODC, nous avons vu (figure 5.3) qu'une phase normale s'immisce entre deux solutions SC. Cependant, la solution de coexistence des phases ODC et SC étant plus favorable énergétiquement que la solution normale (l'écart entre leurs énergies est minoré par  $10^{-3}$ ), nous pouvons rejeter cette dernière.

### 5.2.1 Utilisation de la symétrie particule-trou

À la section 1.1.1, la transformation particule-trou bipartite sur les spins  $\downarrow$  a été utilisée pour montrer que pour  $\mu = U/2$ , le modèle de Hubbard à  $U > 0$  est équivalent à ce même modèle avec  $U < 0$ , en autant que la composante  $z$  du spin total devienne le nombre de particules et inversement. Nous poursuivons ici ce raisonnement pour donner une explication de la coexistence ODC/SC<sup>2</sup> dans le modèle de Holstein ( $U = 0$ ) pour le mode  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\pi}$ .

Considérons la composante  $z$  de l'aimantation alternée (paramètre d'ordre antiferromagnétique (AF)) :

$$\sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{\mathbf{r}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{r}\downarrow} \rangle e^{i\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{r}} \equiv \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \rangle e^{i\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{r}}. \quad (5.3)$$

Sous la transformation susmentionnée que l'on récrit ici

$$\begin{cases} c_{\mathbf{r}\downarrow} \rightarrow e^{i\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger \\ c_{\mathbf{r}\uparrow} \rightarrow c_{\mathbf{r}\uparrow} \end{cases}, \quad (5.4)$$

<sup>2</sup>L'argument présenté ici est entièrement dû au professeur Sénéchal.



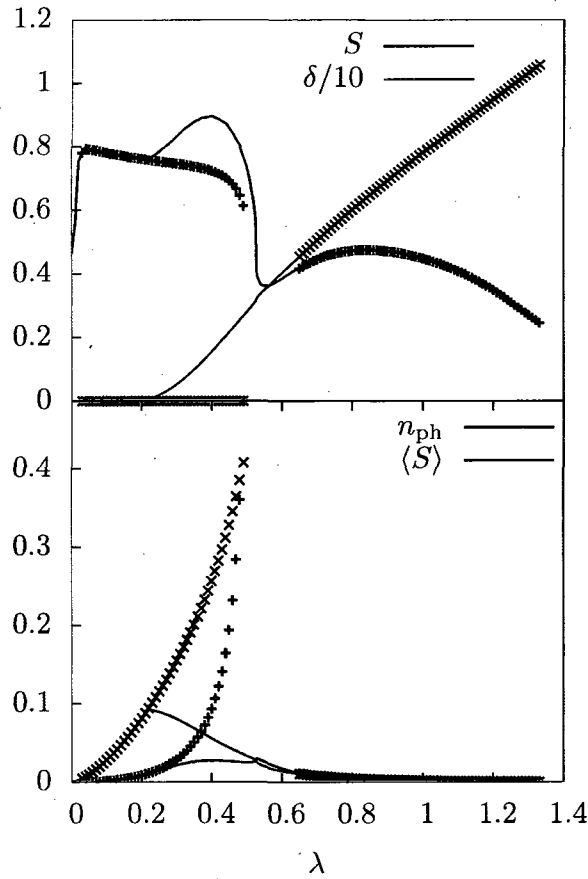


FIGURE 5.8 – Comparaison de la SC en présence (lignes) et en absence (points) de l'ODC pour  $\mathbf{q} = \pi$ .

(5.3) devient :

$$\sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{\mathbf{r}} \rangle e^{i\pi \cdot \mathbf{r}}. \quad (5.5)$$

Ainsi, sous la transformation (5.4), (5.3) devient le paramètre d'ordre ODC. Étant donnée l'invariance sous rotation dans l'espace des spins du modèle de Hubbard [56], le choix de l'axe de quantification du spin est arbitraire. Ainsi, nous aurions tout aussi bien pu utiliser le spin dans la direction  $x$  pour le paramètre d'ordre AF :

$$\sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{S}_{\mathbf{r}}^x \rangle e^{i\pi \cdot \mathbf{r}}. \quad (5.6)$$

