

**Approximation auto-cohérente à deux
particules, pseudogap et supraconductivité
dans le modèle de Hubbard attractif**

par

Steve Allen

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

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Août 2000



**National Library
of Canada**

**Acquisitions and
Bibliographic Services**

**395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

**Bibliothèque nationale
du Canada**

**Acquisitions et
services bibliographiques**

**395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

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

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

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

0-612-67579-3

Canada

Le 24 août 2000, le jury suivant a accepté cette thèse dans sa version finale.
date

Président-rapporteur: M. René Côté
Département de physique

Membre: M. David Sénéchal
Département de physique

Membre: M. André-Marie Tremblay
Département de physique

Membre externe: M. Nicolas Dupuis
Université Paris-Sud

SOMMAIRE

Dans cette thèse nous présentons une nouvelle méthode non perturbative pour le calcul des propriétés d'un système de fermions. Notre méthode généralise l'approximation auto-cohérente à deux particules proposée par Vilk et Tremblay pour le modèle de Hubbard répulsif. Notre méthode peut s'appliquer à l'étude du comportement pré-critique lorsque la symétrie du paramètre d'ordre est suffisamment élevée. Nous appliquons la méthode au problème du pseudogap dans le modèle de Hubbard attractif. Nos résultats montrent un excellent accord avec les données Monte Carlo pour de petits systèmes. Nous observons que le régime où apparaît le pseudogap dans le poids spectral à une particule est un régime classique renormalisé caractérisé par une fréquence caractéristique des fluctuations supraconductrices inférieure à la température. Une autre caractéristique est la faible densité de superfluide de cette phase démontrant que nous ne sommes pas en présence de paires préformées.

Les résultats obtenus semblent montrer que la haute symétrie du paramètre d'ordre et la bidimensionalité du système étudié élargissent le domaine de température pour lequel le régime pseudogap est observé. Nous argumentons que ce résultat est transposable aux supraconducteurs à haute température critique où le pseudogap apparaît à des températures beaucoup plus grandes que la température critique. La forte symétrie dans ces systèmes pourraient être reliée à la théorie $SO(5)$ de Zhang.

En annexe, nous démontrons un résultat tout récent qui permettrait d'assurer l'auto-cohérence entre les propriétés à une et à deux particules par l'ajout d'une dynamique au vertex irréductible. Cet ajout laisse entrevoir la possibilité d'étendre la méthode au cas d'une forte interaction.

REMERCIEMENTS

Toute la réalisation de ce travail n'aurait pu se faire sans l'aide et l'appui précieux d'André-Marie Tremblay. Je le remercie pour m'avoir proposé ce projet de recherche et avoir eu la patience de m'expliquer la physique liée à ce projet. Son aide pour la rédaction de la thèse a été très importante.

Je tiens aussi à exprimer un remerciement tout particulier à mon frère Dave. Ses connaissances et sa compréhension de la physique m'ont été d'une grande aide. Ses commentaires lors de la rédaction de la thèse ont été grandement bénéfiques et ont permis de la rendre un peu plus lisible.

Je remercie aussi mes parents ma famille et mes amis pour leur appui moral dans les moments plus difficiles, comme dans les moments plus agréables. Vous avez su me donner le courage de mener à terme mes études. Je remercie aussi mes collègues de bureau et tous les membres du département qui ont rendu mon séjour agréable à Sherbrooke.

Je tiens à souligner la contribution importante de plusieurs personnes à ce projet. Merci tout particulier à François Lemay et Bumsoo Kyung qui m'ont fourni une partie des résultats numériques présentés dans cette thèse. Merci également à David Poulin et Hugo Touchette qui ont contribué à l'élaboration du programme de Monte Carlo et de prolongement analytique. Pour leur soutien, aide et apport au niveau informatique, je tiens à souligner l'apport d'Alain Veilleux et de Michel Barrette.

Je remercie l'institut canadien de recherches avancées (CIAR) pour m'avoir permis de participer à un nombre incalculable de conférences et d'écoles d'été sur le thème de la supraconductivité. Je remercie également le CERPEMA, la Faculté des sciences de l'Université de Sherbrooke et le Centre de recherches mathématiques qui m'ont également permis de participer à des conférences. La participation à ces conférences m'a permis de rencontrer et d'échanger avec des

gens qui ont su me conseiller et m'expliquer un bon nombre de choses. Je remercie Yuri Vilk, Robert Gooding, Massimiliano Capezzali, Raymond Frésard, Laurent Raymond, Anne-Marie Daré, Alexandre Zagoskin et Nicolas Dupuis.

Je tiens à remercier le CRSNG, le Fonds FCAR et le CERPEMA pour leur précieuses aides financières tout au long de ces études. Pour l'accès à des ordinateurs de grande puissance, je remercie le CRSNG le CACPUS et la Faculté des Sciences pour m'avoir donné accès à un IBM-SP et à une grappe de type Beowulf.

TABLE DES MATIÈRES

Sommaire	ii
Remerciements	iii
Table des matières	v
Liste des abréviations	vii
Liste des tableaux	viii
Liste des figures	ix
Liste des annexes	xi
INTRODUCTION	1
Chapitre 1: MOTIVATION ET MISE EN CONTEXTE	5
1.1 La supraconductivité à haute température	5
1.2 Pseudogap	7
1.3 Modèle de Hubbard attractif	12
1.4 Quelques études antérieures du modèle de Hubbard	19
Chapitre 2: FORMALISME	22
2.1 Relations exactes	24
2.1.1 Définitions	24
2.1.2 Équation du mouvement	26
2.2 Équation de Bethe-Salpeter	28
2.2.1 Définition	28
2.2.2 Transformation de Legendre	31
2.3 Estimation des vertex irréductibles	32
2.3.1 Approximation de la self-énergie	32
2.3.2 Détermination de la fonction de corrélation	35
2.3.3 Détermination de la double occupation	37
2.3.4 Raffinement de l'approximation	38
2.4 Règles de somme	40

2.4.1 Moments de la susceptibilité	41
2.4.2 Comparaison avec l'approche des moments	44
2.4.3 Théorème de Mermin-Wagner	45
2.4.4 Est-ce que notre approche est conservative?	47
Chapitre 3: COMPARAISON AUX DONNÉES MONTE CARLO . . .	50
3.1 Monte Carlo quantique	52
3.2 Validation des approximations de la méthode analytique	55
3.3 Propriétés à une particule	60
3.3.1 Poids de quasiparticules	60
3.3.2 Spectre à une particule	61
3.3.3 Étude en taille	66
3.4 Régime classique renormalisé	70
3.4.1 Comportement critique de la susceptibilité de paires	71
3.4.2 Fréquences caractéristiques	74
3.5 Mécanisme pour la formation du pseudogap	78
3.5.1 Densité de suprafluide	78
3.5.2 Précurseurs de l'état ordonné	80
3.6 Longueurs caractéristiques	83
3.6.1 Longueur de corrélation de paires	83
3.6.2 Effet des fluctuations sur le spectre à une particule	85
3.6.3 Longueur d'onde thermique de de Broglie	88
3.7 Hors demi-remplissage	91
CONCLUSION	97
BIBLIOGRAPHIE	121

LISTE DES ABRÉVIATIONS

2D	Bidimensionnel
AFM	Antiferromagnétisme
BCS	Théorie développée par Bardeen, Cooper et Shrieffer pour expliquer la supraconductivité.
BKT	Transition sans ordre à longue portée dont l'existence a été démontrée par Berezinskii et par Kosterlitz et Thouless.
FLEX	Nom donnée à une approximation d'après son appellation en anglais "Fluctuation exchange approximation".
MCQ	Monte Carlo quantique
MME	Méthode de maximisation d'entropie
PG	Pseudogap
RPA	Nom d'une approximation dont l'abréviation provient de son nom anglais: "Random Phase approximation".
SC	Supraconductivité
SC hT_c	Supraconducteur à haute température critique
TPSC	Nom d'une approximation dont l'abréviation vient de son appellation anglaise: "Two-particle self-consistent".

LISTE DES TABLEAUX

1. Vertex irréductible en approximation locale	59
2. Valeurs moyennes de double occupation	59
3. Fréquences caractéristiques des fluctuations de paires.	76
4. Potentiel chimique	93
5. Température critique prédite par une théorie champ moyen.	95

LISTE DES FIGURES

1. Diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique.	7
2. Diagramme de phase du modèle de Hubbard: Température-remplissage	13
3. Diagramme de phase du modèle de Hubbard: Température-interaction	15
4. Poids spectral prévu pour quatre points du diagramme de phase .	18
5. Susceptibilité de paires en fonction du vecteur d'onde: comparaison des données MCQ avec une approximation RPA.	57
6. Susceptibilité de paires en fonction de la fréquence de Matsubara: Comparaison des données MCQ avec une approximation RPA. . . .	58
7. Poids de quasiparticule et facteur de structure de paires en fonction de la température.	62
8. Relation de dispersion du modèle de Hubbard à une température $T = 1/2$	64
9. Relation de dispersion su modèle de Hubbard à $T = 1/4$	65
10. Densité d'états en fonction de la fréquence.	67
11. Effet de la précision des données MCQ sur le poids spectral obtenue par MME.	68

12. Fonction de Green en temps imaginaire pour des systèmes de différentes tailles.	70
13. Poids spectral pour des systèmes de différentes tailles.	71
14. Ratio de la susceptibilité de paires uniforme à fréquence nulle et du facteur de structure de paires en fonction de la température.	73
15. Partie imaginaire de la susceptibilité de paires uniforme divisée par la fréquence en fonction de la fréquence.	75
16. Fonction de corrélation courant-courant dans la direction \hat{x} pour différents vecteurs d'onde	81
17. Spectre à une particule d'un réseau 4×4 à $T = 1/8$	82
18. Longueur de corrélation comparée à la longueur d'onde de de Broglie en fonction de la température.	90
19. Comparaison entre le facteur de structure de charge et le facteur de structure de paires en fonction de la température.	92
20. Poids spectral aux remplissages $n = 0.95$ et $n = 0.8$	94

LISTE DES ANNEXES

Annexe A: TABLE DE FORMULES	100
A.1 Définitions	100
A.2 Règles exactes	101
A.3 Calcul au premier ordre	102
A.4 Calcul au deuxième ordre	103
Annexe B: TRANSFORMATION DE LEGENDRE	105
B.1 Définition	105
B.2 Transformation de Legendre de la fonction de partition	106
Annexe C: AUTOCOHÉRENCE	108
C.1 Comparaison à un hamiltonien avec interaction non-locale	108
C.2 Équation autocohérente pour le vertex irréductible	109
C.3 Suggestion pour l'ajout de l'autocohérence	111
Annexe D: PROLONGEMENT ANALYTIQUE	114
D.1 Problèmes mathématiquement mal posés	115
D.2 Fonctionnelle d'entropie	117
D.3 Algorithme pour la maximisation d'entropie	118

INTRODUCTION

Dans les années 50, lorsque Bardeen, Cooper et Schrieffer ont développé une théorie pour expliquer la supraconductivité (théorie BCS), ils ont montré que celle-ci permettait d'expliquer l'effet Meissner observé lorsque l'on soumet un supraconducteur à un champ électromagnétique [8]. Leur dérivation fut effectuée en utilisant la jauge de Landau. Cependant, lorsque leur calcul était reproduit dans une autre jauge, on obtenait une distribution de courant différente ne respectant pas la conservation du nombre de charge [92]. En d'autres mots, leur théorie brisait l'invariance de jauge. Ce problème fut résolu simultanément par Anderson [4] et par Bogoliubov et al. [15], puis de façon plus complète par Rickayzen [91]. L'explication repose sur le fait qu'il faut inclure dans le calcul des courants la contribution provenant des modes collectifs longitudinaux afin de restaurer l'invariance de jauge. Sans cette contribution, les parties longitudinales des courants paramagnétiques et diamagnétiques ne se compensent pas lors d'un changement de jauge.

Suite à la solution de ce problème, Baym et Kadanoff [10,11] ont proposé un formalisme permettant d'assurer qu'une solution même approximative d'un modèle à N-corps puisse satisfaire les lois de conservation globales du nombre de particule (invariance de jauge), de l'énergie et de la quantité de mouvement. Ce formalisme consiste à assurer une certaine cohérence entre la description des excitations élémentaires du système et ses propriétés de transport.

Encore de nos jours, beaucoup de recherches ont pour objet le développement de nouvelles méthodes analytiques visant à prédire les propriétés de modèles relativement simples comme le modèle de Hubbard. L'intérêt pour ce domaine s'est accentué depuis la découverte de matériaux à propriétés exotiques. La forte anisotropie de la plupart de ces systèmes a motivé beaucoup d'études sur les systèmes unidimensionnels et bidimensionnels. En particulier, pour les systèmes quasi-unidimensionnels, plusieurs techniques telles la bosonisation [34], le groupe de renormalisation [16], la théorie des champs conformes [37], l'ansatz de Bethe [118] ont permis de donner une description détaillée de l'état fondamental,

des états excités et des fonctions de corrélation de différents modèles et ce pour des cas à forte comme à faible interaction. Plus récemment, la théorie du champ moyen dynamique [42] a permis de résoudre exactement des modèles à dimension infinie.

Pour l'étude du cas bidimensionnel, à faible couplage la phase ordonnée est assez bien décrite par une théorie de type BCS. De même, la limite à fort couplage (limite atomique) du modèle de Hubbard est assez bien comprise et son comportement critique correspond à la condensation de bosons¹[82]. Cependant, en l'absence de théories couvrant les deux limites beaucoup de recherches ont été menées dans le domaine [77]. En plus des tentatives pour généraliser les méthodes fructueuses à une dimension, plusieurs techniques nouvelles ont été développées: approche par les moments (approximation de type n-pôles) [98], approximation dynamique par amas [48], approche fonctionnelle [45], approche GW (Approximation auto-cohérente pour la fonction de Green, G, faisant appel au potentiel écranté, W) [5], approximation de parquet [33], approximation FLEX ("Fluctuation exchange")[43], approximation TPSC ("Two-particle self-consistent") [114,115]. On a vu aussi le développement d'approches diagrammatiques à partir de la limite fort couplage [84].

Dans cette thèse, nous développons une généralisation de l'approximation TPSC [114,115] qui permet de traiter le modèle de Hubbard attractif. Parmi les méthodes mentionnées précédemment, celle-ci semble être l'une des plus prometteuses. En effet des comparaisons avec les données Monte Carlo pour de petits systèmes ont donné des résultats très satisfaisants [78]. En particulier, l'application à des régions du diagramme de phase peu sujettes aux effets de taille a mis en évidence la présence d'un pseudogap dans le modèle de Hubbard répulsif [114,78].

¹ Dans la limite fort couplage, les électrons forment des paires locales à haute température. À la température critique, on observe une condensation des bosons dans l'état fondamental appelée condensation de Bose-Einstein.

L'approche est basée entre autres sur des règles de somme qui permettent d'assurer une cohérence entre un vertex irréductible approximatif et les fonctions de corrélation à deux particules, d'où le nom de l'approche: approximation auto-cohérente à deux particules ("Two-particle self-consistent"). Par la suite, on peut évaluer la contribution de ces fluctuations à la self-énergie. Ainsi, par l'application de cette méthode nous pourrions obtenir les propriétés à une particule, dont le poids spectral. Cette méthode sera appliquée entre autres à une étude détaillée du problème du pseudogap dans les supraconducteurs à haute température critique (SC hTc). Il y a déjà un grand nombre de méthodes qui ont été appliquées à ce problème, la plupart (matrice-T auto-cohérente, FLEX) ne prédisant pas de pseudogap pour le modèle de Hubbard.

Cette thèse est divisée de la façon suivante. Dans le premier chapitre, nous expliquons comment notre étude du modèle de Hubbard attractif en deux dimensions pourrait aider à comprendre la présence du pseudogap observé dans les SC hTc. Nous abordons l'effet des fluctuations supraconductrices sur le poids spectral des excitations fermioniques. Afin d'expliquer la présence d'un large domaine de température où un pseudogap pourrait être présent, nous mettons l'accent sur l'effet de l'augmentation de la symétrie du paramètre d'ordre. L'existence d'un tel mécanisme dans les SC hTc a été prédite par Zhang avec sa théorie SO(5) [120]. Cette théorie suppose que l'élargissement de la symétrie du paramètre d'ordre serait présent entre la région avec ordre antiferromagnétique et la région avec ordre supraconducteur là où le pseudogap est observé sur un vaste domaine de température.

Le chapitre suivant constitue le coeur de la thèse. Nous y décrivons l'approche fonctionnelle développée. Notre point de départ est un ensemble de relations exactes: l'équation du mouvement de la fonction de Green, l'équation de Dyson et l'équation de Bethe-Salpeter. Étant donné le formalisme matriciel proposé ici, nous redécrivons ces formules qui prennent des aspects quelque peu différents de la forme habituelle. Par la suite, nous suivons le formalisme de Baym et Kadanoff qui nous permet d'obtenir le vertex irréductible à partir d'une forme approximative pour la fonctionnelle de self-énergie. Le système d'équations,

ainsi établi, peut être fermé par l'imposition d'une règle de somme déduite du théorème de fluctuation-dissipation. Ainsi, notre théorie donne une solution approximative du modèle de Hubbard sans l'ajout d'aucun paramètre arbitraire. De plus, nous démontrons que notre approximation reproduit exactement le premier moment de la susceptibilité de paires et, de façon auto-cohérente, le second moment.

Finalement, dans le troisième chapitre, nous vérifions la validité de notre approximation et comparons nos résultats aux données Monte Carlo. Nous montrons que notre théorie prévoit la présence d'un pseudogap dans le poids spectral près du demi-remplissage et ce pour des températures bien supérieures à la température critique. Nous montrons que l'apparition de ce pseudogap est associée à la présence d'un régime classique renormalisé. Ces résultats sont obtenus dans un régime où les effets de la taille finie du système sont contrôlés et ce même pour les tailles accessibles par simulation Monte Carlo.

Afin d'aider à la compréhension de certains passages de la thèse, nous avons ajouté quelques annexes à la fin de celle-ci. Par exemple, dans la première annexe, le lecteur trouvera une table de formules utiles pour l'application du formalisme présenté au deuxième chapitre. Également en annexe, nous avons donné une description de la technique de prolongement analytique par maximisation d'entropie. Cette technique est la méthode la plus efficace permettant d'extraire le poids spectral de la fonction de Green en temps imaginaire mesurée par les simulations Monte Carlo.

CHAPITRE I

MOTIVATION ET MISE EN CONTEXTE

1.1 La supraconductivité à haute température

Depuis la découverte par Bednorz et Müller [12] de la présence d'une phase supraconductrice à haute température dans le mélange $\text{Ba}_x\text{La}_{5-x}\text{Cu}_5\text{O}_{5(3-y)}$, on a découvert toute une famille d'oxydes de cuivre présentant cette même phase. Ces composés sont caractérisés par une forte conductivité dans les plans cuivre-oxygène (CuO_2) et une faible conductivité entre ces plans. Cette anisotropie explique pourquoi on considère ces composés comme des systèmes quasi-bidimensionnels¹.

Pour l'étude du diagramme de phase, la variation de la densité de porteurs dans ces plans se fait par substitution d'atomes hors des plans ou par modification du nombre d'atomes d'oxygène apical [57]. Typiquement, le diagramme de phase est caractérisé par une phase antiferromagnétique (AFM) dans la région généralement considérée comme faiblement dopée ($\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ avec $x < 0.13$ $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ avec $x < 0.02$). À plus fort dopage, assez près de la disparition de la phase AFM, se trouve une phase supraconductrice (voir figure 1). La région entre ces deux phases est différente d'un composé à un autre. Certains présentent une phase de verres de spin, d'autres des rayures ("stripes") où se présente une alternance de régions avec ordre local AFM et de régions riches en porteurs de charges [117].

Une caractéristique commune aux différents composés est la présence d'un dopage où la température critique entre la phase "normale" et la phase supraconductrice est maximale. Ce dopage est appelé dopage optimale. La section

¹ La présence d'une interaction entre les plans cuivre-oxygène est toutefois importante car elle détermine la valeur de la température critique

comprenant la phase AFM jusqu'au dopage optimale est appelée le régime sous-dopée et l'autre section le régime surdopée.

Une autre caractéristique du diagramme de phase est la présence de propriétés anormales pour un vaste domaine de températures supérieures à la température critique. Ces propriétés sont dites anormales car elles ne peuvent être décrites par la théorie des liquides de Fermi développée par Landau. Une des caractéristiques ayant attiré beaucoup d'attention est la présence d'un abaissement de la densité d'états au niveau de Fermi. Sous la température T^* identifiée sur la figure 1, l'abaissement est tel qu'on observe la présence d'un minimum local à ce point. C'est ce que l'on appelle le pseudogap (PG). Ce phénomène a été observé dans un grand nombre d'expériences: mesures de chaleur spécifique [67], de conductivité optique [24], résonance magnétique nucléaire [104], diffusion Raman [95], diffusion inélastique de neutrons [27], spectroscopie résolue en temps [31], spectroscopie par effet tunnel [90], photoémission [32] (voir Timusk et Statt pour une revue des différents résultats expérimentaux [105]).

Le diagramme de phase présenté à la figure 1 est schématique et change légèrement d'un composé à un autre. La présence du pseudogap a été observé dans plusieurs de ces composés que ce soit ceux de la famille des YBaCuO, de la famille des lanthanes ou des bismuths. Le pseudogap a été observé au-dessus de la phase AFM aussi bien qu'au-dessus de la phase supraconductrice. Typiquement, la température où celui-ci apparaît diminue au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la phase AFM, pour tendre vers la température critique dans la phase surdopée.