En utilisant  $\hat{S}_r^x = c_{r\uparrow}^\dagger c_{r\downarrow} + c.h.$ , ce dernier devient sous (5.4) :

$$\sum_r \langle c_{r\uparrow}^\dagger c_{r\downarrow}^\dagger + c.h. \rangle, \quad (5.7)$$

soit le paramètre d'ordre SC de type  $s^3$ . Formellement, il apparaît que l'antiferromagnétisme du modèle de Hubbard avec  $U > 0$  est équivalent à l'onde de densité de charge ou à la supraconductivité de type  $s$  du même modèle avec  $U < 0$ , pour un réseau bipartite avec  $\mu = U/2$ . La transformation (5.4) étant involutive, la réciproque est aussi vraie. Notons que la condition  $\mu = U/2$  est essentielle. En effet, en remplaçant

$$\hat{N}_\uparrow = \frac{1}{2}(\hat{N} + \hat{S}_z) \quad \hat{N}_\downarrow = \frac{1}{2}(\hat{N} - \hat{S}_z) \quad (5.8)$$

dans l'équation (1.26), il vient pour l'hamiltonien grand canonique transformé :

$$\hat{K}' = \hat{T} - U \sum_r \hat{n}_{r\uparrow} \hat{n}_{r\downarrow} - \left(-\frac{U}{2}\right) \hat{N} + \left(\frac{U}{2} - \mu\right) \hat{S}_z + cte,$$

ce qui veut dire que  $U/2 - \mu$  joue le rôle d'un champ magnétique, brisant la symétrie sous rotation des spins s'il est non nul.

Si la fréquence de Debye dans le modèle de Holstein est assez grande pour que l'utilisation du potentiel effectif  $U_{\text{eff}}$  soit valable — donnant ainsi un modèle de Hubbard attractif —, il nous est possible d'utiliser le langage de l'antiferromagnétisme dans un modèle de Hubbard répulsif pour comprendre l'occurrence de la coexistence OSC/SC. Appliquons cela au cas de la figure 5.5, en dépit du fait que  $\omega_D$  ne soit pas assez grand. Dans la région 1, l'AF est purement selon la direction  $x$  de l'espace. L'orientation de l'aimantation change progressivement dans la région 2 : l'aimantation passe peu à peu de la direction  $x$  vers la direction  $z$ . Lorsque l'aimantation est complètement dans la direction  $z$ , nous sommes dans la région 3.

---

<sup>3</sup>La direction  $y$  est tout aussi valable. On a alors sous la transformation (5.4), avec  $\hat{S}_r^y = -i c_{r\uparrow}^\dagger c_{r\downarrow} + c.h.$  :

$$\sum_r \langle \hat{S}_r^y \rangle e^{i\pi \cdot r} \rightarrow \sum_r -i \langle c_{r\uparrow}^\dagger c_{r\downarrow}^\dagger + c.h. \rangle.$$

Cependant, le fait que les calculs numériques soient faits exclusivement avec des quantités réelles proscrie l'emploi de cette composante. L'équivalence des directions  $x$  et  $y$  est fondamentalement liée à l'invariance de jauge de la supraconductivité.

# Conclusion

Le travail rapporté dans ce mémoire servait un objectif bien précis, soit de faire un premier pas vers l'étude de l'impact des phonons sur la supraconductivité des cuprates. Pour cela, il fallait trouver un moyen d'inclure ces degrés de liberté phononiques dans la VCA, une méthode numérique de résolution d'hamiltoniens du type Hubbard utilisée par le groupe Sénéchal. L'hamiltonien choisi dans cette optique a été l'hamiltonien de Holstein-Hubbard, un hamiltonien incorporant de façon simple les vibrations du réseau.

Partant du principe que c'est souvent un mode donné qui domine la physique d'un système donné et tenant compte des limites d'un traitement numérique des phonons, nous avons fait usage de l'approximation unimodale, consistant à ne retenir qu'un seul mode de phonons dans l'hamiltonien.

En une dimension, l'hamiltonien de Holstein-Hubbard présente trois phases, soient les phases isolantes de Peierls (onde de densité de charge) et de Mott ainsi qu'une phase métallique. La présence de cette dernière, toutefois, ne fait pas l'unanimité dans la littérature. Selon les quantités physiques qui nous sont accessibles *via* la VCA, nous ne trouvons pas cette phase.

Nous avons ensuite examiné la supraconductivité de type *s* et la coexistence supraconductivité/onde de densité de charge en dimension deux, pour le modèle de Holstein. À faible couplage, le système est supraconducteur alors qu'à fort couplage, c'est un isolant de Peierls. Entre les deux, les phases de Peierls et supraconductrice coexistent.

Au fil des calculs et des comparaisons avec la littérature, nous avons pu percevoir les limites de l'approximation unimodale. En dimension un, la phase de Peierls est anormalement robuste, du moins en comparaison avec la littérature. Lorsque ce n'est pas un mode de phonons donné qui domine outrageusement, par exemple pour la supraconductivité en deux dimensions, le choix d'un seul mode est visiblement peu approprié.

Une façon d'aller plus loin que l'approximation à un mode serait de considérer les états de phonons optimisés [57, 58]. Ce sont des états qui permettent de réduire sensiblement

le nombre de phonons par site, sans amputer la physique liée à ces derniers.

## Annexe A

# Transformées de Fourier sur les réseaux

Dans cette annexe, nous définissons les transformées de Fourier sur les réseaux  $\gamma$  et  $\Gamma$ , ainsi que sur les sites d'un amas. Certaines relations utilisées dans le texte sont également dérivées. À des fins de simplification, nous nous restreignons aux systèmes unidimensionnels.

### A.1 Transformée de Fourier sur le réseau $\gamma$

Soit un système linéaire de  $N_s$  sites séparés d'une distance  $a$  et une fonction  $f : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{E}$ , où l'ensemble de départ est constitué des  $N_s$  points représentant les sites et l'ensemble d'arrivée reste indéterminé pour l'instant. On suppose des conditions aux limites périodiques, c'est-à-dire que  $f_n = f_{n+N_s}$  ( $n$  est une variable discrète). La transformée de Fourier discrète de  $f_n$  s'écrit :

$$f_k = A \sum_{n=1}^{N_s} f_n e^{-ikna}, \quad (\text{A.1})$$

où  $A$  est une constante à déterminer. On peut écrire  $f_n$  à partir de ses coefficients :

$$f_n = B \sum_k f_k e^{ikna}. \quad (\text{A.2})$$

Les conditions aux limites imposent que

$$f_n = f_{n+N_s} = B \sum_k f_k e^{ikna} = B \sum_k f_k e^{ikna} e^{ikN_s a}, \quad (\text{A.3})$$

c'est-à-dire que  $e^{ikN_s a} = e^{i2\pi m} \Rightarrow k = 2\pi m/N_s a$  avec  $m = -N_s/2 + 1, \dots, N_s/2$ , en supposant  $N_s$  pair. Cette dernière restriction sur les valeurs de  $k$  vient du fait que pour  $m = -N_s/2$  ( $k = -\pi/a$ ), on a  $e^{ikna} = e^{-i\pi n} = (-1)^n$  et nous retompons sur le facteur de phase de  $k = \pi/a$ . Les  $k$  permis sont ceux situés dans la première zone de Brillouin de  $\gamma$  (notée  $ZB_\gamma$ )<sup>1</sup>. Il nous reste à déterminer la valeur de A et B. Pour cela, remplaçons (A.2) dans (A.1) pour donner :

$$f_k = AB \sum_{n=1}^{N_s} \sum_{k'} f_{k'} e^{ik'na} e^{-ikna} = AB \sum_{k'} f_{k'} \sum_{n=1}^{N_s} e^{i(k'-k)na}. \quad (\text{A.4})$$

Pour que la partie de droite de (A.4) soit égale à la partie de gauche, il faut que  $\sum_{n=1}^{N_s} e^{i(k'-k)na} \propto \delta_{k,k'}$ . Mais puisque pour  $k = k'$  la sommation donne trivialement  $N_s$ , on a

$$\sum_{n=1}^{N_s} e^{i(k'-k)na} = N_s \delta_{k,k'}, \quad (\text{A.5})$$

d'où  $AB = 1/N_s$ . Nous avons donc une certaine liberté pour le choix de A et B. On prend  $A = B = 1/\sqrt{N_s}$  pour des raisons qui deviendront claires un peu plus loin. On a donc :

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{n=1}^{N_s} f_n e^{-ikna}, \quad f_n = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k f_k e^{ikna}, \quad (\text{A.6})$$

ou, définissant  $x = na$  :

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_x f_x e^{-ikx}, \quad f_x = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k f_k e^{ikx}. \quad (\text{A.7})$$

**EXEMPLE :** Pour les opérateurs de création ( $c_x^\dagger$ ) et d'annihilation ( $c_x$ ) d'un électron

<sup>1</sup>En fait, nous aurions tout aussi bien pu prendre  $m = 0, \dots, N_s - 1$  ou n'importe quel autre intervalle de  $N_s$  valeurs consécutives de  $m$ . Cet arbitraire dans le choix de l'intervalle surgit de l'arbitraire dans le choix de la position de la  $ZB_\gamma$  dans l'ensemble des valeurs possibles pour  $k$ , valeurs qui sont *a priori* déterminées par les conditions de bord.

sans spin au site  $x$ , on a :

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_x c_x e^{-ikx}, \quad c_x = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k c_k e^{ikx}. \quad (\text{A.8})$$

Étant donné que  $\{c_x, c_{x'}^\dagger\} = \delta_{x,x'}$ , on a :

$$\begin{aligned} \{c_k, c_{k'}^\dagger\} &= \frac{1}{N_s} \left\{ \sum_x c_x e^{-ikx}, \sum_{x'} c_{x'}^\dagger e^{ik'x'} \right\} \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_{x,x'} \{c_x, c_{x'}^\dagger\} e^{i(k'x' - kx)} \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_x e^{i(k' - k)x} \\ &= \frac{1}{N_s} N_s \delta_{k,k'} \\ &= \delta_{k,k'}. \end{aligned}$$

Avec la définition (A.7) pour la transformée de Fourier, il vient que  $c_k^\dagger c_k$  est l'opérateur nombre d'électrons dans l'état  $k$ .