Notre étude du modèle attractif visera à expliquer l'existence de ce régime avec pseudogap. Mais avant de présenter notre approche, nous exposons quelques théories proposées pour expliquer ce pseudogap. La plupart de ces théories sont présentées dans l'article de revue de Loktev et al. [66].

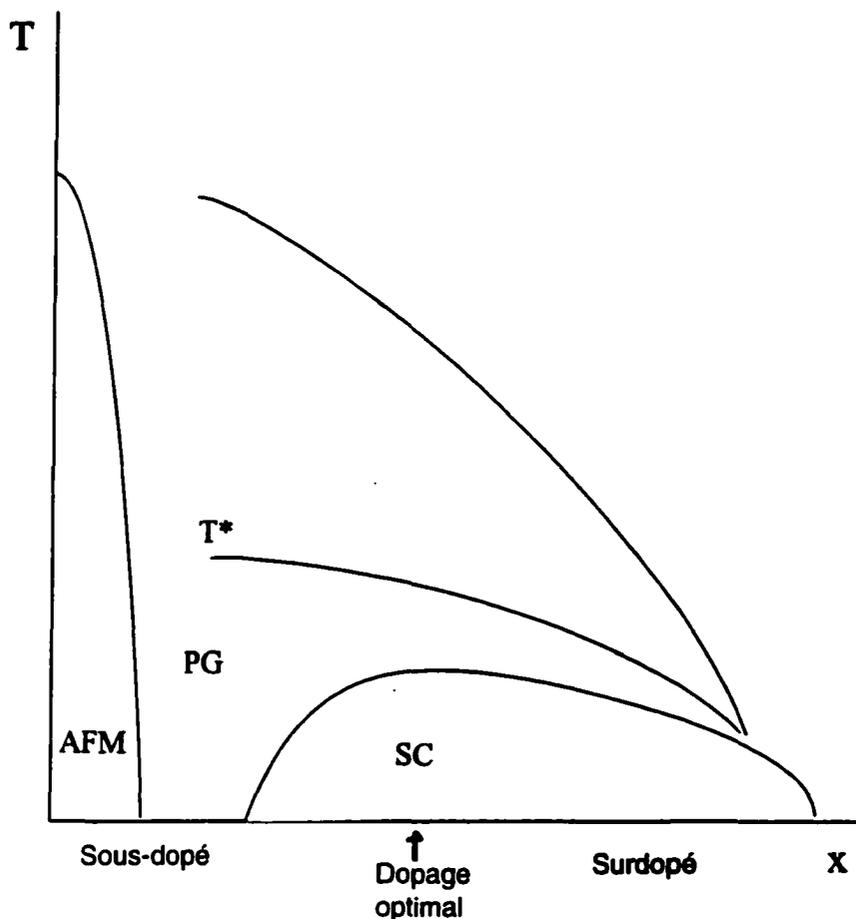


Figure 1: Diagramme de phase des oxydes de cuivre avec phase supraconductrice (SC) et phase antiferromagnétique (AFM). La température T^* indique la température à partir de laquelle on mesure la présence d'un pseudogap (PG) au niveau de Fermi. La ligne au-dessus de T^* identifie une température à partir de laquelle certains oxydes démontrent des comportements différents de ce qui est prévu par la théorie des liquides de Fermi.

1.2 Pseudogap

Pour la suite de ce travail, nous définirons le régime pseudogap par la région du diagramme de phase où on observe dans le poids spectral à une particule un minimum local au niveau de Fermi (sans toutefois qu'il n'y ait un vrai gap, c'est-à-dire au-dessus de la température critique). D'un point de vue

quantitatif le pseudogap sera donné par la mesure de la séparation en énergie des maxima locaux situés de part et d'autre du niveau de Fermi.

Partant de l'observation que le pseudogap évolue de façon continue, devenant le gap dans l'état ordonné (pour un dopage au-dessus de la phase supraconductrice), plusieurs théories sont basées sur l'existence d'un mécanisme permettant d'abaisser la température critique sans toutefois modifier la température à laquelle apparaissent les fluctuations supraconductrices. Le gap dans les excitations fermioniques ne se forme que dans la phase ordonnée, donc à basse température. L'écart important entre ces deux températures laisse donc place à un régime où des propriétés anormales peuvent se présenter. Pour mieux identifier ces propriétés, il faut comprendre quel serait le mécanisme responsable de l'abaissement de la température critique. Une deuxième question importante à laquelle on doit répondre concerne le développement du pseudogap dans ce régime. Jusqu'à maintenant, plusieurs théories ont proposé différentes réponses à ces questions.

Kivelson et Emery [35] furent parmi les pionniers de l'étude théorique du pseudogap avec leur scénario basé sur l'effet des fluctuations supraconductrices. Ils ont proposé que la faible densité de porteurs dans les supraconducteurs sous-dopés donne un rôle important aux fluctuations de phase et provoque l'apparition du pseudogap. Supposant que le comportement critique appartient à la classe du modèle XY, leur théorie a obtenu un accord quantitatif intéressant avec un certain nombre d'observations.

Tout récemment, Nozières et Pistoiesi ont proposé une théorie faisant aussi appel à une faible densité de porteurs [83]. Ils ont étudié la possibilité qu'un semiconducteur puisse avoir une transition vers un état supraconducteur. Le pseudogap résulte alors d'une compétition entre le gap de la phase supraconductrice et celui associé à la phase semiconductrice.

Par ailleurs, Randeria a, tout comme Emery et Kivelson, fait appel à l'observation d'une faible rigidité du superfluide dans l'état ordonné pour proposer

une nouvelle théorie [89]. Cependant, il a noté le fait que pour le modèle XY, la température critique champ moyen et la transition Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) sont très rapprochées et qu'un tel modèle ne peut donc pas présenter une vaste région avec un pseudogap. Dans sa théorie, le pseudogap est un vestige de la phase supraconductrice et provient de l'existence de paires à courte portée au-dessus de la température critique. Cette théorie requiert donc l'existence d'une interaction assez forte entre les particules. Comme les autres théories faisant appel à la force de l'interaction, la dimension du système ne joue pas, ici, de rôle primordial pour l'existence du pseudogap.

La grande différence entre la température critique et la température où apparaît le comportement anormal, $T_{cr} \simeq 6T_c$ [26], a aussi été utilisée par Pines pour critiquer la théorie de Emery et Kivelson [86]. Il a proposé avec ses collaborateurs, un scénario où c'est la formation de précurseurs d'ondes de densité de spin qui induit un pseudogap dans les excitations fermioniques près des singularités de Van Hove ("hot spots"). Cette théorie est une extension de la théorie des liquides de Fermi quasi-antiferromagnétiques développée par le groupe de Pines.

On ne peut passer sous silence la théorie du groupe de Levin [63]. Leur théorie consiste à faire une distinction entre le gap dans les excitations fermioniques et le paramètre d'ordre. Ils associent la différence entre ces paramètres à la présence d'excitations de paires de faible énergie. Au-dessus de la température critique, le paramètre d'ordre est nul, mais l'existence de paires préformées pourrait faire apparaître le pseudogap. Un préalable important de leur théorie est l'existence d'une résonance dans la fonction de corrélation de paires. Cependant, la création de cette résonance par un processus microscopique n'a pas été démontrée. Le groupe de Levin l'obtient par une approximation de type matrice-T où les particules couplées par l'interaction ont des niveaux de Fermi différents. Cette différence étant liée à la force du couplage, $\delta\mu \propto \Sigma$, ils obtiennent qu'au-dessus d'une valeur critique un pic de résonance apparaît dans la susceptibilité de paires. C'est cette résonance qui permet l'apparition d'un pseudogap au-dessus de la température critique. La taille de ce dernier est

proportionnelle à l'énergie de la résonance et donc à la différence des niveaux de Fermi: $\Sigma \propto \Delta_{pg}^2$. Il ne faut cependant pas trop pousser la critique de cette théorie et garder un esprit ouvert. Certains effets, tel la présence du niveau de Fermi hors de la bande d'énergie permise, pourraient amener l'apparition d'une résonance.

En comparaison, la théorie que nous proposons est basée sur la présence de fluctuations de phase supraconductrices. Cependant, nous proposons que, dans la région sous-dopée, ces fluctuations n'appartiennent pas à la classe BKT tel que proposé par Loktev et al. [66] mais à une classe à symétrie plus élevée.

La théorie SO(5) de Zhang [120] fournit un exemple de théorie où la symétrie joue un rôle important dans les SC hTc. Partant de la proximité entre la phase supraconductrice et la phase antiferromagnétique, Zhang a suggéré que dans la partie du diagramme entre ces deux phases, le paramètre d'ordre posséderait une symétrie approximative de type SO(5). Par ailleurs, il est bien connu qu'une augmentation de la symétrie du paramètre d'ordre a pour effet de faciliter la présence de fluctuations de phase² et donc d'abaisser la température critique (particulièrement pour un système bidimensionnel). Ainsi, il devient possible d'observer une vaste région de fluctuations de phase au-dessus de la température critique dans la région à symétrie élevée. Ce sont ces fluctuations de phase qui seraient responsables de l'apparition du pseudogap.

Il est à noter que même si la présence ou l'absence d'une symétrie supplémentaire devrait être détectable sans ambiguïté, l'effet que l'on veut mettre en lumière pourrait se présenter dans un cas où la symétrie n'est pas exacte.

² À basse symétrie, deux configurations du paramètre d'ordre minimisant l'énergie peuvent être topologiquement distinctes. Il faut alors surmonter un coût énergétique important pour passer de l'une à l'autre. Une telle transformation est donc improbable. L'augmentation de la symétrie du paramètre d'ordre amène de nouvelles avenues par lesquelles nous pouvons transformer les configurations. Il s'ensuit que deux configurations qui étaient topologiquement distinctes à basse symétrie peuvent devenir topologiquement équivalentes lorsque la symétrie est augmentée.

Ainsi, l'apparition de cet effet ne se ferait pas de façon brusque mais serait plutôt quelque chose de continu. Illustrons ce que l'on veut dire en considérant l'exemple du modèle XXZ avec un terme d'anisotropie, λ , faible [25]. À une certaine température ce modèle présente le même comportement critique que le modèle de Heisenberg, comme si le terme d'anisotropie n'était pas présent. Ce n'est qu'à plus basse température que le système suit un crossover vers le comportement critique du modèle XY. Plus le terme d'anisotropie est faible plus le crossover se fera près de la température critique.

Il pourrait en être de même pour les SC hTc. À température élevée des fluctuations à symétrie élevée apparaissent. Cette forte symétrie implique que la phase du paramètre d'ordre ne peut s'ordonner qu'à basse température. Il peut alors subsister un large domaine de température où, sous l'effet des fluctuations, le système présenterait des propriétés anormales. Cet effet serait accentué par la quasi-bidimensionalité du système. Ainsi, le pseudogap qui serait associé à des fluctuations à symétrie élevée, pourrait se développer jusqu'à une température où l'on observerait un crossover vers un régime critique à plus basse symétrie. Ce crossover permettrait d'expliquer l'évolution continue du pseudogap vers le gap qui est associé à un paramètre d'ordre à symétrie réduite, celui de la phase supraconductrice.

Afin de vérifier cette théorie, nous avons choisi d'étudier le modèle de Hubbard attractif à deux dimensions. Il est clair que ce modèle n'est pas un modèle réaliste pour décrire la physique des supraconducteurs à haute température critique. Cependant, la présence de régions avec différentes symétries pour le paramètre d'ordre de ce modèle nous permettra de vérifier si l'élargissement de la symétrie du paramètre d'ordre pourrait être un mécanisme responsable de l'agrandissement du domaine où un pseudogap apparaît.

Après avoir discuté du modèle de Hubbard dans la section suivante, nous reviendrons sur la question de l'existence du pseudogap dans ce modèle.

1.3 Modèle de Hubbard attractif

Le modèle de Hubbard sur réseau décrit par la relation (1.1), présente deux paramètres: le terme de saut, t , qui est l'amplitude de probabilité qu'un électron passe d'un site du réseau à un autre site et l'interaction entre des électrons se trouvant sur un même site, U . À ces paramètres s'ajoutent ceux de l'ensemble grand canonique que nous utiliserons: la température, T , et le potentiel chimique, μ , qui sont les paramètres de Lagrange associés respectivement à l'énergie moyenne et au nombre moyen de particules du système. En plus de ces paramètres, s'ajoute une liberté dans le choix du réseau. Afin de démontrer l'argumentation avancée, nous choisissons un réseau qui permet d'assurer la variation de la symétrie du paramètre d'ordre. Nous considérerons donc le cas du réseau carré bidimensionnel. Nous étudierons le cas où l'intégrale de saut est non nulle que pour les sites voisins, $t_{ij} = t(\delta_{i,j\pm\hat{x}} + \delta_{i,j\pm\hat{y}})$. Ce choix nous permettra d'utiliser la propriété bipartite du réseau. Il est à noter que les indices i et j indiquent un site du réseau, quant aux vecteurs \hat{x} et \hat{y} , ils indiquent les vecteurs de la base du réseau cristallin. De plus, la condition que $t_{ij} = t_{ji}$ est une condition essentielle pour l'hermiticité du Hamiltonien. Comme unité de mesure pour l'énergie nous utiliserons le terme de saut, t .

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \psi_{i,\sigma}^\dagger \psi_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (1.1)$$

Hamiltonien du modèle de Hubbard

Le diagramme de phase du modèle étudié dépendra donc de trois paramètres. De façon schématique, il sera donné par les figures 2 et 3. Pour mettre en évidence la ressemblance avec celui des supraconducteurs de type oxyde de cuivre, nous l'avons représenté en fonction du dopage $x = 1 - n$ qui représente l'écart entre un remplissage donné, n , et le cas du demi-remplissage, $n = 1$. Nous avons représenté sur la figure 2, la température critique, T_{BKT} , la température critique prédite par un calcul champ moyen, T^o , la température à laquelle apparaîtrait le pseudogap, T^* ainsi que la température où l'on observerait un

crossover entre le comportement critique à haute symétrie et le comportement critique $O(2)$. Alors que la température T^o peut être évalué numériquement, la température critique T_{BKT} n'est pas connue. Ici, nous avons représenté ces deux courbes de façon schématique. Le crossover quant à lui n'est pas une ligne bien définie. Sa représentation est également approximative. Étant donné que le crossover est associé au remplissage, la température où celui-ci se produit augmente en s'éloignant du cas demi-rempli ($x = 0$). Pour un remplissage plus grand que le remplissage optimal, cette température décroît car alors le comportement critique ne se manifeste qu'à basse température. Enfin, l'existence d'une température où apparaît un pseudogap n'est que spéculative et nous allons tenter de montrer son existence.

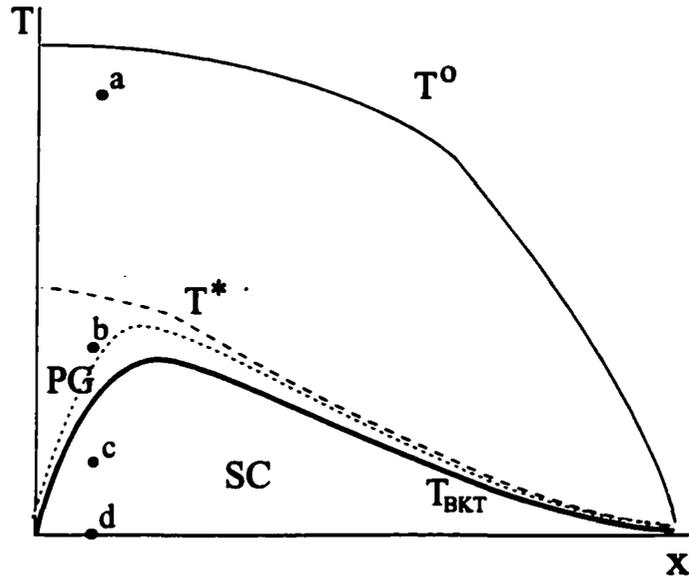


Figure 2: Diagramme de phase en température et en remplissage du modèle de Hubbard 2D ($x=1-n$). La ligne épaisse représente la température critique T_{BKT} , la ligne mince la température critique champ moyen, T^o , la ligne hachurée, la température à laquelle apparaîtrait le pseudogap et la ligne pointillée, la température où l'on observerait le crossover dans le comportement critique. Nous présentons à la figure 4 la forme schématique du poids spectral aux quatre points a , b , c et d .

Nous avons donné également le diagramme de phase en fonction de l'interaction, figure 3. On y a représenté les deux températures dont on connaît l'évolution: la température critique, T_{BKT} qui augmente de façon exponentielle à faible interaction puis passe par un maximum pour décroître en suivant une loi de puissance à forte interaction; et la température critique champ moyen, T^o , qui augmente de façon exponentielle à faible interaction puis tend vers une constante à forte interaction. Les deux courbes sont représentées de façon schématique. Physiquement, la température champ moyen correspond à la formation de paires de Cooper. Lorsque le couplage est faible celle-ci est à peu près identique à la température critique T_{BKT} . Cependant à fort couplage, cette température est bien différente de la température critique. Cette dernière correspond à la température où se fait la condensation des paires locales (condensation de Bose-Einstein). Étant donné que l'énergie de liaison des paires est proportionnelle à la force du couplage, il en sera de même pour la masse des paires. Du fait que des bosons de grande masse ne peuvent condenser qu'à basse température ceci explique pourquoi la température critique décroît ($T_{\text{BKT}} \propto 1/|U|$) à fort couplage [82]. Ainsi dans cette région on observe une grande différence entre T_{BKT} et T^o . Cette différence explique pourquoi différentes théories du pseudogap font appel à la présence d'une forte interaction. Nous avons identifié sur le graphique la valeur de couplage où se trouve la valeur maximale de la température critique telle qu'estimée par Singer et al. [102: figure 3] (Estimation par simulation Monte Carlo). Dans notre travail, nous utiliserons une valeur de $U = -4$. Celle-ci est située sur dans la région où la température critique croît en fonction du couplage. Ainsi, le système sera dans la limite couplage faible à intermédiaire.

Il est possible de montrer qu'à demi-remplissage notre modèle présente une symétrie plus élevée qu'en dehors du demi-remplissage. La particularité du cas demi-rempli vient du potentiel chimique qui est alors connu de façon exacte, $\mu = U/2$. Cette valeur particulière de μ permet d'avoir une symétrie supplémentaire. Pour le démontrer considérons la transformation canonique suivante:

$$\psi_{i\downarrow} \rightarrow (-1)^i \psi_{i\downarrow}^\dagger \quad \psi_{i\downarrow}^\dagger \rightarrow (-1)^i \psi_{i\downarrow} \quad (1.2)$$

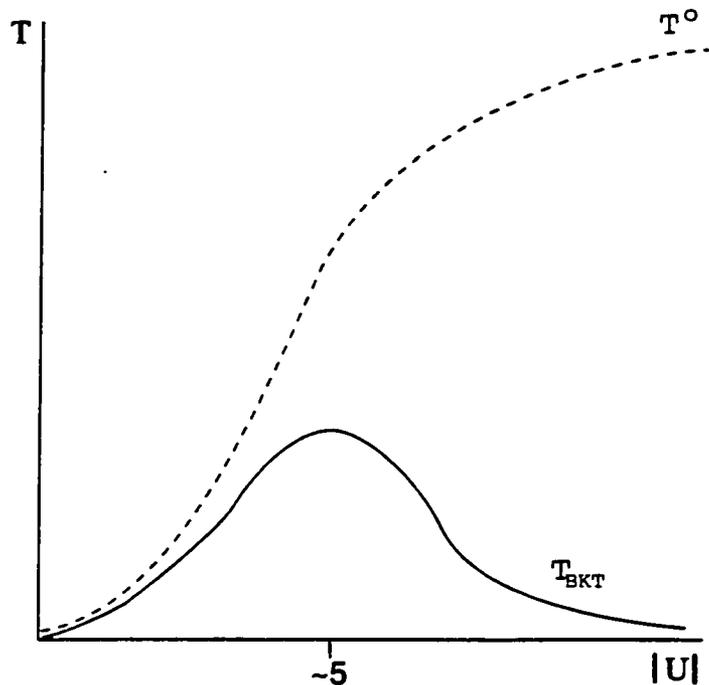


Figure 3: Diagramme de phase schématique en température et en interaction du modèle de Hubbard attractif 2D. La ligne pleine représente la température critique BKT et la ligne hachurée, la température critique champ moyen.

Considérant la transformation de chacun des termes du hamiltonien, on peut montrer comme résultat intermédiaire que:

$$\begin{aligned}\psi_{i\downarrow}^\dagger \psi_{i\pm\hat{x}\downarrow} &\rightarrow \psi_{i\pm\hat{x}\downarrow}^\dagger \psi_{i\downarrow} \\ \psi_{i\downarrow}^\dagger \psi_{i\downarrow} &\rightarrow 1 - \psi_{i\downarrow}^\dagger \psi_{i\downarrow}\end{aligned}$$

De ces résultats on obtient que le terme de saut aux premiers voisins demeure inchangé sous la transformation tandis que le terme d'interaction change de signe et fait apparaître un terme supplémentaire:

$$\mathcal{H}_0 + U \sum_{\mathbf{i}} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \hat{N} \rightarrow \mathcal{H}_0 - U \sum_{\mathbf{i}} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{U}{2} \hat{N} - (\mu - U/2) \sum_{\mathbf{i}} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \quad (1.3)$$

Ainsi, le modèle de Hubbard attractif ($U < 0$) à remplissage quelconque se transforme en modèle de Hubbard répulsif à demi-remplissage, $n = 1$, sous champ

magnétique, $h = \mu - U/2$. Étant donné que pour le cas demi-rempli le potentiel chimique est donné par $\mu = U/2$, on voit que dans ce cas le champ magnétique obtenu par la transformation est nul.