## A.2 Division du système en amas

Subdivisons le système de  $N_s$  sites en  $N_s/L$  amas identiques de  $L$  sites adjacents. Il est évident que  $L$  doit être un diviseur de  $N_s$ <sup>2</sup>. Prenons le même point - par exemple le premier - de chacun de ces sous-ensembles. La distance entre ces points est  $La$ . La transformée de Fourier discrète d'une fonction  $f : \mathbb{D}' \rightarrow \mathbb{E}$ , où  $\mathbb{D}' \subseteq \mathbb{D}$ , c'est-à-dire dont l'ensemble de départ est un sous-ensemble des points du système, se définit de façon analogue à ce qui a été fait ci-dessus. On écrit alors

$$f_{\bar{k}} = A' \sum_{p=1}^{N_s/L} f_p e^{-i\bar{k}pLa}, \quad f_p = B' \sum_{\bar{k}} f_{\bar{k}} e^{i\bar{k}pLa}. \quad (\text{A.9})$$

---

<sup>2</sup> $N_s$  est supposé fini mais grand.

Les conditions aux limites imposent :

$$f_p = f_{p+N_s/L} \Rightarrow B' \sum_{\tilde{k}} f_{\tilde{k}} e^{i\tilde{k}pLa} = B' \sum_{\tilde{k}} f_{\tilde{k}} e^{i\tilde{k}pLa} e^{i\tilde{k}N_s a}, \quad (\text{A.10})$$

ce qui donne exactement la même distance entre les valeurs permises pour  $\tilde{k}$  que celles établies pour le système original. Cette fois-ci, néanmoins, il y a  $N_s/L$  valeurs de  $\tilde{k}$  permises, c'est-à-dire  $\tilde{k} = 2\pi m/N_s a$  avec  $m = N_s/2L - 1, \dots, N_s/2L$ . Il reste à évaluer  $A'$  et  $B'$ . Pour cela, à l'instar de ce qui a été fait précédemment, on remplace l'expression pour  $f_p$  dans celle pour  $f_{\tilde{k}}$ , ce qui donne :

$$f_{\tilde{k}} = A' B' \sum_{p=1}^{N_s/L} \sum_{\tilde{k}'} f_{\tilde{k}'} e^{i\tilde{k}'pLa} e^{-i\tilde{k}pLa} = A' B' \sum_{\tilde{k}'} \sum_{p=1}^{N_s/L} e^{i(\tilde{k}'-\tilde{k})pLa}. \quad (\text{A.11})$$

Encore une fois, pour que l'expression de droite donne  $f_{\tilde{k}}$ , il faut que  $\sum_{p=1}^{N_s/L} e^{i(\tilde{k}'-\tilde{k})pLa} \propto \delta_{\tilde{k},\tilde{k}'}$ , et puisque  $\sum_{p=1}^{N_s/L} 1 = N_s/L$  on a :

$$\sum_{p=1}^{N_s/L} e^{i(\tilde{k}'-\tilde{k})pLa} = \frac{N_s}{L} \delta_{\tilde{k},\tilde{k}'}. \quad (\text{A.12})$$

Au final, on a donc, avec la définition  $\tilde{x} = pLa$  :

$$f_{\tilde{k}} = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{x}} f_{\tilde{x}} e^{-i\tilde{k}\tilde{x}}, \quad f_{\tilde{x}} = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{k}} f_{\tilde{k}} e^{i\tilde{k}\tilde{x}}. \quad (\text{A.13})$$

Il reste maintenant à établir la transformée de Fourier pour des fonctions définies sur les points d'un amas. On définit :

$$f_K = A'' \sum_{b=0}^{L-1} f_b e^{-iKba}, \quad f_b = B'' \sum_K f_K e^{iKba}. \quad (\text{A.14})$$

Par le même processus que précédemment, on trouve, avec  $X \in \{ba : b = 0, 1, \dots, L-1\}$  :

$$f_K = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_X f_X e^{-iKX}, \quad f_X = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_K f_K e^{iKX} \quad (\text{A.15})$$

où  $K = 2\pi m/La$ ,  $m = -L/2 + 1, \dots, L/2$ . Comme  $K\tilde{x} = 2\pi\mathbb{Z}$ ,  $K \in \Gamma^*$ .