Le changement du hamiltonien sous la transformation (1.2) pour le cas demi-rempli est associé à une symétrie $SU(2)$ du modèle. À cette symétrie s'ajoute la symétrie de spin (voir [119]). Ce qui donne une symétrie $SU(2) \times SU(2)/Z_2 = SO(4)$ ³. Hors demi-remplissage, la symétrie sous rotation de spin $SU(2)$ est toujours présente, cependant, l'ajout d'un champ magnétique sous la transformation (1.2) brise la symétrie supplémentaire qui est réduite au groupe $U(1)$. Ainsi la symétrie totale est réduite à $SU(2) \times U(1)$.

La symétrie qui nous intéresse est celle associée au paramètre d'ordre et non pas toute celle présente dans le hamiltonien. Pour le cas attractif, on sait qu'à basse température il y aura apparition de fluctuations supraconductrices. Ainsi le paramètre d'ordre sera associé aux opérateurs de création et de destruction de paires. Sous la transformation (1.2), ces opérateurs se transforment de la façon suivante:

$$\begin{aligned}\Delta_i &\equiv \psi_{i\uparrow}\psi_{i\downarrow} \rightarrow (-1)^i \frac{1}{2}(S_i^x - iS_i^y) \\ \Delta_i^\dagger &\equiv \psi_{i\downarrow}^\dagger \psi_{i\uparrow}^\dagger \rightarrow (-1)^{i+1} \frac{1}{2}(S_i^x + iS_i^y) \\ \rho_i &\equiv \psi_{i\uparrow}^\dagger \psi_{i\uparrow} + \psi_{i\downarrow}^\dagger \psi_{i\downarrow} \rightarrow S_i^z + 1\end{aligned}$$

Par ailleurs, on sait que pour le modèle de Hubbard répulsif en l'absence de champ magnétique, les trois composantes de spin ont des fluctuations critiques. Donc, en juxtaposant le résultat précédent avec la transformation du hamiltonien (1.3), on observe que pour le cas attractif à demi-remplissage, des fluctuations de densité de charge s'ajoutent aux fluctuations supraconductrices. Sous ces conditions, le paramètre d'ordre présente une symétrie $SU(2)$ qui est suffisamment importante qu'il soit impossible d'avoir un point critique à température finie pour

³ La première symétrie $SU(2)$ couvre en partie l'invariance sous rotation du spin. Ainsi, pour le calcul de la symétrie totale du modèle, il faut enlever le facteur Z_2 .

ce système bidimensionnel⁴. En comparaison, pour le cas hors demi-remplissage, la transformation du hamiltonien fait apparaître un champ magnétique qui brise la symétrie de spin pour $U > 0$ et donc la symétrie du paramètre d'ordre du cas $U < 0$ est réduite à une symétrie $U(1)$. Dans ce dernier cas il existe un point critique de type (BKT) à température finie pour un système en deux dimensions. Ceci nous emmène à la conclusion que la température critique BKT qui augmente avec le remplissage de la bande doit atteindre un maximum puis redescendre vers la température nulle au fur et à mesure que l'on s'approche du demi-remplissage tel que présenté à la figure 2. L'abaissement de la température critique près du demi-remplissage alors que la température où apparaissent les fluctuations est élevée, permet d'avoir un vaste domaine de température où existerait un pseudogap.

Voici comment nous prévoyons que pourrait se développer le gap dans le poids spectral. Nous nous intéresserons à quatre points près du demi-remplissage tels qu'identifiés sur la figure 2. À la figure 4 nous avons représenté de façon schématique quelle serait, selon notre conjecture, la forme du poids spectral pour chacun de ces points. À température suffisamment élevée (mais petite par rapport à l'énergie de Fermi), point a, la théorie des liquides de Fermi peut s'appliquer et le poids spectral au niveau de Fermi a la forme d'une lorentzienne dont la largeur diminue avec la température. En abaissant la température sous T^* , les fluctuations supraconductrices deviennent importantes, mais la symétrie élevée du paramètre et la bidimensionalité du système empêchent l'avènement d'une transition de phase. C'est alors, qu'apparaîtrait un pseudogap dans le poids spectral, point b. Il est possible qu'avant que ne se développe le pseudogap, le pic présent à haute température s'élargisse avec l'abaissement de la température contrairement aux caractéristiques des liquides de Fermi. Un tel phénomène peut amener la présence d'un pseudogap à faible fréquence dans la densité total d'états sans qu'il n'y en ait dans le poids spectral. Il peut aussi y avoir des singularités associées à la forme emboîtée de la surface de Fermi [61].

⁴ Avec une symétrie $SU(2)$, il n'y a plus de configurations topologiquement distinctes en deux dimensions (plus de vortex).

Une fois que l'on passe sous la température critique BKT, le poids spectral s'annule au niveau de Fermi, point c. On sait qu'à partir de ce point et jusqu'à température nulle le paramètre d'ordre prend généralement une valeur non-nulle mais avec une phase différente d'une région de l'espace à une autre. Il peut aussi exister des régions où il demeure nul (coeur des paires vortex-antivortex). Globalement, il ne prendra une valeur non nulle qu'à température nulle. Qu'en est-il pour le gap (c'est-à-dire, le domaine de fréquences où le poids spectral s'annule)? Il pourrait prendre une valeur finie pour toutes températures sous T_{BKT} , mais ce n'est pas sûr. Ce que l'on peut affirmer, c'est qu'à température nulle, point d, le gap est fini.

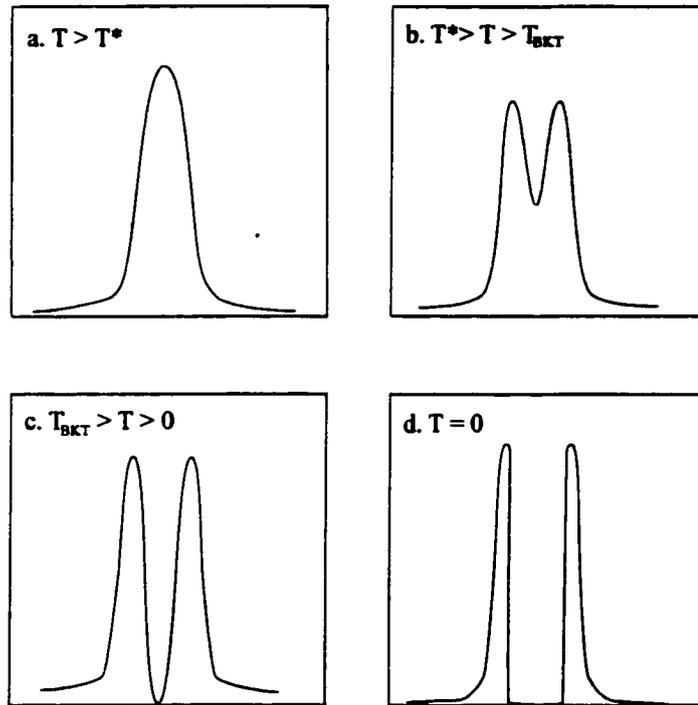


Figure 4: Poids spectral pour quatre points du diagramme de phase du modèle de Hubbard attractif à deux dimensions. T^* représente la température à laquelle apparaîtrait le pseudogap et T_{BKT} , la température du point critique BKT.

Dans la section suivante, nous verrons que les deux premiers spectres présentés à la figure 4 ont été obtenus par certaines études du modèle de Hubbard à demi-remplissage.

1.4 Quelques études antérieures du modèle de Hubbard

En terminant ce chapitre, nous présentons les résultats obtenus par différentes méthodes qui ont été appliquées au problème du pseudogap dans le modèle de Hubbard attractif.

Étant donné la difficulté à construire une approximation analytique satisfaisante pour décrire le modèle de Hubbard, certaines études ont utilisé des techniques Monte Carlo afin d'étudier l'importance relative des différents diagrammes obtenus d'un développement perturbatif [18,21]. Ces études étant appliquées au modèle répulsif, on peut à demi-remplissage les extrapoler au modèle attractif. Parmi les résultats obtenus, Chen et al. [21] ont montré qu'une approximation de type RPA avec un vertex renormalisé permet de bien expliquer le facteur de structure magnétique observé par simulations Monte Carlo pour une interaction intermédiaire $U \simeq 4$. On verra au chapitre 3 que cet accord est également assez bon pour la susceptibilité de paires du modèle attractif. L'approximation TPSC a l'avantage de bien prédire la valeur de ce vertex pour le modèle répulsif.

L'accord entre la susceptibilité magnétique d'une approximation RPA et les résultats Monte Carlo a aussi été observé par Bulut et al. [18]. Ils ont aussi montré que ce genre d'approximation permet de bien déterminer la self-énergie en fréquences imaginaires mettant ainsi en importance les corrections de vertex. Ils ont comparé la valeur effective de l'interaction particule-particule avec un calcul du second ordre où la correction de ce vertex provient de l'échange de fluctuations de spin. Leur résultat montre que l'accord n'est pas très bon et n'est pas amélioré de façon significative par l'ajout du troisième ordre.

Malgré ces résultats peu encourageants, plusieurs auteurs ont utilisé l'approximation FLEX pour l'étude du modèle de Hubbard. Il faut mentionner que cette approximation va au-delà de l'unique contribution de l'échange de fluctuations de spin, elle tient compte également des fluctuations de charge et des fluctuations de paires de Cooper. Récemment, Deisz, Hess et Serene [30] ont appliqué cette approximation au problème du pseudogap dans le modèle de Hubbard attractif. Ils ont observé que cette approximation prédit des propriétés anormales dans la phase normale, tel la suppression du poids spectral à faibles énergies avec l'abaissement de la température. Cependant, aucune évidence pour l'apparition d'un pseudogap n'a été observée et ce même pour des systèmes de taille 128×128 .

La technique Monte Carlo permet d'aller plus loin qu'une simple comparaison avec les approches analytiques en fréquences imaginaires. Utilisant des méthodes pour faire un prolongement analytique des données Monte Carlo, on peut ainsi vérifier si ces données prédisent ou non la présence d'un pseudogap dans le poids spectral des excitations fermioniques. Un résultat reproduit par toutes les simulations Monte Carlo est la présence d'un pseudogap pour les systèmes de petites tailles. Le comportement en taille observé par Vekić et White [116] tend à montrer que ce pseudogap disparaît lorsque le système est de taille suffisamment grande. Plus récemment, nous avons publié une étude du pseudogap dans le modèle de Hubbard répulsif à demi-remplissage [78]. La symétrie entre ces modèles montre que ce résultat serait retrouvé pour le modèle attractif. Nous avons observé la présence d'un pseudogap pour des systèmes de différentes tailles et notre étude en taille a montré que celui-ci n'est dû à des effets de taille finie. Nous avons montré que l'approche TPSC développée par Vilk et Tremblay [114,115] montre un accord parfait avec les résultats Monte Carlo pour les systèmes de petites tailles. Cette observation suggère d'utiliser cette méthode afin de déterminer s'il existe ou non un pseudogap dans la limite thermodynamique. Notre conclusion est qu'il en existe un. Dans cet article, nous expliquons pourquoi le résultat de Vekić et White diffère du notre. En effet, nous avons montré que plus le bruit est important dans les données Monte Carlo, moins on observe de détails dans le poids spectral obtenu par l'application de la technique de

maximisation d'entropie aux données Monte Carlo (cette technique est expliquée en annexe D). Ainsi, l'observation que les résultats de Vekić et White sont plus précis pour les systèmes de petites tailles que pour les systèmes de grande taille renforce notre argumentation selon lequel il y aurait bien un régime pseudogap dans la limite thermodynamique.

D'autres approches analytiques prévoient également l'existence d'un pseudogap. Parmi celles-ci, il y a une approche par transformation de Hubbard-Stratonovich [19,20] où l'on observe l'apparition d'un pseudogap à une température légèrement supérieure à la température critique. Il y a aussi l'approximation de type matrice-T [54,62]. On remarque pour cette dernière approximation que lorsque le calcul est entièrement auto-cohérent le pseudogap n'est plus observé. Tout récemment, on a vu le développement de l'approximation d'amas dynamique (DCA). Celle-ci a également été appliquée au problème du pseudogap [48]. Il semble qu'en améliorant la précision de cette approximation, la présence d'un pseudogap dans le spectre devient de plus en plus marquée. Ainsi, cette méthode renforce notre résultat.

CHAPITRE II

FORMALISME

Dans ce chapitre, nous explicitons les différentes étapes menant à l'approximation auto-cohérente à deux particules. Pour notre dérivation nous adoptons un formalisme développé dans les années 50 et 60. Nous référons le lecteur aux articles de Martin et Schwinger [74], de Kadanoff et Martin [53], de Baym et Kadanoff [10,11] et de Luttinger [68,69,70,58]. Pour des ouvrages pédagogiques nous suggérons le livre de Mahan [71] ainsi que les notes de cours de Tremblay [108].

Pour résumer les principales particularités de notre formalisme, mentionnons que nous utilisons l'approche en temps imaginaire avec intégration sur le contour de Matsubara. De plus, nous employons la notation compacte [74] où les chiffres arabes sont utilisés pour représenter un point dans l'espace à trois dimensions formé par le réseau cristallin et le temps imaginaire. Étant donné que l'on s'intéresse au modèle de Hubbard attractif, nous faisons usage de la notation matricielle de Nambu.

Le chapitre est séparé en quatre sections. Dans la première section nous obtenons des résultats exacts et définissons les différentes quantités utilisées par la suite. Nous considérons la fonction de Green qui permet de décrire l'état thermodynamique d'un système. En outre, en présence d'un champ externe, cette fonction permet de déduire les propriétés de transport du système. On peut alors affirmer qu'elle contient toute l'information nécessaire pour décrire le système. La première relation exacte que nous étudierons est l'équation du mouvement de la fonction de Green. Pour le modèle de Hubbard, cette équation nous emmène à considérer le hamiltonien en deux parties. La première partie est diagonalisable de façon analytique et assez facilement. La deuxième introduit la self-énergie qui est liée à la fonction de Green par la relation de Dyson. En fait, cette dernière équation peut être considérée comme une définition de la self-énergie et est donc applicable à tout hamiltonien.

L'équation du mouvement permet de faire un lien entre les propriétés dites à une particule (fonction de Green, self-énergie) et la fonction de corrélation à deux particules. C'est pourquoi nous présentons dans la deuxième section une relation exacte permettant d'évaluer cette fonction de corrélation en l'absence de champ externe et dans la phase désordonnée. Cette relation est l'équation de Bethe-Salpeter. Celle-ci fait appel à un nouvel objet qui est le vertex irréductible. Il sera donc essentiel d'approximer ce vertex pour évaluer la fonction de corrélation. Le lecteur pourra noter que pour la dérivation de cette formule nous ne faisons appel qu'à la relation de Dyson et pas à l'équation du mouvement. Ainsi l'équation de Bethe-Salpeter pourrait s'appliquer à d'autres hamiltoniens.

La troisième section contient le développement de l'approximation. Pour ce faire nous suivons un formalisme qui s'apparente à celui de Baym et Kadanoff [10,11] en ce sens que nous développons une approximation pour la self-énergie en présence du champ externe. De cette même approximation nous estimons la fonction de Green et le vertex irréductible. Étant donné que l'on s'intéresse aux propriétés du modèle en l'absence de champ externe, notre approximation n'est développée qu'au premier ordre afin de déterminer le vertex. Notre approximation pour la self-énergie fait appel à une quantité inconnue: la valeur moyenne de double occupation (deux électrons sur un même site du réseau). Suivant la proposition de Vilk et Tremblay [114,115], nous déterminons cette valeur de façon auto-cohérente en imposant une règle de somme. Par la suite, utilisant la relation de Bethe-Salpeter et l'équation du mouvement, nous pouvons raffiner l'estimation de la self-énergie.

Enfin, à la dernière section, nous montrons que notre approximation permet de satisfaire une nouvelle règle de somme, qui est l'analogue de la règle de somme f , et le théorème de Mermin-Wagner, selon lequel il est impossible d'avoir une brisure spontanée de symétrie continue à température finie en deux dimensions. Le fait que notre approximation respecte les moments de la susceptibilité de paires nous permet de faire un parallèle entre l'approche des moments et la règle de somme choisie pour déterminer la valeur moyenne de double occupation.

2.1 Relations exactes

2.1.1 Définitions

Nous cherchons une approximation pour décrire le modèle de Hubbard attractif. Nous savons qu'à basse température ce modèle présente des fluctuations supraconductrices importantes. Il est alors approprié d'adopter la notation de Nambu où on définit des opérateurs vectoriels:

$$\Psi(1) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(1) \\ \psi_{\downarrow}(1) \end{pmatrix} \quad \Psi^{\dagger}(1) = (\psi_{\uparrow}^{\dagger}(1), \psi_{\downarrow}(1)) \quad (2.1)$$

Les flèches \uparrow et \downarrow servent à indiquer les deux orientations possibles du spin électronique. La dépendance temporelle de ces opérateurs est définie de façon conventionnelle par l'opérateur d'évolution en temps imaginaire:

$$\begin{aligned} \Psi(1) &\equiv \Psi(\mathbf{r}_1, \tau_1) \equiv e^{\tau_1(\mathcal{H} - \mu\hat{N})} \Psi(\mathbf{r}_1) e^{-\tau_1(\mathcal{H} - \mu\hat{N})} \\ \Psi^{\dagger}(1) &\equiv \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1, \tau_1) \equiv e^{\tau_1(\mathcal{H} - \mu\hat{N})} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1) e^{-\tau_1(\mathcal{H} - \mu\hat{N})} \end{aligned} \quad (2.2)$$

où \hat{N} est l'opérateur du nombre de particules, μ , le potentiel chimique et les variables de temps imaginaire sont définies dans l'intervalle $(0, \beta)$, β étant l'inverse de la température. Suivant les définitions (2.2), l'opérateur de création $\Psi^{\dagger}(\tau)$ ne sera pas le conjugué hermitique de l'opérateur d'annihilation $\Psi(\tau)$. Pris au temps $\tau = 0$, il le sera et ces deux opérateurs obéiront à la règle d'anticommuation:

$$\{\Psi_i(\mathbf{r}_1), \Psi_j^{\dagger}(\mathbf{r}_2)\} = \delta_{i,j} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

Dans la notation de Nambu la fonction de Green prend une forme matricielle.

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(1, 2; \phi) &= -\langle \Psi(1) \Psi^{\dagger}(2) \rangle_{\phi} \\ &= - \begin{pmatrix} \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(2) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\downarrow}(2) \rangle_{\phi} \\ \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(2) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\downarrow}(2) \rangle_{\phi} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.3)$$

On reconnaît le long de la diagonale la fonction usuelle pour les deux composantes de spin. Hors diagonale, on retrouve les fonctions de Green

anormales présentées par Abrikosov et al. [1]. La moyenne thermodynamique a été définie en présence d'un champ source externe:

$$\langle \circ \rangle_\phi = Z^{-1}[\phi] \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu \hat{N})} T_\tau \exp(-\Psi^\dagger(\bar{1})\phi(\bar{1}, \bar{2})\Psi(\bar{2})) \circ \right\} \quad (2.4)$$

où

$$Z[\phi] = \text{Tr} \left(e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu \hat{N})} T_\tau \exp(-\Psi^\dagger(\bar{1})\phi(\bar{1}, \bar{2})\Psi(\bar{2})) \right) \quad (2.5)$$

Pour indiquer que l'on intègre sur un point, on place une ligne au-dessus du chiffre associé à ce point (ex.: $\bar{1}$). L'opérateur d'ordonnance temporelle T_τ est utilisé pour indiquer que les opérateurs doivent être ordonnés selon leur indice de temps imaginaire. Il faut d'abord faire le produit direct puis ordonner, dans chaque élément de matrice, les opérateurs en suivant le contour de Matsubara, c'est-à-dire en les plaçant de la droite vers la gauche en ordre croissant de temps imaginaire.

Le champ externe est choisi afin de pouvoir évaluer les corrélations supraconductrices, c'est-à-dire:

$$\phi(1, 2) = \begin{pmatrix} 0 & \phi_{12}(1, 2) \\ \phi_{21}(1, 2) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Les indices inférieurs 12 et 21 servent pour la notation des deux éléments (1, 2) et (2, 1) de la matrice ϕ . Ainsi, nous avons introduit deux champs distincts qui seront couplés aux deux termes hors diagonaux de la fonction de Green. On peut vérifier que la dérivée de la fonction de partition, (2.5), permet de générer ces termes hors diagonaux.

$$\frac{\delta \ln Z[\phi]}{\delta \phi(2, 1)} = - \begin{pmatrix} 0 & G_{12}(1, 2; \phi) \\ G_{21}(1, 2; \phi) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

où on a défini:

$$\frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\delta \phi_{21}(2, 1)} \\ \frac{\delta}{\delta \phi_{12}(2, 1)} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Les indices 21 et 12 servent à indiquer clairement par rapport à quelle composante du champ ϕ la différentiation est faite. Cette définition de la matrice de dérivation nous permet d'écrire:

$$\frac{\delta}{\delta \phi(4, 3)} \phi(1, 2) = \delta(1-4)\delta(3-2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

où pour appliquer la différentiation nous devons faire le produit matriciel et dériver chaque composante à tour de rôle.

Avant de terminer cette section, il faut remarquer qu'il reste un point à déterminer pour compléter la définition de la fonction de Green. Le lecteur aura noté, par la présence du terme $\mu\hat{N}$, que nous utilisons l'ensemble grand canonique où le potentiel chimique est déterminé afin d'obtenir le remplissage désiré. Cependant, que devient cette condition en présence d'un champ externe? Nous choisissons de traiter le potentiel chimique de la même façon que la température (les deux étant des paramètres de Lagrange permettant d'ajuster le nombre moyen de particules et l'énergie moyenne respectivement). Ainsi, il n'est pas modifié par la présence du champ externe et il est ajusté pour que le nombre d'occupation moyen en l'absence de ce champ ait la valeur désirée.

2.1.2 Équation du mouvement

Afin d'évaluer la fonction de Green d'un modèle donné, il est courant de considérer l'équation du mouvement de cette fonction. On procède donc en différentiant $\mathbf{G}(\phi)$ par rapport au temps. Trois termes sont générés par cette dérivation. Les deux premiers proviennent de l'ordonnance temporelle: il y a l'ordonnance d'un vecteur de Nambu par rapport à l'autre (voir équation (2.3)) et il y a l'ordonnance temporelle par rapport au champ externe. Le troisième terme vient de la dépendance temporelle de l'opérateur (2.2). On peut écrire la dérivation ainsi:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{G}(1, 2; \phi)}{\partial \tau_1} = & - \langle \{ \Psi(\mathbf{r}_1, \tau_1), \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2, \tau_1) \} \rangle_\phi \delta(\tau_1 - \tau_2) \\ & + \langle [\Psi^\dagger(\bar{3}) \phi(\bar{3}, \bar{4}) \Psi(\bar{4}), \Psi(1)] \Psi^\dagger(2) \rangle_\phi \delta(\tau_1 - \tau_{\bar{3}}) \\ & - \left\langle \frac{\partial \Psi(1)}{\partial \tau_1} \Psi^\dagger(2) \right\rangle_\phi \end{aligned} \quad (2.9)$$

La notation utilisée dans l'équation (2.9) est un peu ambiguë. Il faut bien comprendre ce que l'on veut représenter par l'anticommutation entre bra et ket. Il faut dans un premier temps faire le produit direct des deux éléments dans l'ordre où ils apparaissent dans l'anticommutateur, puis appliquer l'anticommutation

élément par élément. Cette ambiguïté n'apparaît que dans le premier terme du côté droit de l'équation (2.9).

Le troisième terme peut être évalué en utilisant l'équation de Heisenberg:

$$\frac{\partial \Psi(1)}{\partial \tau_1} = [\mathcal{H} - \mu \hat{N}, \Psi(1)]$$

En appliquant (2.9) au modèle de Hubbard (1.1), on obtient:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \mathbf{G}(1, 2; \phi)}{\partial \tau_1} = & \delta(1 - 2) \\ & + \left[\delta(\tau_1 - \tau_{\bar{3}}) \begin{pmatrix} -t(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_{\bar{3}}) - \mu & 0 \\ 0 & t(\mathbf{r}_{\bar{3}}, \mathbf{r}_1) + \mu \end{pmatrix} + \phi(1, \bar{3}) \right] \mathbf{G}(\bar{3}, 2) \\ & + U \begin{pmatrix} \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\downarrow}(1) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1^+) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(2) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\downarrow}(1) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1^+) \psi_{\downarrow}(2) \rangle_{\phi} \\ \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}(1^-) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(2) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}(1^-) \psi_{\downarrow}(2) \rangle_{\phi} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Étant donné que différents opérateurs apparaissent dans une moyenne sont évalués à une même valeur de temps imaginaire, il devient nécessaire d'indiquer explicitement l'ordre selon lequel il faut ordonner ces opérateurs. Pour ce faire nous plaçons un indice supérieur $+$ ou $-$ qui indique que l'opérateur doit être placé plus à gauche ou plus à droite lors de l'arrangement en ordre.

Le dernier terme de la relation (2.10) provient du terme d'interaction dans le modèle de Hubbard. En l'absence de ce terme, il serait facile de déterminer la fonction de Green. C'est pourquoi nous allons traiter séparément ce dernier terme en introduisant la self-énergie:

$$\Sigma(1, 2; \phi) = U \begin{pmatrix} \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\downarrow}(1) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1^+) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\bar{3}) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\downarrow}(1) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1^+) \psi_{\downarrow}(\bar{3}) \rangle_{\phi} \\ \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}(1^-) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\bar{3}) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\uparrow}(1^-) \psi_{\downarrow}(\bar{3}) \rangle_{\phi} \end{pmatrix} \mathbf{G}^{-1}(\bar{3}, 2; \phi) \quad (2.11)$$

On voit par cette relation que le calcul de la self-énergie fera appel aux fonctions de corrélation. Cette définition, avec (2.10), nous donne la relation de Dyson:

$$\boxed{(\mathbf{G}_0^{-1}(1, \bar{3}) - \phi(1, \bar{3}) - \Sigma(1, \bar{3}; \phi)) \mathbf{G}(\bar{3}, 2; \phi) = \delta(1 - 2)} \quad (2.12)$$

où on a défini \mathbf{G}_0^{-1} par les autres termes présents dans l'équation du mouvement:

$$\mathbf{G}_0^{-1}(1, 2) = -\delta(1-2) \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \delta(\tau_1 - \tau_2) \begin{pmatrix} -t(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \mu & 0 \\ 0 & t(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \mu \end{pmatrix}$$

Ce résultat justifie notre choix selon lequel le potentiel chimique est fixé par le remplissage en l'absence du champ externe. Ainsi, G_0 est indépendant de ce champ externe.

Jusqu'à maintenant, nous nous sommes employé à regarder ce que l'on obtenait en étudiant la différentiation de \mathbf{G} par rapport à un de ses arguments. Si l'on avait considéré la différentiation par rapport à l'autre argument, la relation de Dyson aurait pris la forme suivante:

$$\mathbf{G}(1, \bar{3}; \phi) (\mathbf{G}_0^{-1}(\bar{3}, 2) - \phi(\bar{3}, 2) - \Sigma(\bar{3}, 2; \phi)) = \delta(1-2) \quad (2.13)$$

Étant donné que la relation de Dyson nous servira à estimer la fonction de Green à partir d'une approximation de la self-énergie, on peut se demander si le résultat serait le même si au lieu de considérer la relation (2.12), nous utilisions (2.13). La réponse à cette question nous vient simplement de l'algèbre linéaire: tant que la fonction de Green ne sera pas singulière son inverse sera unique.

2.2 Équation de Bethe-Salpeter

2.2.1 Définition

On a vu de l'équation du mouvement que l'évaluation de la self-énergie passe par le calcul d'une fonction de corrélation à quatre points. Or, il est possible de montrer que cette fonction de corrélation est en fait la réponse de la fonction de Green au champ externe. Ainsi, on définit

$$\begin{aligned} \chi(1, 2, 3, 4; \phi) &\equiv -\frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \mathbf{G}(3, 4; \phi) \\ &= \begin{pmatrix} \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\downarrow}(2) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(3) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(4) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\uparrow}(1) \psi_{\downarrow}(2) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(3) \psi_{\downarrow}(4) \rangle_{\phi} \\ \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(2) \psi_{\uparrow}(3) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(4) \rangle_{\phi} & \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(1) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(2) \psi_{\uparrow}(3) \psi_{\downarrow}(4) \rangle_{\phi} \end{pmatrix} \\ &\quad - \mathbf{G}_{\text{HD}}(1, 2; \phi) \mathbf{G}(3, 4; \phi) \end{aligned} \quad (2.14)$$

où l'indice HD indique que seule la partie hors diagonale de la matrice est conservée, les éléments de la partie diagonale étant remplacés par zéro. Nous utiliserons aussi l'indice D qui ne conserve que la partie diagonale de la matrice. Le dernier terme de l'équation (2.14) vient de la présence de $Z^{-1}[\phi]$ dans la définition de la moyenne thermodynamique (2.4). La matrice de dérivation utilisée est la même que celle introduite précédemment (2.8). La façon de l'appliquer consiste à faire la multiplication matricielle dans un premier temps puis d'appliquer la dérivation appropriée à chaque élément. Nous illustrons par l'exemple de la dérivation d'une matrice $A(\phi)$ quelconque:

$$\frac{\delta}{\delta\phi(1,2)} A(\phi) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\delta A_{21}(\phi)}{\delta\phi_{21}(1,2)} & \frac{\delta A_{22}(\phi)}{\delta\phi_{21}(1,2)} \\ \frac{\delta A_{11}(\phi)}{\delta\phi_{12}(1,2)} & \frac{\delta A_{12}(\phi)}{\delta\phi_{12}(1,2)} \end{pmatrix}$$

La comparaison avec (2.11), nous montre que la self-énergie sera alors donnée par:

$$\Sigma(1, 2; \phi) = U\chi(1, 1, 1^\pm, \bar{3}; \phi)\mathbf{G}^{-1}(\bar{3}, 2; \phi) + U\delta(1^\pm - 2)\mathbf{G}_{\text{HD}}(1, 1; \phi) \quad (2.15)$$

Nous avons utilisé comme indice supérieur $^\pm$ pour indiquer que dans la ligne supérieure de χ le premier opérateur sera considéré à un temps infinitésimalement supérieur à τ_1 tandis que dans la deuxième ligne de la matrice, il sera considéré comme étant à un temps inférieur.

La définition de la fonction de corrélation (2.14), comme étant la réponse de la fonction de Green au champ externe, nous indique comment nous pourrions l'estimer. De la définition:

$$\mathbf{G}(1, \bar{3}; \phi)\mathbf{G}^{-1}(\bar{3}, 2; \phi) = \delta(1 - 2) \quad (2.16)$$

nous voyons que la dépendance de \mathbf{G} sur ϕ devrait compenser exactement celle de \mathbf{G}^{-1} . Au premier ordre en ϕ , la fonction de Green est donnée par:

$$\mathbf{G}(1, 2; \phi) = \mathbf{G}(1, 2) - \phi(\bar{4}, \bar{3})\chi(\bar{3}, \bar{4}, 1, 2) + O(\phi^2) \quad (2.17)$$

Il est à noter que le terme correspondant à la transposée de ϕ n'apparaît pas dans cette expression car nous sommes intéressés par la phase normale où

$$\left(\frac{\delta}{\delta\phi(4,3)} \right)^T \mathbf{G}(1,2) \Big|_{\phi=0} = 0$$

Ainsi, la relation de Bethe-Salpeter que nous dérivons ne sera valide que dans l'état désordonné où les termes hors diagonaux des matrices \mathbf{G} et χ sont nuls.

Pour \mathbf{G}^{-1} , on peut utiliser l'équation de Dyson (2.12), pour montrer qu'au premier ordre on a:

$$\mathbf{G}^{-1}(1,2;\phi) = \mathbf{G}^{-1}(1,2) - \phi(1,2) - \phi(\bar{4},\bar{3}) \left[\frac{\delta}{\delta\phi(\bar{4},\bar{3})} \Sigma(1,2;\phi) \right]_{\phi=0} + O(\phi^2) \quad (2.18)$$

Encore une fois, il devrait apparaître un terme supplémentaire. Cependant, on peut montrer que ce terme s'annule au premier ordre en ϕ :

$$\left(\frac{\delta}{\delta\phi(4,3)} \right)^T \Sigma(1,2) \Big|_{\phi=0} = 0$$

où T indique la transposée de la matrice.

Introduisant (2.17) et (2.18) dans (2.16), on trouve une relation pour χ en annulant le coefficient du terme proportionnel à ϕ :

$$\begin{aligned} \chi(1,2,3,4) = & \sigma_x \mathbf{G}(3,2) \sigma_x \mathbf{G}(1,4) \\ & - \sigma_x \mathbf{G}(3,\bar{5}) \sigma_x \left[\frac{\partial}{\partial\phi(2,1)} \Sigma(\bar{5},\bar{6}) \right]_{\phi=0} \mathbf{G}(\bar{6},4) \end{aligned} \quad (2.19)$$

où σ_x est la matrice de Pauli correspondant à la composante x du spin. Cette matrice provient de la commutation de la matrice diagonale \mathbf{G} et de la matrice hors diagonale ϕ :

$$\mathbf{G}(1,2)\phi(4,3) = \phi(4,3)\sigma_x \mathbf{G}(1,2)\sigma_x$$

La matrice \mathbf{G} est diagonale par le fait qu'on l'évalue en champ externe nul et à température finie (pas d'ordre à longue portée).

2.2.2 Transformation de Legendre

On voit de la relation (2.19) que la détermination de la fonction de corrélation passe par l'estimation de la variation de la self-énergie par rapport au champ externe. C'est ce terme qui permet d'introduire le vertex irréductible. Mais pour y arriver, nous allons considérer une transformation de Legendre. L'utilité de cette transformation s'explique par le fait que la dépendance de la self-énergie sur ϕ se fait au travers de la fonction de Green $\Sigma(\phi) = \Sigma(\mathcal{G})|_{\mathcal{G}=\mathbf{G}_{\text{HD}}(\phi)}$. Ainsi, de façon générale, on peut définir la transformation de Legendre de la fonction de partition:

$$W[\mathcal{G}] = \left(-\ln Z[\phi] - \text{Tr}(\mathbf{G}_{\text{HD}}(\bar{1}, \bar{2}; \phi)\phi(\bar{2}, \bar{1})) \right)_{\mathbf{G}_{\text{HD}}(\phi)=\mathcal{G}} \quad (2.20)$$

avec la condition

$$\left. \frac{\delta \ln Z[\phi]}{\delta \phi(\bar{2}, \bar{1})} \right|_{\mathbf{G}_{\text{HD}}(\phi)=\mathcal{G}} = -\Phi(1, 2) \quad (2.21)$$

L'indice après la dernière parenthèse du côté droit de l'égalité signifie que la fonction à l'intérieur des parenthèses est évaluée à une valeur de ϕ telle que les composantes hors diagonales de $\mathbf{G}(\phi)$ soient égales au nouveau champ introduit \mathcal{G} . Cette condition ne s'applique que sur les composantes hors diagonales car comme le champ ϕ ne possédait que deux composantes non nulles, il doit en être de même du champ \mathcal{G} , celui-ci étant introduit par une transformation de Legendre (Les détails de cette transformation sont donnés en annexe B). Pour montrer que toute la dépendance de Σ sur ϕ peut s'exprimer à travers \mathcal{G} (voir annexe B), il suffit d'examiner la dérivation de W par rapport à \mathcal{G} :

$$\begin{aligned} \frac{\delta W[\mathcal{G}]}{\delta \mathcal{G}(\bar{2}, \bar{1})} &= -\Phi(1, 2; \mathcal{G}) - \left(\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{2}, \bar{1})} \Phi(\bar{3}, \bar{4}; \mathcal{G}) \right) \left(\frac{\delta}{\delta \phi(\bar{3}, \bar{4})} \ln Z[\phi] + \mathcal{G}(\bar{4}, \bar{3}) \right)_{\phi=\Phi(\mathcal{G})} \\ &= -\Phi(1, 2; \mathcal{G}) \end{aligned} \quad (2.22)$$

où la matrice de dérivation a été définie par:

$$\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{2}, \bar{1})} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}_{21}(\bar{2}, \bar{1})} \\ \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}_{12}(\bar{2}, \bar{1})} & 0 \end{pmatrix}$$

et $\Phi(\mathcal{G})$ est la valeur du champ ϕ obtenue en posant la condition (2.21). Cette dernière présuppose que pour une valeur de ϕ donnée une seule valeur possible

de $\mathbf{G}_{\text{HD}}(\phi)$ soit donnée par la dérivation de la fonction de partition (2.7) et que pour une valeur de $\mathbf{G}_{\text{HD}}(\phi) = \mathcal{G}$ donnée une seule et unique valeur de ϕ permette d'obtenir cette fonction de Green.

Utilisant la transformation de Legendre introduite, on est à même d'évaluer la variation de la self-énergie. Nous appliquons la règle de dérivation en chaîne qui est démontrée en annexe A

$$\left[\frac{\delta}{\delta \phi(4, 3)} \Sigma(1, 2; \phi) \right]_{\phi=0} = \left[\frac{\delta}{\delta \phi(4, 3)} \mathbf{G}_{\text{HD}}(\bar{5}, \bar{6}; \phi) \right]_{\phi=0} \left[\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{5}, \bar{6})} \Sigma(1, 2; \mathcal{G}) \right]_{\mathcal{G}=0}$$

Il semble alors opportun d'introduire le vertex irréductible qui est défini par:

$$\Gamma(1, 2, 3, 4; \mathcal{G}) = \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(2, 1)} \Sigma(3, 4; \mathcal{G}) \quad (2.23)$$

Ceci nous emmène à la relation de Bethe-Salpeter:

$$\begin{aligned} \chi(1, 2, 3, 4) = & -\sigma_x \mathbf{G}(3, 2) \sigma_x \mathbf{G}(1, 4) \\ & + \sigma_x \mathbf{G}(3, \bar{5}) \sigma_x \chi(1, 2, \bar{7}, \bar{8}) \Gamma(\bar{8}, \bar{7}, \bar{5}, \bar{6}) \mathbf{G}(\bar{6}, 4) \end{aligned} \quad (2.24)$$

2.3 Estimation des vertex irréductibles

2.3.1 Approximation de la self-énergie

Afin d'estimer les vertex irréductibles nous allons utiliser une approche qui s'apparente au formalisme de Baym [11] et faire dans un premier temps une approximation de la self-énergie en présence d'un champ externe. Puis le vertex sera estimé en utilisant la définition (2.23). Il faudra donc exprimer Σ en fonction de \mathcal{G} . Étant donné que l'on s'intéresse uniquement à la phase normale où les termes hors diagonaux des matrices sont nuls, on peut se contenter d'évaluer Σ au premier ordre en \mathcal{G} .

Comme approximation, Vilk et Tremblay [115] ont proposé dans l'esprit de l'approche de Singwi et al. [103], de considérer la self-énergie au premier ordre en

développement perturbatif et de corriger cette approximation par un facteur multiplicatif qui soit tel que l'approximation puisse, en principe, être exacte lorsque l'on considère les corrélations locales. Pour bien indiquer que ce sera là notre premier niveau d'approximation nous placerons un indice supérieur ⁽¹⁾ à toutes les quantités approximées. L'approximation est la suivante:

$$\Sigma^{(1)}(1, \bar{3}; \mathcal{G}) \mathbf{G}^{(1)}(\bar{3}, 2; \mathcal{G}) \approx U \mathbf{A}(1, \mathcal{G}) \mathbf{G}(1, 2; \mathcal{G}) \quad (2.25)$$

La matrice \mathbf{A} sera déterminée par la valeur des fonctions de corrélations locales. Nous pouvons par exemple poser:

$$\Sigma^{(1)}(1, \bar{3}; \mathcal{G}) \mathbf{G}^{(1)}(\bar{3}, 1^+; \mathcal{G}) = U \chi^{(1)}(1, 1, 1^\pm, 1^{++}; \mathcal{G}) + U \mathcal{G}(1, 1) \mathbf{G}^{(1)}(1, 1^+) \quad (2.26)$$

L'indice supérieur $++$ sert à indiquer l'ordonnance de l'opérateur correspondant par rapport aux opérateurs évalués au même temps τ_1 et également à τ_1^+ . Nous avons clairement indiqué qu'il faut exprimer χ et \mathbf{G} comme des fonctions de \mathcal{G} afin d'obtenir \mathbf{A} comme une fonction de \mathcal{G} . Encore une fois on peut se contenter du premier ordre. Pour la fonction de Green, c'est assez simple:

$$\mathbf{G}^{(1)}(1, 2; \mathcal{G}) = \mathbf{G}^{(1)}(1, 2) + \mathcal{G}(1, 2)$$

Pour la fonction de corrélation, on utilise le principe de Pauli considéré localement qui, par le fait que l'on ne s'intéresse qu'aux termes locaux, permet de simplifier l'expression:

$$\begin{aligned} \chi^{(1)}(1, 1, 1^\pm, 1^{++}; \mathcal{G}) &= \begin{pmatrix} \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle_{\mathcal{G}} & -\langle \psi_\uparrow(1) \psi_\downarrow(1) \rangle_{\mathcal{G}} \\ 0 & -\langle n_\uparrow(1 - n_\downarrow) \rangle_{\mathcal{G}} \end{pmatrix} - \mathcal{G}(1, 1) \mathbf{G}^{(1)}(1, 1^+) \\ &= \begin{pmatrix} \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle & 0 \\ 0 & \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - \frac{n}{2} \end{pmatrix} + \mathcal{G}_{12}(1, 1) \sigma_+ - \mathcal{G}(1, 1) \mathbf{G}^{(1)}(1, 1^+) \end{aligned}$$

Ainsi, la relation (2.26) nous donne une relation permettant d'approximer \mathbf{A} apparaissant en (2.25) et donc la self-énergie Σ . Cependant, on peut se demander si l'approximation serait la même si l'on imposait la relation suivante:

$$\Sigma^{(1)}(1, \bar{3}; \mathcal{G}) \mathbf{G}^{(1)}(\bar{3}, 1^-; \mathcal{G}) = U \chi^{(1)}(1, 1, 1^\pm, 1^{--}; \mathcal{G}) + U \mathcal{G}(1, 1) \mathbf{G}^{(1)}(1, 1^-) \quad (2.27)$$

On peut montrer que ces deux approximations donnent le même résultat pour ce qui est de la partie diagonale du vertex irréductible obtenu par dérivée fonctionnelle. Cependant, même après avoir éteint le champ externe, la partie diagonale de la self-énergie demeure différente selon l'approximation choisie. Afin de déterminer l'approximation qui serait la plus appropriée, considérons ces relations exprimées comme des sommes des composantes de Fourier. On obtient pour la partie gauche de l'égalité de (2.26):

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{T}{N} \sum_{\vec{k}} \Sigma^{(1)}(\vec{k}; \mathcal{G}) \mathbf{G}^{(1)}(\vec{k}; \mathcal{G}) e^{-ik_n \eta}$$