RÉSUMÉ : Nous avons défini les transformées de Fourier suivantes :

1. Sur le réseau :

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_x f_x e^{-ikx}, \quad f_x = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k f_k e^{ikx} \quad (\text{A.16})$$

2. Sur le super-réseau :

$$f_{\tilde{k}} = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{x}} f_{\tilde{x}} e^{-i\tilde{k}\tilde{x}}, \quad f_{\tilde{x}} = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{k}} f_{\tilde{k}} e^{i\tilde{k}\tilde{x}} \quad (\text{A.17})$$

3. Sur l'amas :

$$f_K = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_X f_X e^{-iKX}, \quad f_X = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_K f_K e^{iKX} \quad (\text{A.18})$$

## A.3 Application aux quantités du problème

### A.3.1 Quantités à un indice

Soient  $c_x^\dagger$  et  $c_x$  les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron dans une orbitale de Wannier centrée en  $x = na$ . Comme l'indice composé  $(\tilde{x}, X)$  est équivalent à l'indice  $x$ , on a les transformées suivantes pour, par exemple,  $c_x = c_{\tilde{x}X}$  :

$$c_x = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k c_k e^{ikx} \quad (\text{A.19})$$

ou

$$c_{\tilde{x}X} = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{k}} c_{\tilde{k}X} e^{i\tilde{k}\tilde{x}} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\tilde{k}, K} c_{\tilde{k}K} e^{i\tilde{k}\tilde{x} + iKX}, \quad (\text{A.20})$$

avec

$$c_{\tilde{k}X} = \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_{\tilde{x}} c_{\tilde{x}X} e^{-i\tilde{k}\tilde{x}}, \quad c_{\tilde{k}K} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\tilde{x}, X} c_{\tilde{x}X} e^{-i\tilde{k}\tilde{x} - iKX}. \quad (\text{A.21})$$

On dérive maintenant la relation entre les représentations  $k$  et  $(\tilde{k}, K)$ <sup>3</sup> :

$$c_k = c_{\tilde{k}K} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\tilde{x}, X} c_{\tilde{x}X} e^{-i(\tilde{k}+K)(\tilde{x}+X)}. \quad (\text{A.22})$$

Puisque  $K \in \Gamma^*$ ,  $e^{-iK\tilde{x}} = 1$ , d'où :

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\tilde{x}, X} c_{\tilde{x}X} e^{-i(\tilde{k}\tilde{x} + \tilde{k}X + KX)} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sqrt{\frac{N_s}{L}} \sqrt{\frac{L}{N_s}} \sum_X \sum_{\tilde{x}} c_{\tilde{x}X} e^{-i\tilde{k}\tilde{x}} e^{-i(\tilde{k}X + KX)} \\ \Rightarrow c_k &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_X c_{\tilde{k}X} e^{-i(\tilde{k}X + KX)} = \frac{1}{L} \sum_X \sum_{K'} c_{\tilde{k}K'} e^{i(K' - \tilde{k} - K)X}. \end{aligned}$$

Finalement,

$$c_{\tilde{k}K} = \sum_{K'} \Lambda_{KK'}(\tilde{k}) c_{\tilde{k}K'}, \quad (\text{A.23})$$

où

$$\Lambda_{KK'}(\tilde{k}) = \frac{1}{L} \sum_X e^{i(K' - \tilde{k} - K)X}. \quad (\text{A.24})$$

### A.3.2 Quantités à deux indices

Essayons d'appliquer les formules pour les transformées de Fourier à la matrice de saut  $t_{xx'}$ . En seconde quantification, un opérateur à un corps est donné par :

$$U = \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | U | \mu \rangle c_\lambda^\dagger c_\mu, \quad (\text{A.25})$$

où  $\{|\alpha\rangle\}$  constitue une base de l'espace de Hilbert à une particule. Dans le cas présent, nous prenons la base de Wannier  $|x\rangle$ . Il vient pour l'énergie cinétique :

$$K = \sum_{x, x'} \langle x | t | x' \rangle c_x^\dagger c_{x'} = \sum_{x, x'} t_{xx'} c_x^\dagger c_{x'}. \quad (\text{A.26})$$

On prend la transformée des opérateurs création et annihilation pour donner :

$$K = \frac{1}{N_s} \sum_{x, x'} \sum_{k, k'} t_{xx'} c_k^\dagger c_{k'} e^{-ikx} e^{ik'x'}. \quad (\text{A.27})$$

<sup>3</sup>Nous utiliserons de façon interchangeable les notations  $c_K(\tilde{k})$  et  $c_{\tilde{k}K}$ . L'utilisation de l'une ou l'autre est une question de lisibilité.