Le facteur de convergence est essentiel car aux hautes fréquences la self-énergie est constante, $\lim_{k_n \rightarrow \infty} \Sigma(\mathbf{k}, ik_n) \sim U \frac{n}{2}$ tandis que la fonction de Green décroît en loi de puissance $\lim_{k_n \rightarrow \infty} G(\mathbf{k}, ik_n) \sim \frac{1}{ik_n}$. Cette lente convergence de la somme nous indique que les composantes à hautes fréquences contribuent de façon importante à la somme. De même, lorsqu'on considère la transformée de Fourier de (2.27), on obtient un résultat identique à l'exception du signe dans l'exponentiel du facteur de convergence. Cette différence de signe nous indique que si l'on considérait la somme de (2.26) et de (2.27), le facteur de convergence ne serait plus nécessaire. On le vérifie par le fait que:

$$\lim_{k_n \rightarrow \infty} \left(\Sigma(\mathbf{k}, ik_n; \mathcal{G}) \mathbf{G}(\mathbf{k}, ik_n; \mathcal{G}) + \Sigma(\mathbf{k}, -ik_n; \mathcal{G}) \mathbf{G}(\mathbf{k}, -ik_n; \mathcal{G}) \right) \propto \frac{1}{(ik_n)^2}$$

Ainsi, pour la somme sur les fréquences de Matsubara, une contribution plus importante vient des basses fréquences lorsqu'on considère la somme de (2.26) et de (2.27). C'est pourquoi nous choisissons Λ tel que:

$$\begin{aligned} \Lambda(1, \mathcal{G}) = & \mathcal{G}(1, 1) + \frac{1}{2} \left(\chi^{(1)}(1, 1, 1^\pm, 1^{++}; \mathcal{G}) (\mathbf{G}^{(1)}(1, 1^+; \mathcal{G}))^{-1} \right. \\ & \left. + \chi^{(1)}(1, 1, 1^\pm, 1^{--}; \mathcal{G}) (\mathbf{G}^{(1)}(1, 1^-; \mathcal{G}))^{-1} \right) \end{aligned} \quad (2.28)$$

De ce résultat, on est à même de déduire la self-énergie et sa dépendance au premier ordre en \mathcal{G} . Ainsi la définition du vertex irréductible (2.23) nous permet de créer un lien entre ce vertex et les corrélations locales. Introduisant

l'équation (2.28) dans l'approximation pour la self-énergie (2.25), on obtient, après avoir posé $\phi = 0$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(1)}(1, 2) &= U\delta(1-2) \frac{(\frac{1}{2} - \langle n_{\uparrow} \rangle) \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle + \frac{1}{2} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle}{\langle n_{\uparrow} \rangle (1 - \langle n_{\uparrow} \rangle)} \sigma_z \\ &= \frac{1}{2} (U - (1 - n) U_{pp}) \delta(1-2) \sigma_z \end{aligned} \quad (2.29)$$

et en utilisant la définition du vertex irréductible (2.23):

$$\begin{aligned} \Gamma^{(1)}(1, 2, 3, 4) &= U\delta(1-2)\delta(1-3)\delta(1-4) \frac{\langle n_{\uparrow}(1 - n_{\downarrow}) \rangle}{\langle n_{\downarrow} \rangle \langle 1 - n_{\uparrow} \rangle} \mathbf{1} \\ &= U_{pp} \delta(1-2)\delta(1-3)\delta(1-4) \mathbf{1} \end{aligned} \quad (2.30)$$

où σ_z est la matrice de Pauli correspondant à la composante z du spin. On a introduit la variable U_{pp} qui correspond à la valeur renormalisée du vertex.

Malgré que nous ayons démontré une façon de dériver une approximation pour la self-énergie et le vertex, ces relations devraient être considérées comme des ansatz qui seront utilisés dans le calcul des fonctions de Green à une et à deux particules.

2.3.2 Détermination de la fonction de corrélation

Comme on s'intéresse à la phase normale sans champ externe, toutes les matrices sont diagonales et nous pouvons évaluer les composantes (1,1) indépendamment des composantes (2,2). C'est pourquoi à partir de cette section et pour le reste du chapitre nous nous concentrerons sur les composantes (1,1) de chaque matrice. Nous ne l'indiquons pas de façon explicite afin de ne pas alourdir la notation. Toutefois, le lecteur attentif, remarquera que nous n'utiliserons plus les caractères gras.

Le calcul de Σ et de Γ nous permet d'estimer la fonction de corrélation. Mais avant de pouvoir le faire nous devons déterminer la fonction de Green en utilisant la relation de Dyson, (2.12). Pour la déterminer, nous procéderons de la

même façon que dans le formalisme de Baym et Kadanoff [10,11] en utilisant la même self-énergie que celle que nous avons utilisée pour dériver le vertex irréductible. On peut ainsi dire que l'on considère la fonction de Green et le vertex irréductible à un même niveau d'approximation.

On peut remarquer que suivant notre première approximation, la self-énergie n'est en fait qu'une correction du potentiel chimique. En appliquant une transformation de Fourier on peut diagonaliser les termes sans interactions. Ce faisant, on obtient la fonction de Green:

$$G^{(1)}(\tilde{k}) = \frac{1}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu^{(1)} - \Sigma^{(1)}} \quad (2.31)$$

où $\tilde{k} = (\mathbf{k}, ik_n)$ et $k_n = (2n + 1)\pi T$ est une fréquence de Matsubara fermionique avec $n \in (-\infty, +\infty)$. Nous avons placé un indice supérieur ⁽¹⁾ au potentiel chimique pour indiquer que celui-ci sera ajusté afin que la fonction de Green $G^{(1)}$ ait le bon remplissage, c'est-à-dire tel que¹:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^-} \frac{T}{N} \sum_{\tilde{k}} G^{(1)}(\tilde{k}) e^{-ik_n \eta} = n \quad (2.32)$$

Il est intéressant de vérifier le cas demi-rempli où la valeur du potentiel chimique est connue exactement, $\mu = U/2$. On sait que pour que le nombre moyen de particules correspondant à $G^{(1)}$ soit $n = 1$, il faut avoir $\mu^{(1)} - \Sigma^{(1)} = 0$. Or, à demi-remplissage la self-énergie obtenue, éq.(2.29), est donnée par $\Sigma^{(1)} = U/2$. Donc, le potentiel chimique prend sa valeur exacte $\mu^{(1)} = U/2$.

Maintenant nous pouvons déterminer la fonction de corrélation. Étant donné que dans notre approximation le vertex irréductible est local et statique, éq.(2.30), nous pouvons nous restreindre à l'évaluation des fonctions de corrélation

¹ Cette condition accompagnée du fait que la self-énergie, $\Sigma^{(1)}$ n'est qu'un déplacement du potentiel chimique nous montre que la valeur exacte de cette dernière quantité n'aura pas d'importance dans l'estimation de $G^{(1)}$.

à deux points: $\chi_{11}(1, 1, 2, 2) = \chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \tau_1 - \tau_2)$. Cette fonction correspond à la fonction de corrélation pour les paires locales. En utilisant la relation de Bethe-Salpeter, (2.24), on peut montrer qu'après avoir appliqué la transformation de Fourier, on obtient:

$$\chi^{(1)}(\bar{q}) = \frac{\chi_0^{(1)}(\bar{q})}{1 + \Gamma^{(1)}\chi_0^{(1)}(\bar{q})} \quad (2.33)$$

où

$$\chi^{(1)}(\bar{q}) = \int d^2\mathbf{r} \int_0^\beta d\tau \chi(\mathbf{r}, \tau) e^{iq_n\tau - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

avec $q_n = 2n\pi T$ une fréquence de Matsubara bosonique. La fonction de corrélation obtenue est de la même forme que celle obtenue d'une approximation de type matrice-T à l'exception du fait que le vertex est renormalisé. De plus, le numérateur est donné par

$$\chi_0^{(1)}(\bar{q}) = \frac{T}{N} \sum_{\bar{k}} G^{(1)}(-\bar{k} + \bar{q}) G^{(1)}(\bar{k}) \quad (2.34)$$

Comme on peut le remarquer, $\chi_0^{(1)}$ a la même forme que la fonction de corrélation en l'absence d'interaction. Cependant, il est à noter que la fonction de Green qui y apparaît est la fonction de Green corrigée par la première estimation de la self-énergie.

2.3.3 Détermination de la double occupation

Le développement présenté précédemment nous a permis d'écrire le vertex irréductible comme une fonction de la valeur moyenne d'occupation double (2.30). Cependant, cette quantité est inconnue. Différentes approches permettent de régler ce problème: on peut, par exemple, considérer la valeur obtenue par simulation Monte Carlo, ou, comme nous le verrons dans le chapitre suivant, celle obtenue d'un calcul champ moyen à température nulle. La solution proposée ici consiste à considérer une règle de somme afin de fermer le système d'équations sans appel à d'autre information extérieure. Ce choix nous assure ainsi que notre approximation respectera cette règle de somme.

La règle de somme que nous allons considérer donne une autre relation liant le vertex irréductible à la valeur moyenne de double occupation. Cette règle de somme découle du théorème de fluctuation-dissipation.

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^-} \frac{T}{N} \sum_{\vec{q}} \chi(\vec{q}) e^{-iq_n \eta} = \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$$

À ce niveau, on substitue des expressions approximatives qui permettent d'obtenir $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ de façon auto-cohérente.

$$\boxed{\lim_{\eta \rightarrow 0^-} \frac{T}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\chi_0^{(1)}(\vec{q})}{1 + \Gamma^{(1)} \chi_0^{(1)}(\vec{q})} e^{-iq_n \eta} = \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle} \quad (2.35)$$

Étant donné le comportement de la susceptibilité à haute fréquence, $\lim_{q_n \rightarrow \infty} \chi_0(iq_n) \propto 1/(iq_n)$, le facteur $e^{-iq_n \eta}$ est essentiel pour assurer la convergence de la somme. Cette règle de somme est en fait la série de Fourier-Matsubara et ce facteur de convergence sert à indiquer l'ordonnance temporelle des opérateurs.

Ainsi, les relations (2.30), (2.31), (2.32), (2.34) et (2.35) forment un système d'équations qui nous permet de déterminer, de façon approximative, les propriétés à deux particules du modèle de Hubbard. Parfois, on a caractérisé cette approche par "imposition d'une règle de somme exacte". Cependant, il est à noter qu'il serait plus précis de parler de règle de somme auto-cohérente car comme nous l'avons mentionné précédemment la double occupation n'est pas connue de façon exacte. Les valeurs obtenues ainsi pour la double occupation sont présentées au chapitre suivant où l'on compare avec les résultats obtenus par simulation Monte Carlo.

2.3.4 Raffinement de l'approximation

Connaissant les propriétés à deux particules il est possible de raffiner notre approximation pour les propriétés à une particule. Utilisant l'équation du

mouvement, (2.11), et l'équation de Bethe-Salpeter, (2.24), on peut démontrer la relation exacte:

$$\Sigma(1, 2) = -U\delta(1-2)\sigma_x \mathbf{G}(1^{\mp}, 1)\sigma_x + U\sigma_x \mathbf{G}(1, \bar{5})\sigma_x \chi(1, 1, \bar{7}, \bar{8})\mathbf{F}(\bar{8}, \bar{7}, \bar{5}, 2) \quad (2.36)$$

On voit qu'étant donné qu'à notre premier niveau d'approximation le vertex irréductible est local, la seule fonction de corrélation contribuant à la self-énergie sera la fonction de corrélation de paires à deux points que nous avons évaluée à la section (2.3.2). Utilisant la transformation de Fourier, on obtient ce que l'on appellera le deuxième niveau d'approximation pour la self-énergie:

$$\Sigma^{(2)}(\bar{k}) = U\frac{n}{2} - U\frac{T}{N} \sum_{\bar{q}} \Gamma^{(1)} \chi^{(1)}(\bar{q}) G^{(1)}(-\bar{k} + \bar{q}) \quad (2.37)$$

La relation (2.37) est utile car elle permet de séparer la self-énergie en deux termes. Le premier terme est constant et est donc présent aux grandes fréquences comme aux basses fréquences. Le deuxième terme contient les contributions basses fréquences que nous évaluons au premier niveau d'approximation.

On peut remarquer que ce résultat diffère du résultat obtenu par Vilk et Tremblay [114] par le fait qu'il n'apparaît dans l'expression de la self-énergie qu'une seule fonction de corrélation et un seul vertex renormalisé. On devrait s'attendre qu'à demi-remplissage on retrouve leur résultat (à cause de la symétrie particule-trou pour ce remplissage). Cette différence vient du fait que notre calcul est fait dans le canal transverse et leur calcul a été fait dans le canal longitudinal. Il serait possible de faire le calcul du cas attractif dans le canal longitudinal, on retrouverait alors la formule de Vilk et Tremblay pour la self-énergie. Pour le cas attractif, c'est la susceptibilité de charge qui serait critique à demi-remplissage (voir section 1.3). Ainsi la symétrie entre les corrélations de charge et celles de paires qui semble être brisée dans notre approximation pourrait être retrouvée en traitant le canal longitudinal et le canal transverse de la même façon [78].

La fonction de Green se détermine simplement par l'utilisation de l'équation de Dyson

$$G^{(2)}(\bar{k}) = \frac{1}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu^{(2)} - \Sigma^{(2)}(\bar{k})} \quad (2.38)$$

En accord avec l'argument de Luttinger [69], le potentiel chimique est évalué au même niveau d'approximation que la self-énergie. Nous devons donc également raffiner l'estimation de ce paramètre.

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^-} \frac{T}{N} \sum_{\bar{k}} G(\bar{k}) e^{-ik_n \eta} = n$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^-} \frac{T}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{e^{-ik_n \eta}}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu^{(2)} - \Sigma^{(2)}(\bar{k})} = n$$

Avec le formalisme présenté jusqu'à maintenant, il semble difficile de poursuivre les itérations et d'obtenir une meilleure estimation du vertex irréductible. Pour y arriver, il faudrait améliorer notre estimation des termes hors-diagonaux de la self-énergie: De plus, l'équation de Bethe-Salpeter dérivée n'est valide que pour les termes diagonaux (Nous expliquons en annexe C comment il serait possible de le faire). Ainsi, l'approximation de la self-énergie par la relation (2.37) sera notre approximation finale. Nous présentons au chapitre suivant la fonction de Green et la self-énergie obtenues par les relations (2.38) et (2.37).

2.4 Règles de somme

Maintenant que nous avons terminé le développement de notre approximation nous allons vérifier si celle-ci permet de satisfaire certaines règles de somme ainsi que le théorème de Mermin-Wagner.

2.4.1 Moments de la susceptibilité

On peut se demander si notre résultat serait le même si au lieu de prendre la règle de somme (2.35) on avait déterminé la valeur moyenne de double occupation avec la règle de somme exacte suivante²:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{T}{N} \sum_{\bar{q}} \chi(\bar{q}) e^{-iq_n \eta} = \langle (1 - n_{\uparrow})(1 - n_{\downarrow}) \rangle = 1 - n + \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \quad (2.39)$$

On peut montrer en fait que la réponse est affirmative si notre approximation satisfait le moment d'ordre zéro de la susceptibilité de paires. En fait, nous irons plus loin, nous allons démontrer que notre approximation satisfait les deux premiers moments de la susceptibilité de paires.

Pour la démonstration, nous allons, dans un premier temps, déterminer les résultats exacts. Définissons la partie imaginaire de la susceptibilité de paires:

$$\chi''(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{2} \langle [\Delta(\mathbf{q}, t), \Delta^\dagger(\mathbf{q}, 0)] \rangle \quad (2.40)$$

Utilisant la représentation de Lehmann [108] pour la fonction de corrélation et pour la susceptibilité, on peut démontrer la représentation spectrale suivante

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega)}{\omega - iq_n} \quad (2.41)$$

Le développement haute fréquence de $\chi(\bar{q})$ permet de faire le lien entre cette fonction et les moments de la fonction spectrale $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$.

$$\lim_{q_n \rightarrow \infty} \chi(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{-1}{iq_n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''(\mathbf{q}, \omega) - \frac{1}{(iq_n)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''(\mathbf{q}, \omega) + O(1/q_n^3) \quad (2.42)$$

On voit que les deux premiers termes du développement seront donnés par les deux premiers moments de la partie imaginaire de la susceptibilité. On peut

² La différence par rapport à la règle de somme (2.35) vient du changement de la limite. Ici, on pose $\eta \rightarrow 0^+$.

vérifier que le moment d'ordre zéro correspond exactement à la différence entre (2.35) et (2.39):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''(\mathbf{q}, \omega) &= \langle [\Delta(\mathbf{q}), \Delta^\dagger(\mathbf{q})] \rangle = 1 - n \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} T \sum_{q_n} \left(e^{-iq_n \eta} - e^{iq_n \eta} \right) \chi(\mathbf{q}, iq_n) \end{aligned} \quad (2.43)$$

Ainsi, étant donné que nous avons utilisé (2.35) comme condition pour déterminer la double occupation, on voit que si notre approximation satisfait le moment d'ordre zéro, la double occupation que nous aurions obtenue aurait été la même si nous avions imposé la règle de somme (2.39).

Pour ce qui est du premier moment, qui est une généralisation de la règle de somme f au cas du modèle de Hubbard attractif, il sera donné par:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''(\mathbf{q}, \omega) \omega &= - \langle [[H, \Delta(\mathbf{q})], \Delta^\dagger(\mathbf{q})] \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) - 2\mu + U)(1 - 2n(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (2.44)$$

où $n(\mathbf{k}) = \sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \psi_{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle$ est la densité d'états renormalisée.

On voit de par les expressions (2.43) et (2.44) que la principale contribution à ces sommes vient du comportement haute fréquence de la fonction de corrélation. C'est pourquoi, afin de vérifier si notre approximation satisfait les moments, nous procédons au développement en $1/iq_n$ de l'expression (2.33). Regardons dans un premier temps le comportement de $\chi_0^{(1)}$ qui est donnée par l'équation (2.34).

$$\begin{aligned} \lim_{q_n \rightarrow \infty} \chi_0^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n) &= \lim_{q_n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\epsilon(\mathbf{k})) + n_F(\epsilon(-\mathbf{k} + \mathbf{q})) - 1}{iq_n - \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(-\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\ &= \frac{n - 1}{iq_n} + \frac{1}{(iq_n)^2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (2n_F(\epsilon(\mathbf{k})) - 1)(\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(-\mathbf{k} + \mathbf{q})) + O(1/q_n^3) \end{aligned}$$

où $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu^{(1)} + \Sigma^{(1)}$ et n_F est la fonction de distribution de Fermi-Dirac. Ce résultat vient du fait que le potentiel chimique $\mu^{(1)}$ est ajusté de façon à ce

que $G^{(1)}$ ait le bon remplissage n . On peut en effet vérifier que si le potentiel chimique est ainsi ajusté, $\chi_0^{(1)}$ satisfait la condition:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{T}{N} \sum_{\bar{q}} \chi_0^{(1)}(\bar{q}) \left(e^{-iq_n \eta} - e^{iq_n \eta} \right) = 1 - n \quad (2.45)$$

On peut maintenant montrer en développant le dénominateur apparaissant dans $\chi^{(1)}$ que la limite pour la fonction de corrélation renormalisée sera:

$$\begin{aligned} \lim_{q_n \rightarrow \infty} \chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n) &= \frac{n-1}{iq_n} \\ &+ \frac{1}{(iq_n)^2} \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (2n_F(\varepsilon(\mathbf{k})) - 1)(\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(-\mathbf{k} + \mathbf{q})) - (1-n)^2 \Gamma^{(1)} \right) + O(1/q_n^3) \end{aligned} \quad (2.46)$$

Comparant la relation (2.42) au résultat (2.46), on peut évaluer les deux premiers moments de la susceptibilité. Pour le moment d'ordre zéro on a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) = 1 - n$$

On satisfait donc de façon exacte le moment d'ordre zéro de la susceptibilité de paires. On voit qu'une condition importante vient du comportement à haute fréquence du numérateur dans la forme de type RPA que prend la susceptibilité dans cette approximation.

Pour ce qui est du premier moment le résultat est le suivant:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''^{(1)}(\mathbf{q}, \omega) \omega &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (1 - 2n_F(\varepsilon(\mathbf{k}))) (\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k}) - 2(\mu^{(1)} - \Sigma^{(1)})) \\ &+ (1-n)^2 \Gamma^{(1)} \end{aligned}$$

En comparant avec le résultat exact (2.44), on voit qu'on satisfait de façon autocohérente ce moment car dans notre approximation la fonction de distribution $n(\mathbf{k})$ est réduite à la distribution de Fermi-Dirac. De plus, on utilise le fait que dans cette approximation le potentiel chimique est approximé par $\mu \simeq \mu^{(1)}$ et que la correction du potentiel chimique provenant de notre approximation de la self-énergie (2.29) permet de satisfaire la condition:

$$U = 2\Sigma^{(1)} + (1-n)\Gamma^{(1)} \quad (2.47)$$

Donc, la démonstration est faite que le comportement hautes fréquences de la fonction de corrélation sera tel qu'il permet de satisfaire notre généralisation de la règle de somme f.

2.4.2 Comparaison avec l'approche des moments

Il est intéressant de noter la ressemblance entre la méthode utilisée pour déterminer le vertex et les approches de type approximation par les moments [55,72]. Dans ces approches, on considère une approximation de type n -pôles pour la fonction de Green. Ce qui correspond à une approximation où apparaissent $2n$ paramètres associés à la position et au poids de chaque pôle. Ces paramètres sont déterminés par la connaissance de $2n$ moments spectraux. Une telle réalisation est possible par le fait que les moments du poids spectral contiennent toute l'information nécessaire pour construire la fonction de Green. Lonke [55] a montré que la connaissance de n de ces moments permet de définir un domaine fermé du plan complexe auquel appartiendra la fonction de Green.

Le problème auquel nous nous sommes confrontés pour la détermination de la fonction de corrélation est différent pour trois raisons. Primo, dans notre cas, on ne tronque pas le nombre de pôles. Nous utilisons les pôles que nous pouvons déterminer de façon exacte pour la fonction $\chi_0(\omega)$ (exacte pour une valeur de μ donnée). Les pôles de χ seront différents de ceux de χ_0 à cause du paramètre Γ que nous avons introduit. Mais nous gardons un nombre infini de pôles. Ce qui nous donne un certain avantage sur la méthode habituelle de l'approche des moments.

Secundo, les moments de la susceptibilité de paires ne sont pas connus de façon exacte, contrairement à ceux du poids spectral à une particule. Il faut donc ajouter d'autres relations pour fermer le système d'équations. Ici, on a utilisé la relation (2.30) que l'on a dérivée d'une approximation du type Baym-Kadanoff.

Tertio, la susceptibilité de paires n'est pas un poids spectral car elle n'est pas positive dans tout son domaine de définition. En effet, elle est positive pour les fréquences positives et négative pour les fréquences négatives, c'est-à-dire qu'elle mène à une dissipation positive. Si on voulait utiliser la méthode des moments, il serait préférable de définir une fonction de distribution qui soit positive.

Afin de s'en définir une, considérons la représentation spectrale de la fonction de corrélation en temps imaginaire.

$$\begin{aligned}
\chi(\mathbf{q}, \tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''(\mathbf{q}, \omega) \frac{e^{-\tau\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega)}{\tanh(\beta\omega/2)} \frac{e^{(\frac{\beta}{2} - \tau)\omega}}{\cosh(\beta\omega/2)} \\
&\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{\chi}(\mathbf{q}, \omega) \frac{e^{(\frac{\beta}{2} - \tau)\omega}}{\cosh(\beta\omega/2)}
\end{aligned}$$

De par la positivité de la dissipation, $\chi''(\mathbf{q}, \omega) = -\chi''(\mathbf{q}, -\omega)$, il est facile de montrer que le poids spectral, A_{χ} est positif pour toutes les fréquences. De plus, on sait que la susceptibilité s'annule à fréquence nulle. On en déduit que A_{χ} sera intégrable à ce point. On peut montrer que le premier moment de ce poids correspond à la condition que nous avons posée pour déterminer le vertex irréductible. Plus précisément, nous obtenons la somme de (2.35) et de (2.39), mais comme mentionné précédemment si l'on satisfait l'une de ces conditions l'autre est satisfaite aussi.

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\omega}{\pi} A_{\chi}(\mathbf{q}, \omega) &= T \sum_{q_n} \chi(\mathbf{q}, iq_n) (e^{-iq_n 0^+} + e^{-iq_n 0^-}) \\
&= \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle + \langle (1 - n_{\uparrow})(1 - n_{\downarrow}) \rangle
\end{aligned}$$

Ainsi, on peut présenter la règle de somme choisie pour déterminer la valeur moyenne de double occupation (2.35), comme une façon de déterminer le déplacement des pôles de $\chi^{(1)}$ par rapport à ceux de $\chi_0^{(1)}$ en imposant le respect du premier moment du poids spectral A_{χ} .

2.4.3 Théorème de Mermin-Wagner

Il est intéressant de vérifier si notre système d'équations permet de satisfaire le théorème de Hohenberg-Mermin-Wagner-Coleman [47,75,23] selon lequel aucun paramètre d'ordre invariant sous symétrie continue peut acquérir une valeur moyenne non-nulle à température finie dans un système bidimensionnel. Il est à noter que ceci n'est pas en contradiction avec la présence d'une transition

de type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [13,59] à température finie car comme nous l'avons mentionné précédemment cette transition se fait sans apparition d'ordre à longue portée.

Considérons l'expression pour le vertex irréductible (2.30), pour la fonction de corrélation (2.33) et la règle de somme (2.35). Ces trois relations sont suffisantes pour démontrer le respect du théorème de Mermin-Wagner.

Considérons d'abord la limite haute température où l'on connaît approximativement la valeur moyenne de double occupation. On peut montrer que dans cette limite $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ est près de la valeur Hartree, $n/4$. Alors, le vertex est faiblement renormalisé $\Gamma \approx U$ (U étant négatif le vertex le sera également). Donc, si la température est suffisamment élevée par rapport à U , le dénominateur dans (2.33) est toujours positif. En abaissant, la température $\chi_0(\vec{q} = 0)$ augmente, il en sera donc de même de $\chi^{(1)}(\vec{q} = 0)$ et de $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$. L'expression du vertex (2.30) nous indique que celui-ci devrait alors diminuer (en valeur absolue).

Pour la démonstration de l'absence de point critique, on procédera par l'absurde. Supposons donc, qu'à une température donnée l'augmentation de $\chi_0(\vec{q} = 0)$ est suffisante pour qu'il y ait une singularité: $\Gamma \chi_0(\vec{q} = 0) = -1$. Alors, étudions le comportement autour de ce point singulier: $1 + \Gamma \chi(\mathbf{q}, iq_n = 0) \propto \mathbf{q}^2$. Un tel comportement n'est pas intégrable pour un système bidimensionnel (étant donné qu'il y a au numérateur un facteur q provenant de la mesure). On obtient que pour toute température finie, la somme (2.35) ne convergera pas. Ce qui indiquerait un taux de double occupation divergeant. De par la relation (2.30), on aurait un changement de signe du vertex qui serait infiniment répulsif ce qui est en contradiction avec la supposition de départ. On en conclut que notre formalisme empêche l'existence de point critique et qu'au fur et à mesure que la température est abaissée, la renormalisation du vertex devient de plus en plus importante de telle façon que sa valeur absolue soit inférieure à la valeur critique. La seule supposition que nous avons faite est qu'il existe bien une valeur de $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ qui permette de satisfaire simultanément la règle de somme (2.35) et l'expression pour le vertex irréductible (2.30).

Il faut porter attention au cas d'un réseau fini car alors la fonction $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n = 0)$ prend un nombre fini de valeurs distinctes. Il est alors possible de trouver une valeur de Γ telle que pour certaines valeurs de \mathbf{q} , le dénominateur de (2.33) puisse être négatif alors que la somme (2.35) demeure finie et positive (le dénominateur ne s'annulant pour aucune des valeurs possibles de \mathbf{q}). Le système d'équations pourrait alors être entièrement satisfait.³

Notre preuve du respect du théorème de Mermin-Wagner est basé sur le fait que dans notre approximation la susceptibilité de paires ne peut pas être singulière. Ainsi, on en déduit que notre approximation ne peut pas prédire la présence d'un point critique BKT et ce même hors du demi-remplissage. Ceci sera donc une limite de notre approximation qui ne pourra pas s'appliquer dans la limite très basse température hors demi-remplissage.

2.4.4 Est-ce que notre approche est conservative?

La ressemblance entre notre approche et une approche de type Baym-Kadanoff va plus loin que ce que nous avons mentionné à la section 2.3. En effet, tout comme la fonction de partition en présence d'un champ externe permettait de générer les termes hors diagonaux de la fonction de Green, la fonctionnelle $W[\mathcal{G}]$ permet de générer les termes hors diagonaux de la self-énergie (voir annexe B). Ainsi, le résultat démontré par Baym et Kadanoff [10,11], se généralise dans notre cas à la définition d'un vertex irréductible dont les termes diagonaux peuvent s'exprimer comme une double dérivation d'une fonctionnelle Θ par rapport à la fonction de Green. Pour déterminer cette fonctionnelle, on doit

³ Il est à noter qu'une étude en température devrait alors soit montrer que le vertex admet une discontinuité ou qu'à basse température il existerait deux valeurs distinctes de Γ qui permettent de satisfaire simultanément la règle de somme (2.35) et l'expression du vertex irréductible (2.30) dont une où $\Gamma\chi_0(\vec{q} = 0) < 1$ et l'autre où $\Gamma\chi_0(\vec{q} = 0) > 1$. Des résultats préliminaires obtenus par Kyung semble montrer que cette deuxième solution serait observée pour des interactions intermédiaires [60].

considérer la partie hors diagonale de la self-énergie approximée par (2.25) et (2.28). Au premier ordre en \mathcal{G} , on obtient:

$$\begin{aligned}\Sigma_{12}(1, 2; \mathcal{G}) &= \frac{\delta\Theta[\mathcal{G}]}{\delta\mathcal{G}_{21}(2, 1)} = \mathcal{G}_{12}(1, 1)\Gamma_{22}^{(1)}\delta(1 - 2) \\ \Sigma_{21}(1, 2; \mathcal{G}) &= \frac{\delta\Theta[\mathcal{G}]}{\delta\mathcal{G}_{12}(2, 1)} = \mathcal{G}_{21}(1, 1)\Gamma_{11}^{(1)}\delta(1 - 2)\end{aligned}$$

Or, nous avons obtenu $\Gamma_{11} = \Gamma_{22}$. Ainsi, il est facile de développer une fonctionnelle qui permet de générer les parties hors diagonales de la self-énergie au premier ordre en \mathcal{G} et de générer la partie diagonale du vertex irréductible. Celle-ci est donnée par:

$$\Theta[\mathcal{G}] = \frac{1}{2}\text{Tr}\left\{\mathcal{G}(\bar{1}, \bar{2})\Gamma^{(1)}(\bar{2}, \bar{1}, \bar{4}, \bar{3})\mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4})\right\}$$

Il est à noter que la fonctionnelle Θ ne permet de générer que les termes non-diagonaux de la self-énergie.

Il est pertinent de se demander si notre approche conserve de façon globale l'énergie, la quantité de mouvement et le nombre de particules. Par conservation globale, on veut dire que les fonctions de corrélation seront telles qu'elles pourront bien évaluer la variation de la fonction de Green par rapport à l'introduction d'un champ infinitésimal approprié. Par exemple, si l'on fait une petite variation du champ de jauge, on peut vérifier si l'approximation satisfait la loi de conservation globale du nombre de particules [11]. Si l'on se réfère à la dérivation de Baym [11] pour le développement d'une approximation conservative, il faut montrer que la self-énergie (partie diagonale dans notre cas) peut s'écrire comme la variation d'une fonctionnelle par rapport à une variation de la fonction de Green. Cependant, dans notre cas, le champ que nous avons introduit est couplé à des fonction de Green anormales. Ainsi la fonction de réponse que nous évaluons, $\chi(\bar{q})$ ne peut pas décrire la réponse du système à une variation globale du nombre de particules ou de l'énergie.

Pour pouvoir affirmer si notre approximation est conservative, il faut d'abord déterminer comment nous décidons d'évaluer les fonctions de réponse

pertinentes. Nous pourrions considérer la relation de Bethe-Salpeter, (2.24), que nous avons utilisée pour évaluer la fonction de corrélation de paires, et, présumant que les symétries de croisement sont satisfaites, évaluer les fonctions de réponses d'intérêt. Malgré la ressemblance entre notre approche et le formalisme prescrit par Baym, il n'y a aucune raison de penser qu'une telle approximation pourrait être conservative.

La meilleure façon de procéder serait de considérer notre formalisme en présence d'un autre champ externe qui permettrait de décrire la réponse du système à une variation globale du nombre de particule (changement de jauge), de l'énergie ou de la quantité de mouvement. Ainsi, on pourrait s'assurer d'avoir une estimation des fonctions de réponse qui soit conservative. Cette étude a été développée par Kyung [60] pour le calcul de la susceptibilité magnétique et la susceptibilité de charge du modèle de Hubbard attractif.

CHAPITRE III

COMPARAISON AUX DONNÉES MONTE CARLO

Maintenant que nous avons développé une approximation pour l'étude du modèle de Hubbard, nous pouvons vérifier la validité de cette approximation et étudier les propriétés prédites par celle-ci. Nous pouvons entre autre vérifier ce que nous avons présumé au chapitre 1, c'est-à-dire la présence d'un large régime avec pseudogap près du demi-remplissage.

Pour notre étude nous utiliserons une valeur d'interaction situé du côté des faibles couplages par rapport au couplage maximisant l'interaction (voir figure 3), soit $U = -4$. Ainsi, notre étude ne devrait pas présenter des effets de couplage fort. Malgré que le cas à demi-remplissage a déjà été étudié pour le modèle répulsif dans le cadre de l'approximation TPSC [114] nous l'étudierons à nouveau car cela nous permettra de comparer les résultats du canal longitudinal avec ceux du canal transverse. La raison du choix de ce cas est qu'il est alors beaucoup plus facile de faire une étude en taille par simulation Monte Carlo quantique sans avoir des effets parasites tel que l'absence de points sur la surface de Fermi. De plus, dans notre étude nous présenterons de nouvelles quantités telle que la densité de suprafluide. Malgré le choix du cas demi-rempli, le lecteur pourra noter que les équations dérivées dans le cadre de la méthode TPSC ne seront pas restreintes à ce cas.

Ce dernier chapitre est divisé en cinq parties. Dans la première partie, nous présentons la technique Monte Carlo quantique (MCQ) utilisée pour le calcul des propriétés du modèle de Hubbard. Nous expliquons les sources d'erreurs qui sont reliées à cette technique.

La technique MCQ est utile car elle permet de vérifier la validité de notre approximation. C'est ce qui est présenté dans la deuxième partie du chapitre, sections 2 et 3. Nous y démontrons que la forme de type RPA utilisée pour la

susceptibilité de paires est bien observée dans les résultats MCQ et que le vertex renormalisé est bien approximé par notre approche analytique. Dans la section 3, nous montrons que le spectre à une particule est bien estimé par notre approche analytique. Nous montrons que ce spectre présente un pseudogap au niveau de Fermi et ce à des températures bien supérieures à la température critique.

Dans la troisième partie, section 4 et 5, nous étudions d'autres propriétés mesurées par MCQ afin d'étudier le mécanisme qui serait responsable de l'apparition du pseudogap. Comme nous le verrons, les données MCQ démontre clairement qu'aux températures où le pseudogap est observé, les fluctuations de paires dominantes sont des fluctuations classiques. De plus, nous montrons que la densité de suprafluide y demeure très faible et qu'ainsi le mécanisme à la base du régime pseudogap n'est pas lié à la présence d'ordre à longue portée. Nous argumentons que le pseudogap correspond à un précurseur de l'état supraconducteur présent à plus basse température. Ce résultat montre bien que les fluctuations supraconductrices à longue portée jouent un rôle important dans la disparition du liquide de Fermi.

La partie suivante, section 6, présente l'étude du mécanisme pour la formation du pseudogap tel que prédit par notre approximation. Nous voyons qu'il correspond aux propriétés que l'on a observé dans l'étude MCQ. La longueur de corrélation de paires devient très importante à basse température amenant l'apparition d'un régime classique renormalisé. Nous montrons que lorsque cette longueur devient plus importante que la longueur d'onde de de Broglie, il peut apparaître un pseudogap dans le spectre à une particule.

Dans la dernière section, nous montrons que ce que nous observé par l'application des méthodes de MCQ au modèle de Hubbard demi-rempli peut s'extrapoler en dehors du demi-remplissage. On y observe également un pseudogap ainsi que l'apparition d'un régime classique renormalisé.

3.1 Monte Carlo quantique

Les méthodes Monte Carlo visent à résoudre des problèmes complexes par l'utilisation des nombres aléatoires et des statistiques. De façon générale, elles consistent à résoudre des problèmes d'intégration ou de somme de façon partielle en sélectionnant par un processus aléatoire un certain nombre d'éléments de la somme. C'est pourquoi ces méthodes font parties d'une branche des mathématiques dite expérimentale. Étant donné que l'on ne fait qu'un échantillonnage plus ou moins représentatif de la totalité des observations possibles, la réponse obtenue par l'application des méthodes Monte Carlo est statistique dans sa nature et est donc entachée d'une certaine incertitude. Cette dernière donne à l'expérimentateur une mesure de la vraisemblance de la réponse observée. Comme ouvrage général sur les techniques Monte Carlo nous recommandons la lecture des ouvrages de Hammersley et Handscomb [44], de Kalos et Whitlock [56] et de Robert et Casella [93].

En mécanique statistique, il est courant d'utiliser les méthodes Monte Carlo pour l'évaluation des moyennes thermodynamiques. Il faut dans un premier temps choisir des variables aléatoires permettant d'explorer l'espace des phases. Il faut s'assurer que le le domaines de valeurs admises par les variables permettent d'explorer l'ensemble de l'espace des phases de façon à permettre le calcul des moyennes thermodynamiques d'intérêt. Pour un système quantique, il n'est pas simple d'y parvenir. Nous utilisons le développement de Trotter [109] qui permet de transformer notre système quantique bidimensionnel en un système classique tridimensionnel:

$$\begin{aligned}
 e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I)} &= \exp - \int_0^\beta d\tau (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I) \\
 &= \lim_{N_\tau \rightarrow \infty} \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau \mathcal{H}_0} e^{-\Delta\tau \mathcal{H}_I} \\
 &\approx \prod_{l=1}^{N_\tau} \left(e^{-\Delta\tau \mathcal{H}_0} e^{-\Delta\tau \mathcal{H}_I} + O(\Delta\tau^2) \right)
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

où $N_\tau \Delta\tau = \beta$. La troisième dimension correspond au temps imaginaire. La discrétisation de ce temps introduit une erreur de l'ordre de $\Delta\tau^2$ dans le calcul

des moyennes thermodynamiques [39]. Typiquement, nous choisirons $\Delta\tau \simeq 1/10$, ce qui implique que cette approximation induira une erreur systématique de l'ordre de 1% qui sera environ, pour notre échantillonnage, du même ordre de grandeur ou inférieure à l'erreur statistique. On voit de notre résultat (3.1), que la dimension supplémentaire sera discrète avec N_τ points.

Ayant ajouté cette dimension, on peut introduire la variable aléatoire qui nous permettra d'explorer l'espace des phases. On peut y parvenir par l'utilisation d'une transformation de Hubbard-Stratonovich où la variable auxiliaire [80] correspond à la variable aléatoire. Appliquant cette transformation de façon à découpler le terme d'interaction, \mathcal{H}_I , on peut alors faire la trace sur les fermions de façon analytique. La somme sur les configurations du champ aléatoire sera quant à elle faite par la méthode Monte Carlo. Pour l'application de la transformation de Hubbard-Stratonovich au modèle de Hubbard, nous référons le lecteur aux papiers originaux [14,46,116] ainsi qu'à la présentation de Tremblay [107]. Le lecteur y trouvera aussi l'expression permettant d'évaluer les observables en fonction des configurations du champ aléatoire x_i où i correspond aux points du réseau tridimensionnel espace et temps imaginaire. Il pourra noter que la variable aléatoire choisie permet d'évaluer directement un nombre important d'observables. Les détails de l'application des méthodes Monte Carlo au modèle de Hubbard peuvent aussi être retrouvés dans le rapport technique de Touchette et Poulin [106].

À l'erreur systématique s'ajoute l'erreur statistique mentionnée précédemment. Celle-ci est liée à l'efficacité de la simulation à explorer l'espace des phases. Afin de connaître la vraisemblance de nos simulations, il sera important d'évaluer l'erreur statistique. L'importance de cette erreur dépend, entre autres, de la technique d'échantillonnage choisie. Par exemple, si l'on fait N observations d'une observable O , la moyenne de notre échantillonnage sera donnée par

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^N O_i p_i}{\sum_{i=1}^N p_i}$$

où p_i est la densité de probabilité associée à l'évènement O_i . Si les observations sont indépendantes les unes des autres, il est alors justifié d'utiliser comme estimateur de l'incertitude sur la moyenne la variance de cette observable réduit par un facteur lié au nombre d'observations:

$$\delta\mu^2 = \frac{1}{N-1} \left(\frac{\sum_{i=1}^N O_i^2 p_i}{\sum_{i=1}^N p_i} - \mu^2 \right)$$

Dans notre cas, on utilise un processus du genre marche aléatoire (chaîne de Markov) où le point de l'espace des phases considéré à une étape donnée est entièrement déterminé par le point précédent. Dans un tel processus, il y a une forte corrélation entre des observations rapprochées. Cette corrélation entre les différentes mesures complique l'estimation de la variance d'une observable. Afin de se ramener à des observables indépendantes, on regroupe les N observations en sous-groupes de M observations (N étant un multiple de M). On peut alors définir de nouvelles variables:

$$\tilde{O}_l = \frac{\sum_{j=1+(l-1)M}^{lM} O_j p_j}{\sum_{j=1+(l-1)M}^{lM} p_j}, \quad l \in [1, N/M]$$

Si M est suffisamment grand par rapport à la longueur des corrélations entre les mesures, on peut alors supposer que les N/M observations de la variable \tilde{O} sont indépendantes les unes des autres. Dans ces conditions, nous pouvons utiliser les estimateurs suivants pour la moyenne de l'observable O et pour son incertitude:

$$\mu = \frac{\sum_{l=1}^{N/M} \tilde{O}_l \tilde{p}_l}{\sum_{l=1}^{N/M} \tilde{p}_l} = \frac{\sum_{i=1}^N O_i p_i}{\sum_{i=1}^N p_i}$$

$$\delta\mu^2 = \frac{1}{N/M-1} \left(\frac{\sum_{l=1}^{N/M} \tilde{O}_l^2 \tilde{p}_l}{\sum_{l=1}^{N/M} \tilde{p}_l} - \mu^2 \right)$$

où, on a introduit une nouvelle densité de probabilité

$$\tilde{p}_l = \sum_{j=1+(l-1)M}^{lM} p_j, \quad l \in [1, N/M]$$

Typiquement, les corrélations entre les mesures couvrent 50 mesures pour une température de $T = 1/5$ (moins étendues à plus haute température). C'est

pourquoi nous avons regroupé les mesures en blocs de 125 à 350 mesures. Il est à noter que l'évaluation de la probabilité p_i (ou de $\bar{p}_{i,j}$) n'est pas faite de façon explicite. Celle-ci est partiellement compensée par l'utilisation d'un échantillonnage biaisée (voir [106]).