On définit donc la transformée de Fourier d'une quantité dépendant de deux sites :

$$t_{kk'} = \frac{1}{N_s} \sum_{x,x'} t_{xx'} e^{-ikx+ik'x'}. \quad (\text{A.28})$$

Faisons le changement de variable  $x' \rightarrow x' + x$  :

$$\Rightarrow K = \frac{1}{N_s} \sum_{x,x'} \sum_{k,k'} t_{x,x'+x} c_k^\dagger c_{k'} e^{i(k'-k)x} e^{ik'x'}. \quad (\text{A.29})$$

L'invariance sous translation du réseau implique que  $t_{x,x'+x} = t_{0,x'}$ . Ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_s} \sum_{x,x'} \sum_{k,k'} t_{x,x'+x} c_k^\dagger c_{k'} e^{i(k'-k)x} e^{ik'x'} &= \frac{1}{N_s} \sum_{x,x'} \sum_{k,k'} t_{0x'} c_k^\dagger c_{k'} e^{i(k'-k)x} e^{ik'x'} \\ &= \sum_{x',k} t_{0x'} c_k^\dagger c_k e^{ikx'} \\ &= \sum_k \epsilon(k) c_k^\dagger c_k, \end{aligned}$$

où  $\epsilon(k) = \sum_x t_{0x} e^{ikx}$ .

Une autre représentation utile est la représentation dite mixte. On écrit :

$$t_{XX'}(\tilde{k}, \tilde{k}') = \frac{L}{N_s} \sum_{\tilde{x}, \tilde{x}'} t_{\tilde{x}, X \tilde{x}' X'} e^{-i(\tilde{k}\tilde{x} - \tilde{k}'\tilde{x}')}. \quad (\text{A.30})$$

On fait le changement de variable :  $\tilde{x}' \rightarrow \tilde{x}' + \tilde{x}$  :

$$t_{XX'}(\tilde{k}, \tilde{k}') = \frac{L}{N_s} \sum_{\tilde{x}, \tilde{x}'} t_{\tilde{x}, X \tilde{x}'+\tilde{x} X'} e^{-i(\tilde{k}\tilde{x} - \tilde{k}'\tilde{x}' - \tilde{k}'\tilde{x})}. \quad (\text{A.31})$$

Étant donnée l'invariance par translation dans  $\Gamma$ , il vient :

$$\begin{aligned} t_{XX'}(\tilde{k}, \tilde{k}') &= \frac{L}{N_s} \sum_{\tilde{x}, \tilde{x}'} t_{0X, \tilde{x}' X'} e^{-i(\tilde{k}\tilde{x} - \tilde{k}'\tilde{x}' - \tilde{k}'\tilde{x})} \\ &= \delta_{\tilde{k}, \tilde{k}'} \sum_{\tilde{x}'} t_{0X, \tilde{x}' X'} e^{i\tilde{k}\tilde{x}'}. \end{aligned}$$

$t_{XX'}(\tilde{k}, \tilde{k}')$  est donc diagonal en  $\tilde{k}$ . On écrit donc, pour simplifier :

$$t_{XX'}(\tilde{k}) = \sum_{\tilde{x}'} t_{0X, \tilde{x}'X'} e^{i\tilde{k}\tilde{x}'}. \quad (\text{A.32})$$

### Relation entre les représentations $k$ et $(\tilde{k}, K)$ pour une quantité à deux indices

On veut obtenir  $G(\tilde{k} + K, \tilde{k} + K')$  en fonction des  $G_{K, K'}(\tilde{k}, \tilde{k})$ . On rappelle que pour une quantité à un indice :

$$c_{\tilde{k}+K} = c_{\tilde{k}K} = \frac{1}{L} \sum_X \sum_{K'} c_{\tilde{k}K'} e^{i(K' - \tilde{k} - K)X}, \quad (\text{A.33})$$

d'où, pour  $G(\tilde{k} + K, \tilde{k} + K')$  :

$$G(\tilde{k} + K, \tilde{k} + K') = \frac{1}{L^2} \sum_{X, X'} \sum_{K_1, K'_1} G_{K_1, K'_1}(\tilde{k}, \tilde{k}) e^{i(K_1 - \tilde{k} - K)X} e^{-i(K'_1 - \tilde{k} - K')X'} \quad (\text{A.34})$$