En terminant, mentionnons qu'il existe un certain nombre de conditions où il est difficile de faire des échantillonnages efficaces et donc où la convergence vers la moyenne statistique est lente. Une première de ces conditions est liée à ce que l'on appelle le problème de signe [107]. Ce problème est observé parfois lorsque la convergence de l'évaluation de la fonction de partition est lente et que celle-ci prend une valeur presque nulle. Cependant, avec la variable aléatoire que nous utilisons, ce problème ne sera pas présent dans le modèle de Hubbard attractif. Un autre problème important est le problème du collement. Dans le modèle de Hubbard on l'observe à basse température et pour de forts couplages. Il résulte de l'incapacité à bien explorer l'espace des phases, la variable aléatoire prenant des valeurs toutes situées dans une même région. Pour surmonter ce problème, nous faisons plusieurs simulations avec des conditions initiales différentes ce qui devrait permettre, pour un nombre de simulations suffisamment élevé, d'explorer une bonne partie de l'espace des phases.

3.2 Validation des approximations de la méthode analytique

Maintenant que nous avons décrit brièvement la technique Monte Carlo et ses sources d'erreurs ou d'incertitude, nous pouvons comparer les résultats obtenus lorsque appliquée au modèle de Hubbard avec les résultats de l'approche à N-corps développée au chapitre 2. Dans le reste de ce chapitre nous référerons aux résultats Monte Carlo quantique par l'abréviation MCQ et à l'approche analytique du chapitre 2 par l'abréviation TPSC ("Two-particle Self-consistent").

Dans un premier temps, nous allons vérifier la validité des approximations faites. La première approximation à vérifier est l'approximation du vertex irréductible. Est-il approprié de le supposer constant? Pour le vérifier regardons la

fonction de corrélation obtenue par simulation Monte Carlo et comparons-la à une approximation de type RPA avec une interaction renormalisée. Nous présentons à la figure 5 la susceptibilité à fréquence nulle en fonction du vecteur d'onde. Les données proviennent d'un cas avec interaction intermédiaire $U = -4$, à demi-remplissage $n = 1$ et l'inverse de la température $\beta = 4$. Le vertex renormalisé, Γ , a été ajusté de façon à ce que la valeur à $\mathbf{q} = (0, 0)$ obtenue de la forme RPA, représentée par une croix sur la figure, concorde avec celle mesurée par Monte Carlo, représentée par un carré. On voit que cette valeur du vertex permet de bien retrouver la susceptibilité près de $\mathbf{q} = (\pi, \pi) = (4, 4)$. Cependant, pour les points au voisinage de $(0, 0)$, les données Monte Carlo seraient plus approchées avec un vertex plus élevé en valeur absolue. On en déduit qu'un vertex avec une dépendance vectorielle telle que sa valeur est plus petite près de $\mathbf{q} = (0, 0)$ qu'ailleurs pourrait donner une meilleure estimation de la susceptibilité de paires.

À la figure 6, on présente la dépendance en fréquences de Matsubara de la susceptibilité de paires uniforme, $\mathbf{q} = (0, 0)$ dans les mêmes conditions. Les données Monte Carlo ont été obtenues par une transformation de Fourier des résultats obtenus en temps imaginaire. Il faut noter que les barres d'incertitude sur ces données sont approximatives car nous n'avons pas mesuré la fonction de covariance de la susceptibilité en temps imaginaire. On remarque que la valeur du vertex ajustée par le résultat MCQ à fréquence nulle est trop petite pour les fréquences voisines mais a peu d'effet à haute fréquence. Il est à noter que l'écart observé est relativement insignifiant par rapport à la valeur à fréquence nulle qui n'a pas été placée sur la figure car elle est environ 20 fois plus importante que la fréquence voisine. Le fait que la susceptibilité à fréquence nulle soit beaucoup plus importante qu'aux autres fréquences de Matsubara est dû au fait que le système est dans un régime classique renormalisé comme nous le verrons à la section 3.4.

On déduit de nos résultats qu'une approximation de type RPA avec un vertex constant n'est pas si mauvaise. Il est alors intéressant de comparer la valeur du vertex ajustée par valeur de la susceptibilité uniforme et statique mesurée par MCQ et celle obtenue par notre approche. Dans le tableau 1, on

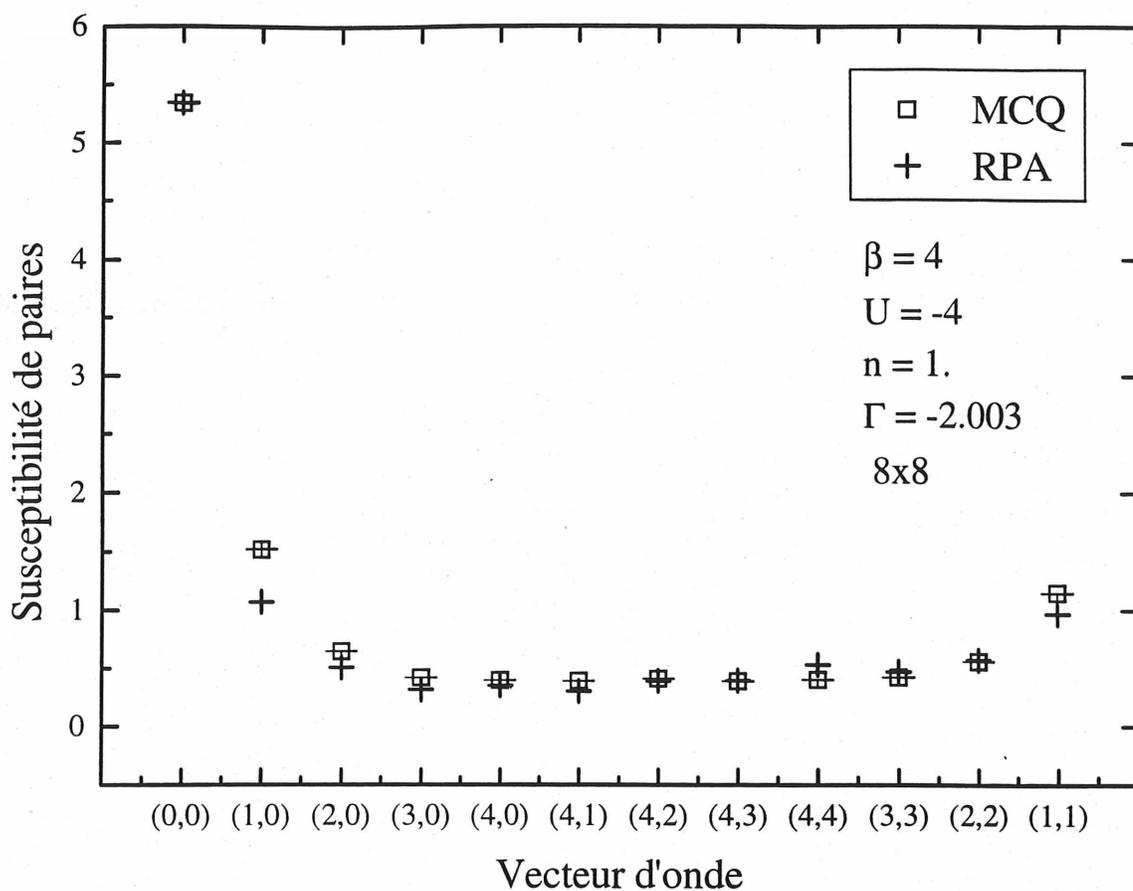


Figure 5: Susceptibilité de paires en fonction du vecteur d'onde. Les carrés représentent les résultats MCQ tandis que les croix représentent les résultats d'une approximation RPA où la valeur de Γ est fixée par la valeur à $\mathbf{q} = (0,0)$. Les vecteurs d'onde sont numérotés selon les points du réseau. Ainsi $(0,4) = (0,\pi)$

présente les résultats pour un réseau 8×8 à demi-remplissage avec interaction intermédiaire pour trois températures différentes.

L'accord est assez bon. Cependant, on doit faire remarquer que dans la forme RPA, lorsque la valeur du vertex devient telle que le dénominateur est petit à faible fréquence, une petite variation sur la valeur du vertex peut avoir un effet important sur la susceptibilité de paires. Il est donc intéressant de

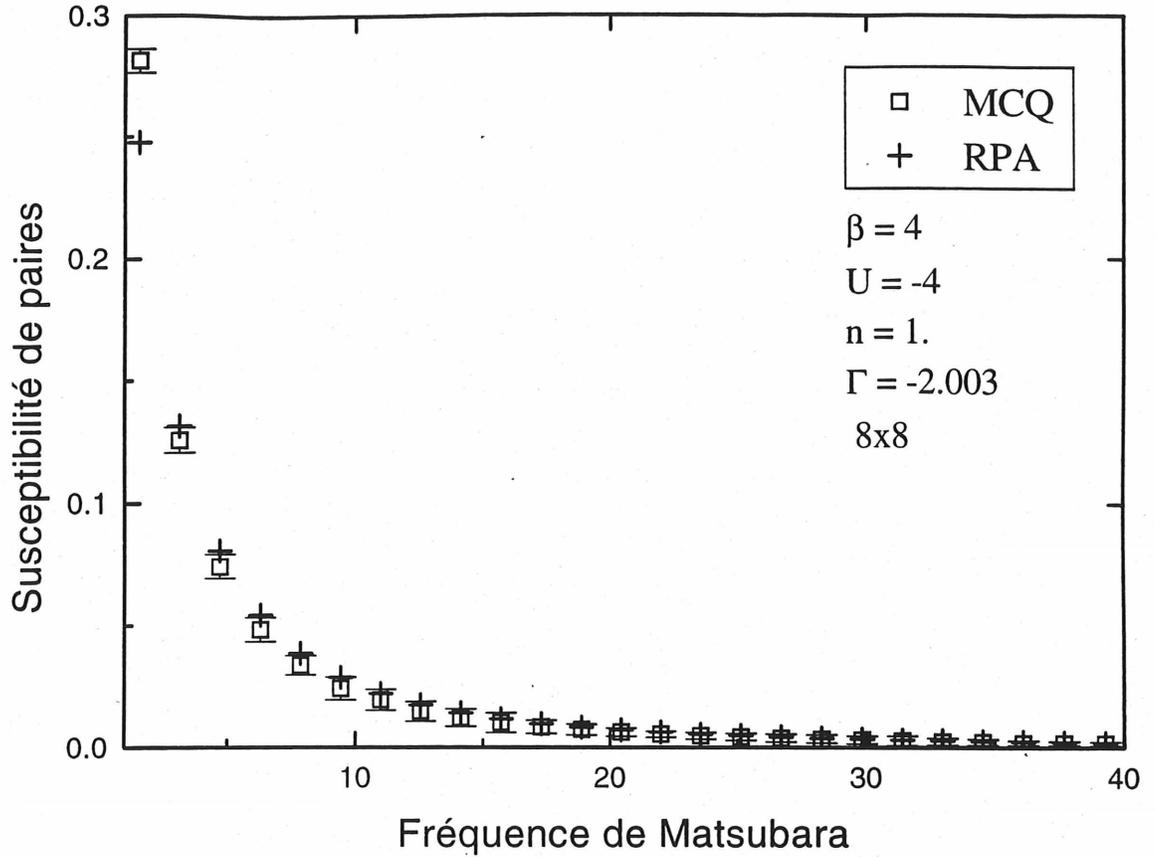


Figure 6: Susceptibilité de paires en fonction de la fréquence de Matsubara. Les carrés représentent les résultats MCQ tandis que les croix représentent les résultats d'une approximation RPA où la valeur de Γ est fixée par la valeur à $q_n = 0$. Les chiffres sur l'abscisse correspondent à la valeur de n dans la fréquence de Matsubara $q_n = 2\pi nT$.

comparer d'autres données telle la valeur moyenne de double occupation. Étant donné que l'évaluation de celle-ci est beaucoup plus rapide que celle de la susceptibilité de paires, nous présentons au tableau 2 la valeur mesurée pour une plus grande diversité de conditions.

À première vue, il semble y avoir un assez bon accord entre ces valeurs. Pour les cas à plus faible remplissage, on peut dénoter que l'accord n'est pas aussi bon à basse température. En terminant, on peut remarquer que les données

Tableau 1: Comparaison de la valeur du vertex choisie afin que la susceptibilité de paires d'une approximation du type RPA concorde avec les résultats Monte Carlo (MCQ) avec celle obtenue par l'approximation proposée (TPSC) pour un réseau de taille 8×8 à demi-remplissage, $n = 1$ et $U = -4$.

β	MCQ	TPSC
3	-2.084	-2.1183
4	-1.940	-1.9977
5	-1.784	-1.8189

Tableau 2: Comparaison des valeurs moyennes de double occupation prédites par l'approximation proposée (TPSC) et celles mesurées par Monte Carlo (MCQ) pour des réseaux 8×8 . Les chiffres entre parenthèses servent à indiquer l'incertitude sur le dernier chiffre significatif.

U	n	β	MCQ	TPSC
-4	1.	2	0.3675(2)	0.364
-4	1.	3	0.3671(2)	0.370
-4	1.	4	0.3689(2)	0.377
-4	1.	5	0.380(5)	0.386
-4	0.8	4	0.2671(1)	0.273
-4	0.8	6	0.2703(1)	0.288
-4	0.55	4	0.1561(1)	0.157
-4	0.55	6	0.1590(1)	0.169
-6	1.	3	0.4227(5)	0.4038
-6	1.	4	0.4258(8)	0.4140
-6	1.	5	0.4267(4)	0.4233

MCQ présentées au tableau 2 sont très précises, en fait, l'erreur statistique est inférieure à l'erreur systématique qui doit être de l'ordre de 1% (car $\Delta\tau = 0.1$).

3.3 Propriétés à une particule

3.3.1 Poids de quasiparticules

Pour l'étude des propriétés à une particule, une observation directe des données MCQ nous montre que notre système n'a pas le comportement habituel des liquides de Fermi. Cette observation découle de la mesure du poids de quasiparticule tel qu'introduit par Vilk et Tremblay [114]. Généralement, lorsqu'on parle du poids de quasiparticule on parle du saut observé à température nulle dans la fonction de distribution au niveau de Fermi. Luttinger a proposé une première généralisation à température finie qui consiste en le résidu du pôle de la fonction de Green au niveau de Fermi. Cette quantité étant difficile à extraire des simulations MCQ, Vilk et Tremblay ont proposé de prendre une mesure du poids spectral à basse fréquence donnée par:

$$\bar{z}(\mathbf{k}) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{\cosh(\beta\omega/2)} = -2G(\mathbf{k}, \tau = \beta/2) \quad (3.2)$$

La dernière égalité se démontre par la représentation spectrale de la fonction de Green en temps imaginaire (3.3). On peut montrer que pour un liquide de Fermi, on retrouve à température nulle la définition usuelle du poids de quasiparticules.

On a représenté à la figure (7) le poids spectral à basse énergie, \bar{z} , mesuré par MCQ en fonction de la température. On a utilisé les conditions $U = -4$, $n = 0.95$ et $\Delta\tau = 1/10$. Il est possible de vérifier que le résultat est sensiblement identique à demi-remplissage. Afin de bien montrer l'effet de taille nous avons présenté à basse température les résultats obtenus pour des systèmes de différentes tailles (voir les indications dans la légende). Dans la partie du haut de la même figure nous avons présenté le facteur de structure de paires au vecteur d'onde $\mathbf{q} = (0, 0)$. Celui-ci a également été obtenu par simulation MCQ. Pour chaque point, nous avons fait entre 5000 et 20000 mesures (plus de mesures à plus basse température et pour les plus petits systèmes).

Pour un liquide de Fermi, on devrait observer une augmentation du poids spectral au niveau de Fermi, $z(\mathbf{k}_F)$, avec l'abaissement de la température indiquant que le poids spectral est piqué près des fréquences nulles à basse température. Cependant, les données présentées à la figure 7 montrent que le poids spectral diminue lorsque l'on abaisse la température démontrant que notre système n'est pas du type liquide de Fermi. On observe que l'abaissement du poids spectral s'accompagne d'une augmentation des corrélations de paires. Il est donc normal de penser que ce sont les fluctuations de paires qui sont responsables de la disparition du liquide de Fermi et que s'il y a formation d'un pseudogap dans le système celui-ci correspond à un précurseur de l'état supraconducteur présent à température nulle.

3.3.2 Spectre à une particule

L'abaissement de poids spectral à basse fréquence accompagnant une diminution de température étant révélateur d'un comportement différent des liquides de Fermi, n'est cependant pas suffisant pour démontrer la présence d'un pseudogap. Pour le démontrer il faut obtenir le poids spectral. Celui-ci s'obtient par prolongement analytique de la fonction de Green en temps imaginaire. Une des techniques les plus efficaces pour le prolongement analytique des données MCQ est la méthode de maximisation d'entropie (MME) décrite en annexe D. Celle-ci se fait par l'utilisation de la représentation spectrale de la fonction de Green en temps imaginaire:

$$G(\mathbf{k}, \tau) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega) \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \quad (3.3)$$

Nous présentons aux figures 8 et 9 le poids spectral obtenu par le prolongement des données MCQ (partie gauche de chaque figure) et par prolongement des données obtenues par notre approche analytique (partie droite de chaque figure). Les résultats analytiques ont été obtenus par l'utilisation des équations de $G^{(2)}$ et de $\Sigma^{(2)}$, équation (2.38) et (2.37). Pour ces résultats nous avons appliqué la même technique de prolongement analytique que pour les

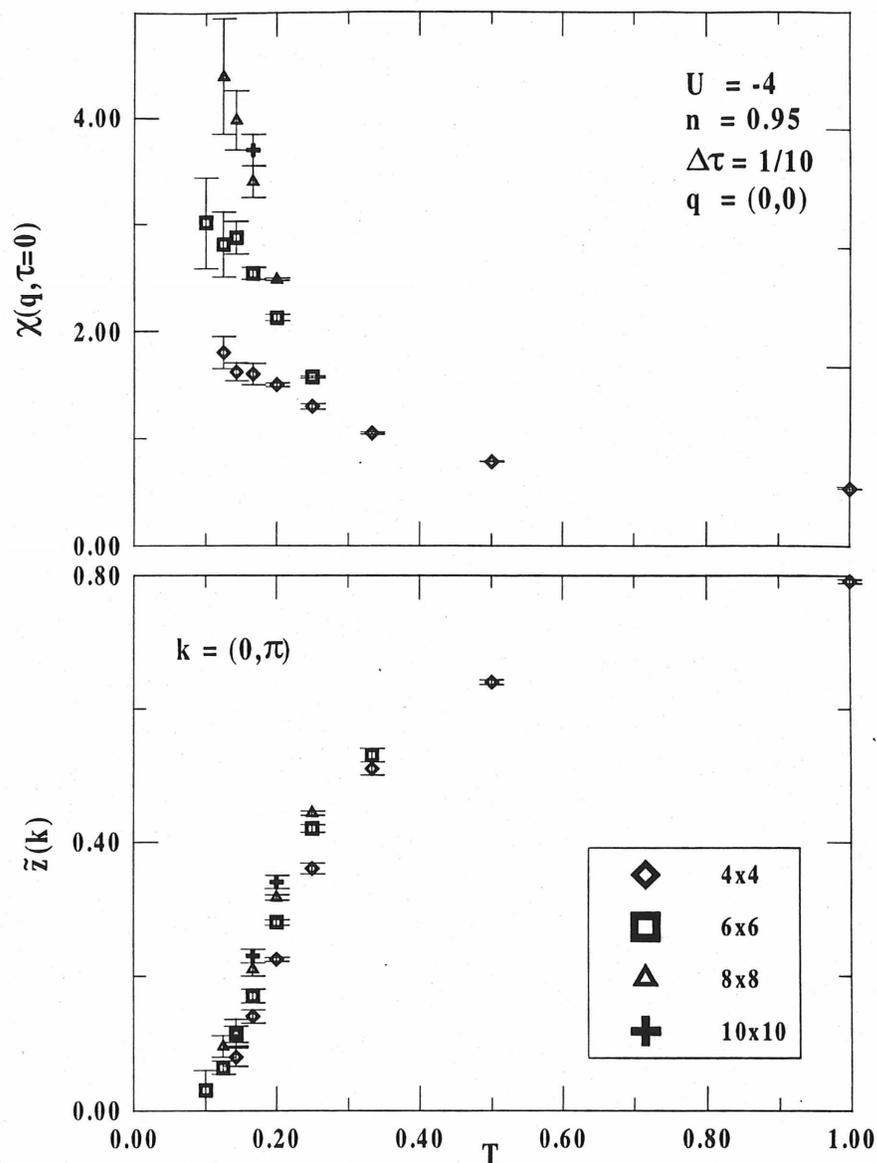


Figure 7: La partie du bas présente le poids de quasiparticules tel que donné par la formule (3.2) et la partie du haut le facteur de structure de paires. Ces deux quantités sont présentées en fonction de la température et ont été mesurées par simulation MCQ. Le poids de quasiparticule est donné au vecteur d'onde $k = (0, \pi)$ et le facteur de structure au vecteur $q = (0, 0)$. Nous présentons les résultats pour différentes tailles de réseau avec interaction $U = -4$ et près du demi-remplissage, $n = 0.95$.

données MCQ. De plus, étant donné que cette technique est sensible à la précision des données nous avons ajouté un bruit gaussien dans nos données analytiques permettant ainsi d'ajuster leur précision à celle des simulations MCQ. Il est à noter que l'ajout de ce bruit diminue le nombre de détails que l'on peut observer dans le spectre et qu'un bruit trop important pourrait éventuellement camoufler l'existence d'un pseudogap. C'est pourquoi nous avons fait des simulations MCQ très précises avec de 125 000 à 160 000 mesures pour chaque vecteur d'onde et chaque température. Pour chaque poids spectral présenté nous avons indiqué le vecteur d'onde correspondant du côté gauche du graphique.