$$= (\Lambda(\tilde{k})G\Lambda^\dagger(\tilde{k}))_{KK'}. \quad (\text{A.35})$$

# Bibliographie

- [1] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc.* A276(238) (1963).
- [2] X.J. Zhou, T. Cuk, T. P. Devereaux, N. Nagaosa, et Z.-X. Shen. *Handbook of High -Temperature Superconductivity*, chapitre Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy on Electronic Structure and Electron-Phonon Coupling in Cuprate Superconductors, 87–144. Springer (2007).
- [3] Jorge E. Hirsch et Eduardo Fradkin. Phase diagram of one-dimensional electron-phonon systems. ii. the molecular-crystal model. *Phys. Rev. B* 27(7), 4302–4316 (1983).
- [4] Eric Jeckelmann, Chunli Zhang, et Steven R. White. Metal-insulator transition in the one-dimensional Holstein model at half filling. *Phys. Rev. B* 60(11), 7950–7955 (1999).
- [5] R. T. Clay et R. P. Hardikar. Intermediate phase of the one dimensional half-filled Hubbard-Holstein model. *Phys. Rev. Lett.* 95(9), 096401 (2005).
- [6] H. Fehske, G. Hager, et J. Jeckelmann. Metallicity in the half-filled Holstein-Hubbard model. *EPL* 84, 57001 (2008).
- [7] Ka-Ming Tam, S. W. Tsai, D. K. Campbell, et A. H. Castro Neto. Retardation effects in the Holstein-Hubbard chain at half-filling. *Phys. Rev. B* 75, 161103 (2007).
- [8] T. Holstein. Studies of polaron motion : Part i. the molecular-crystal model. *Ann. Phys.* 8(325) (1959).
- [9] Elliott H. Lieb. The Hubbard model : Some rigorous results and open problems. In *XIth International Congress of Mathematical Physics*, D. Iagolnitzer, éditeur, 392–412. International Press, (1995).
- [10] M. C. Gutzwiller. Effect of correlations on the ferromagnetism of transition metals. *Phys. Rev. Lett.* 10(159) (1963).
- [11] P. W. Anderson. The resonating valence bond state in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and superconductivity. *Science* 235(1196) (1987).
- [12] David Sénéchal. *Mécanique Quantique*. Université de Sherbrooke (2000).
- [13] A. Altland et B. Simons. *Condensed matter field theory*. Cambridge University Press, (2006).

- [14] 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.* 20(25), 1445–1448 (1968).
- [15] Elliott H. Lieb et F. Y. Wu. The one-dimensional Hubbard model : a reminiscence. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 321(1-2), 1 – 27 (2003). Statphys-Taiwan-2002 : Lattice Models and Complex Systems.
- [16] Patrik Fazekas. *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. World Scientific, (1999).
- [17] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, et M.J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* 68, 13 – 25 (1996).
- [18] H. Park, K. Haule, et G. Kotliar. Cluster dynamical mean field theory of the mott transition. *Phys. Rev. Lett.* 101(18), 186403 (2008).
- [19] M. Balzer, B. Kyung, D. Sénéchal, A. M. S. Tremblay, et M. Potthoff. First-order Mott transition at zero temperature in two dimensions : Variational plaquette study. *Europhys. Lett.* 85, 17002 (2009).
- [20] Sordi G., Haule K., et Tremblay A.-M. S. Finite doping signatures of the Mott transition in the two-dimensional Hubbard model. *arXiv : 1002.2960v1* (2010).
- [21] Mario Rasetti, éditeur. *The Hubbard Model : Recent results*. World Scientific, (1991).
- [22] O. Madelung. *Introduction to Solid-State Theory*. Springer Series in Solid-State Sciences 2. Springer-Verlag, (1978).
- [23] Yasutami Takada et Ashok Chatterjee. Possibility of a metallic phase in the charge-density-wave-density-wave crossover region in the one-dimensional Hubbard-Holstein model at half filling. *Phys. Rev. B* 67(8), 081102 (2003).
- [24] Subir Sachdev. *Quantum phase transitions*. Cambridge University Press, (2001).
- [25] Joseph M. Carpinelli, Hanno H. Weitering, E. Ward Plummer, et Roland Stumpf. Direct observation of a surface charge density wave. *Nature* 381(6581), 398–400 (1996).
- [26] G. Grüner. The dynamics of charge-density waves. *Rev. Mod. Phys.* 60(4), 1129–1181 (1988).
- [27] George Grüner. *Density Waves in Solids*. Frontiers in Physics. Perseus Publishing, (1994).
- [28] Claude Bourbonnais. *Physique Statistique*. Université de Sherbrooke.
- [29] J. Bardeen, L. N. Cooper, et J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.* 108(5), 1175–1204 (1957).
- [30] Leon N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.* 104(4), 1189–1190 (1956).

- [31] André-Marie Tremblay. *Symétries brisées et états cohérents*. Université de Sherbrooke, (2008).
- [32] David Sénéchal, Danny Perez, et Dany Plouffe. Cluster perturbation theory for Hubbard models. *Phys. Rev. B* 66(7), 075129 (2002).
- [33] André-Marie Tremblay. *Problème à N corps*. Université de Sherbrooke, (2002).
- [34] A. Ruhe. *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems : A Practical Guide*, chapitre 4.1. SIAM (2000).
- [35] Jane K. Cullum et Ralph A. Willoughby. *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations*. SIAM, (2002).
- [36] Elbio Dagotto. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.* 66(3), 763–840 (1994).
- [37] David Sénéchal. An introduction to quantum cluster methods. *arXiv : 0806.2690* (2008).
- [38] M. Guillot. Compétition entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle de Hubbard appliqué aux cuprates. Mémoire de Maîtrise, Université de Sherbrooke, (2007).
- [39] L. Landau et E. Lifchitz. *Mécanique Quantique*. Mir, 3e édition, (1980).
- [40] A. Damascelli, Z. Hussain, et Z.-X. Shen. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. *Rev. Mod. Phys.* 75, 473 (2003).
- [41] David Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. Hot spots and pseudogaps for hole- and electron-doped high-temperature superconductors. *Phys. Rev. Lett.* 92(12), 126401 (2004).
- [42] M. Potthoff, M. Aichhorn, et C. Dahnken. Variational cluster approach to correlated electron systems in low dimensions. *Phys. Rev. Lett.* 91(20), 206402 (2003).
- [43] K. Fossheim et A. Sudbo. *Superconductivity : Physics and Applications*. Wiley, (2004).
- [44] M. Potthoff. Non-perturbative construction of the Luttinger-Ward functional. *arXiv : 0406671* (2004).
- [45] Gordon Baym et Leo P. Kadanoff. Conservation laws and correlation functions. *Phys. Rev.* 124(2), 287–299 (1961).
- [46] M. Potthoff. Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* 32(4), 429–436 (2003).
- [47] R. P. Hardikar et R. T. Clay. Phase diagram of the one-dimensional Hubbard-Holstein model at half and quarter filling. *Phys. Rev. B* 75(24), 245103 (2007).
- [48] Masaki Tezuka, Ryotaro Arita, et Hideo Aoki. Phase diagram for the one-dimensional Hubbard-Holstein model : A density-matrix renormalization group study. *Phys. Rev. B* 76(15), 155114 (2007).

- [49] E. Berger, P. Valášek, et W. von der Linden. Two-dimensional Hubbard-Holstein model. *Phys. Rev. B* 52(7), 4806–4814 (1995).
- [50] F. Marsiglio. Pairing and charge-density-wave correlations in the Holstein model at half-filling. *Phys. Rev. B* 42(4), 2416–2424 (1990).
- [51] R. T. Scalettar, N. E. Bickers, et D. J. Scalapino. Competition of pairing and Peierls charge-density-wave correlations in a two-dimensional electron-phonon model. *Phys. Rev. B* 40(1), 197–200 (1989).
- [52] A. Hübsch S. Sykora et K. W. Becker. Coexistence of superconductivity and charge-density waves in a two-dimensional Holstein model at half-filling. *Europhys. Lett.* 85(57003) (2009).
- [53] H. Fehske et E. Jeckelmann. Quantum phase transitions in one-dimensional electron-phonon systems. In *Proc. Int. School of Physics "Enrico Fermi", Course CLXI*, G. de Filippis G. Iadonisi, J. Ranninger, éditeurs, 297–311. IOS Press Amsterdam, (2006).
- [54] M. Capone, P. Carta, et S. Ciuchi. Dynamical mean field theory of polarons and bipolarons in the half-filled Holstein model. *Phys. Rev. B* 74(4), 045106 (2006).
- [55] Martin Hohenadler et Wolfgang Linden. *Polarons in Advanced Materials*, volume 103 de *Springer Series in Materials Science*, chapitre Lang-Firsov Approaches to Polaron Physics : From Variational Methods to Unbiased Quantum Monte Carlo Simulations, 463–502. Springer (2007).
- [56] C.N. Yang et S.C. Zhang.  $SO_4$  Symmetry in a Hubbard Model. *International Journal of Modern Physics B* 5(6-7), 977–984 (1991).
- [57] Chunli Zhang, Eric Jeckelmann, et Steven R. White. Density matrix approach to local Hilbert space reduction. *Phys. Rev. Lett.* 80(12), 2661–2664 (1998).
- [58] A. Weiße, H. Fehske, G. Wellein, et A. R. Bishop. Optimized phonon approach for the diagonalization of electron-phonon problems. *Phys. Rev. B* 62(2), R747–R750 (2000).