On observe qu'à la température la plus élevée aucun pseudogap n'est observé et que la relation de dispersion n'est que légèrement modifiée par rapport à celle des électrons libres. Les différences deviennent plus importantes au fur et à mesure que l'on s'éloigne du niveau de Fermi. Lorsqu'on abaisse la température un pseudogap apparaît au niveau de Fermi. Ce pseudogap correspond à un minimum local à basse énergie tel qu'on observe au centre de la figure 9. Le pseudogap est plus important près du vecteur d'onde $(0, \pi)$ que dans la région du vecteur $(\pi/2, \pi/2)$. Cette caractéristique n'est pas liée à la symétrie du gap qui est bien de type "s-wave" dans le modèle de Hubbard attractif mais est due à la variation de la vitesse de Fermi. Comme on l'expliquera à la section 3.6.2 il est plus facile de créer un pseudogap dans une région de la surface de Fermi caractérisée par une plus petite vitesse de Fermi.

Il faut remarquer que la discrétisation du temps imaginaire limite notre capacité de prolonger le poids spectral à haute fréquence. Pour s'en convaincre, il suffit d'observer la forme du noyau dans la relation (3.3). De par sa forme, on conclut que très peu de points en temps imaginaire nous permettent de déduire le poids spectral à haute énergie, d'où la difficulté.

On peut remarquer que l'abaissement du poids de quasiparticules précède l'ouverture du pseudogap. Ce résultat nous indique qu'avant l'apparition du pseudogap, le pic dans le poids spectral au niveau de Fermi (voir par exemple $\beta = 2$ et $k = (0, \pi)$) s'élargit avec l'abaissement de température. Ce phénomène

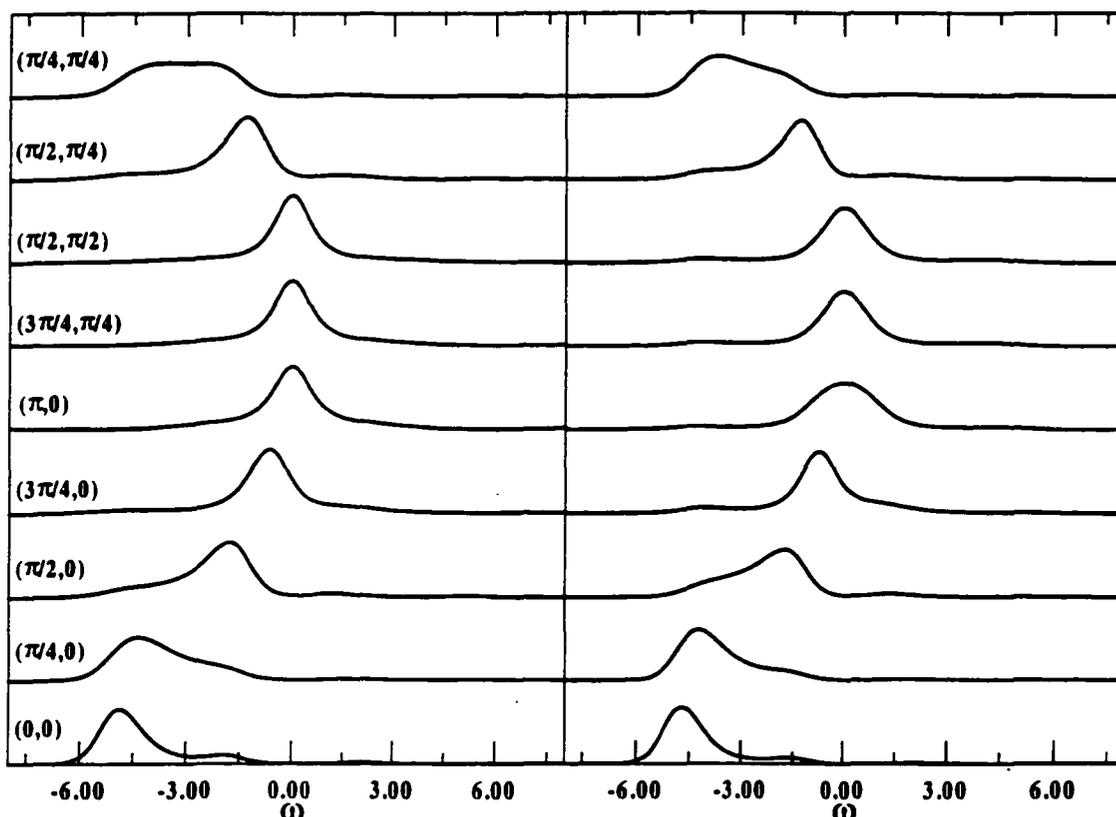


Figure 8: Poids spectral obtenu par MME pour différents vecteurs d'onde d'un réseau 8×8 en fonction de la fréquence. Conditions usuelles $U = -4$, $n = 1$ à une température $T = 1/2$. La partie de gauche présente les données MCQ obtenue avec une discrétisation $\Delta\tau = 1/10$. La partie de droite provient du résultat de l'approche analytique (TPSC). On a inclue dans ce dernier un bruit gaussien du même ordre de grandeur que celui des données MCQ.

semble être plus prononcé près du niveau de Fermi. Ainsi, on pourrait voir l'apparition d'un pseudogap dans la densité totale d'états avant d'en voir dans le poids spectral. À la figure 10, on présente la densité d'états obtenus par maximisation d'entropie. La partie de gauche de la figure nous montre le résultat obtenu des données MCQ et la partie de droite celui de notre approche analytique. La densité d'états, $D(\omega)$ étant simplement la somme sur les vecteurs d'onde du poids spectral, on peut l'obtenir par l'application de la méthode de

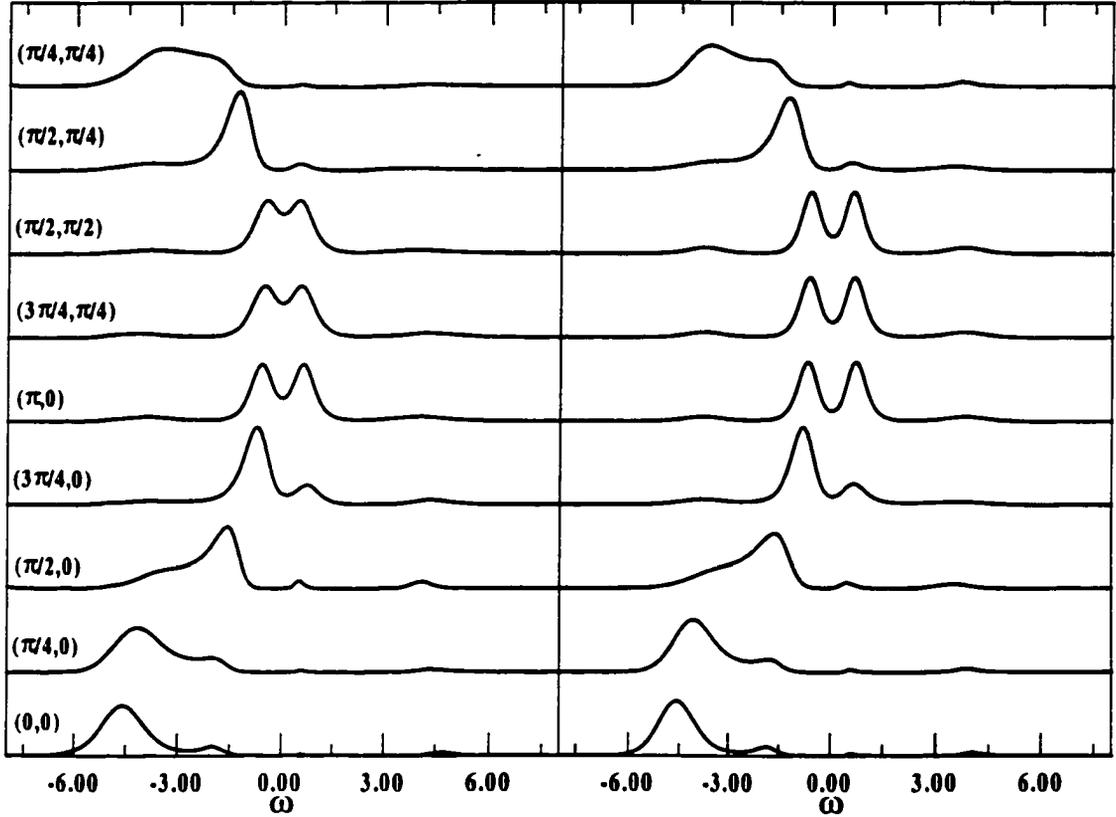


Figure 9: Poids spectral obtenu par MME pour différents vecteurs d'onde d'un réseau 8×8 à $T = 1/4$ en fonction de la fréquence. Les résultats présentés ont été mesurés à interaction $U = -4$ pour un système demi-rempli $n = 1$. Comme la figure précédente, la partie de gauche montre les résultats provenant des données MCQ tandis que celle de droite provient des résultats de l'approche analytique.

maximisation d'entropie à la formule:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} D(\omega) \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}}$$

où N est le nombre de vecteur d'onde du réseau. Pour l'estimation de l'incertitude sur les points en temps imaginaire, nous avons supposé que la matrice de covariance était diagonale dans l'espace de Brillouin.

On voit qu'au fur et à mesure que l'on abaisse la température (courbe du bas à celle du haut) un pseudogap apparaît dans la densité d'états à basse

fréquence. Celui-ci apparaît à des températures où le poids spectral ne montre pas de signe de la présence d'un pseudogap. Il est à noter que la dépendance en taille de cet effet n'est pas complètement vérifiée est qu'une étude plus détaillée devrait être publiée sous peu [60]. Différentes raisons peuvent expliquer le fait que le pseudogap est légèrement surestimé par la méthode analytique. Premièrement, il n'est pas toujours facile d'ajuster le bruit des données analytiques à celui des données MCQ particulièrement pour la densité d'états où on doit sommer la fonction de Green sur les différents vecteurs d'onde avant le prolongement analytique. De plus, une comparaison des fonctions de Green obtenues des deux approches en temps imaginaire semble montrer que notre approche analytique surestime l'importance des corrélations (voir figure 12).

3.3.3 Étude en taille

Avant de terminer cette section, il nous faut parler de l'effet de différents facteurs sur la présence ou l'absence d'un pseudogap dans le poids spectral. Il y a un facteur que nous avons déjà mentionné soit l'effet de la précision de nos mesures. On montre à la figure 11 l'effet de cette précision. Pour bien démontrer le fait qu'un manque de précision atténue les détails dans le poids spectral, nous avons considéré la fonction de Green au vecteur d'onde $(0, \pi)$ tel qu'obtenue par MCQ à température $T = 1/4$. Nous avons ajouté un bruit gaussien plus ou moins important à nos données et avons fait le prolongement analytique par MME. Dans la partie de gauche de la figure nous montrons la fonction de Green utilisée pour chacun des prolongement analytique, le bruit étant de plus en plus important du bas au haut de la figure. La première courbe correspond aux données obtenus par nos simulations sans l'ajout de bruit. La partie droite montre les poids spectraux correspondant. On voit que plus le bruit est important, moins le pseudogap est prononcé. Ce résultat explique pourquoi lors de comparaison des résultats MCQ et ceux de la méthode analytique, il est important d'ajouter du bruit dans les données de la méthode analytique. De plus, ce résultat renforce notre conclusion selon laquelle il y a bien un pseudogap dans le poids spectral du modèle de Hubbard.

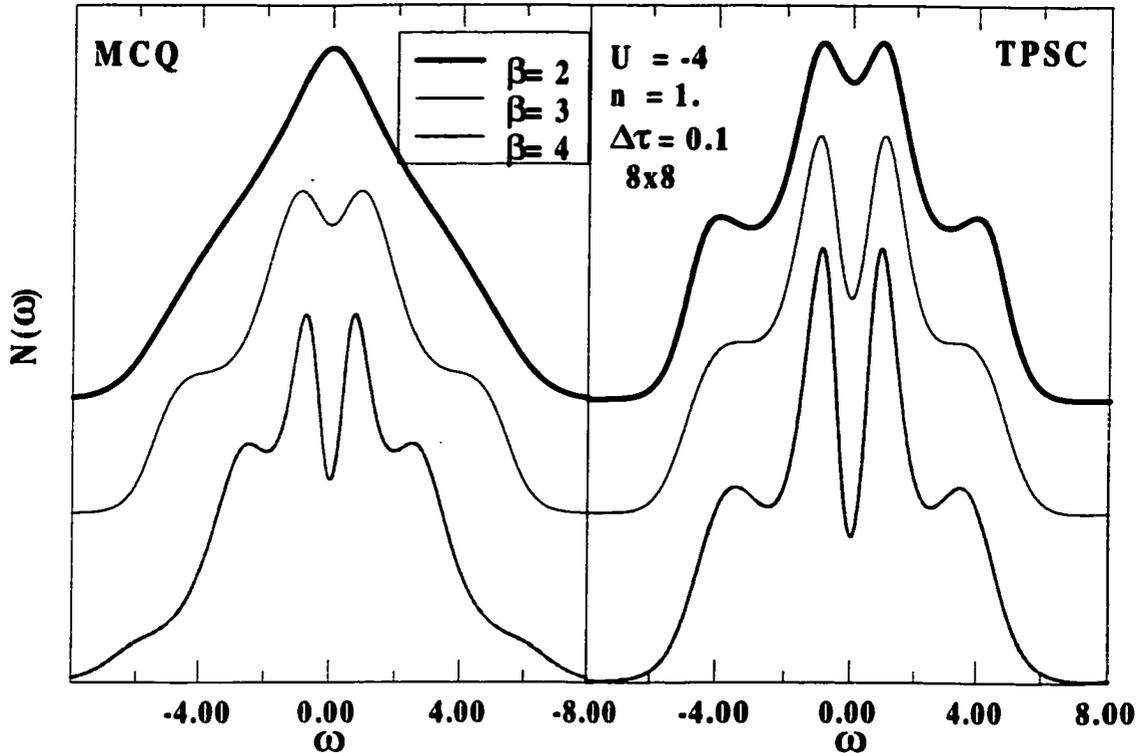


Figure 10: Densité d'états en fonction de la fréquence pour trois températures différentes: $T = 1/2$, $1/3$ et $1/4$. Nous avons utilisé les conditions suivantes: $U = -4$, $n = 1$, $\Delta\tau = 0.1$ pour un réseau 8×8 . La partie de gauche provient du prolongement analytique des données MCQ et la partie de celles de la méthode analytique

Cependant, une étude en taille montre que le pseudogap est moins prononcé lorsque l'on considère un réseau de taille plus importante. Ainsi, il est important de faire une étude en taille afin de prédire s'il existe ou non un pseudogap dans la limite thermodynamique. White et al. [116] ont conclu que l'effet de taille finie serait responsable de la présence du pseudogap et que pour un réseau de taille suffisamment importante le pseudogap disparaîtrait. Cependant, ils ont négligé l'effet de la précision des mesures et les données pour les réseaux de grandes tailles étaient peu précises. Nous présentons ici une étude plus précise de l'évolution du pseudogap avec la taille du réseau.

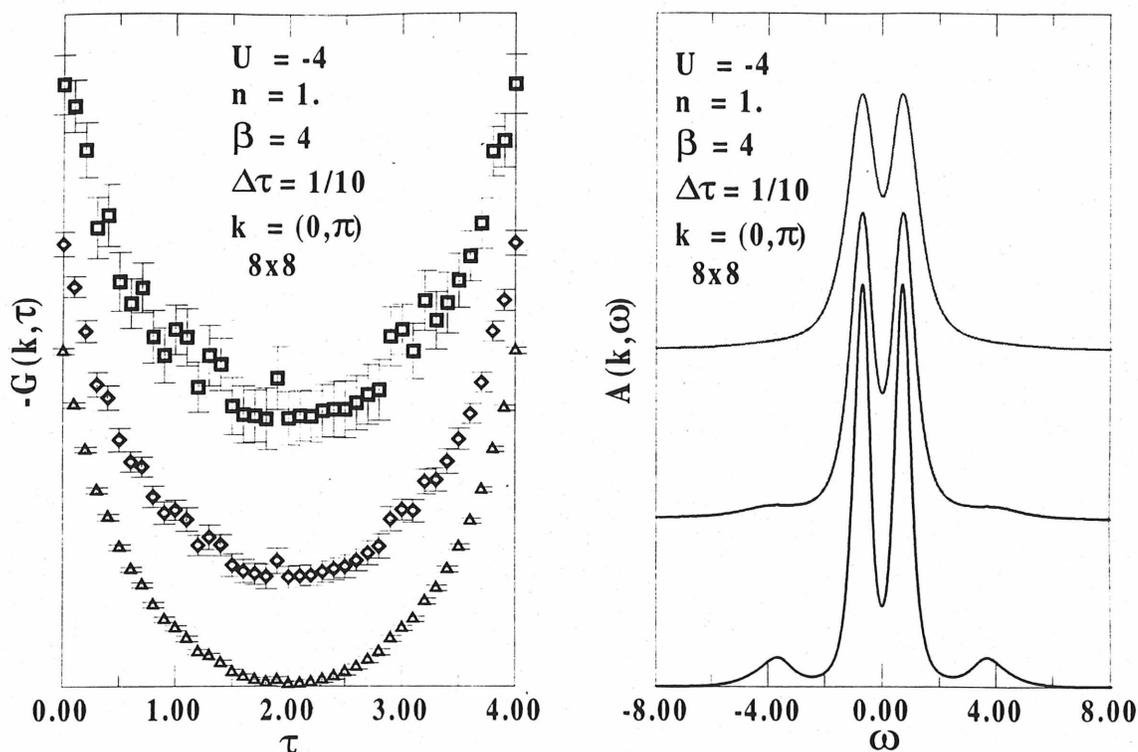


Figure 11: Effet de la précision des données MCQ sur le poids spectral obtenue par la méthode de maximisation d'entropie. Nous considérons la fonction de Green mesurée par MCQ au vecteur $(0, \pi)$ avec les conditions habituelles: $U = -4$, $n = 1$, $\Delta\tau = 0.1$ sur un réseau de taille 8×8 à température $T = 1/4$. La partie de gauche montre la fonction de Green considérée pour le prolongement. La courbe du bas montre les données obtenue et pour les deux autres nous avons ajouté un bruit gaussien (d'amplitude plus élevée pour celle du haut). La partie de droite de la figure nous montre le résultat du prolongement analytique.

À la figure 12, nous présentons la fonction de Green en temps imaginaire à température $T = 1/4$ au vecteur d'onde $\mathbf{k} = (0, \pi)$ pour différentes tailles de réseau. La partie de gauche nous montre les résultats MCQ et la partie de droite le calcul analytique (TPSC). La convergence étant plus rapide pour les plus

grands systèmes¹, le nombre de mesures nécessaires en MCQ dépend de cette taille: 300 000 mesures pour le 6×6 , 150 000 pour le 8×8 et 90 000 pour le 10×10 . Nous voyons que l'accord entre les résultats MCQ et notre approche n'est pas parfait, la fonction de Green du calcul analytique étant généralement plus petite en valeur absolue à $\tau = \beta/2 = 2$ que celle obtenue par MCQ². Cependant, l'évolution en taille semble être sensiblement identique (par exemple, on peut comparer les réseaux de taille 8×8 et 10×10 de part et d'autre).

Afin de s'assurer que l'évolution en taille soit bien évaluée nous avons ajusté le bruit dans les données MCQ et les résultats de la méthode analytique à un ordre de grandeur moyen de l'ordre de $0.002 \simeq 0.5\% - 1\%$ identique pour toutes les tailles de réseau considérées. L'ajout de bruit se fait par l'utilisation d'un générateur de nombre aléatoire pour générer un bruit gaussien. L'ordre de grandeur du bruit est environ trois fois plus important que l'estimation de l'incertitude sur les simulations les moins précises. Nous avons fait ce choix car l'autocorrélation entre les mesures peut induire une sous-estimation des erreurs sur les données MCQ. Pour s'assurer de la précision respective de nos données, nous avons évalué pour chacune le χ^2 entre la fonction de Green correspondant au poids spectral obtenu et la fonction de Green de départ. Le résultat étant du même ordre de grandeur pour chaque taille du réseau nous assure ainsi que le bruit était de la même importance.

Regardons maintenant ce que l'on obtient suite au prolongement analytique. La figure 13 nous montre l'évolution en taille du poids spectral au vecteur d'onde $\mathbf{k} = (0, \pi)$ et à une température $T = 1/4$. Comme à l'habitude, la partie de

¹ La convergence est plus rapide pour les systèmes de plus grandes tailles car pour ces systèmes il y a plus de configurations distinctes dans une plage donnée d'énergie. De plus, pour de plus grands systèmes le problème de collement semble moins important.

² Nous avons montré que l'accord pouvait être amélioré lorsque le calcul est fait dans le canal longitudinal. Ainsi, on sépare le calcul de la self-énergie entre les contributions provenant d'une susceptibilité critique et d'une susceptibilité non-critique. Pour la séparation entre les différentes contributions, la forme symétrisée donne les meilleurs résultats à demi-remplissage [78]

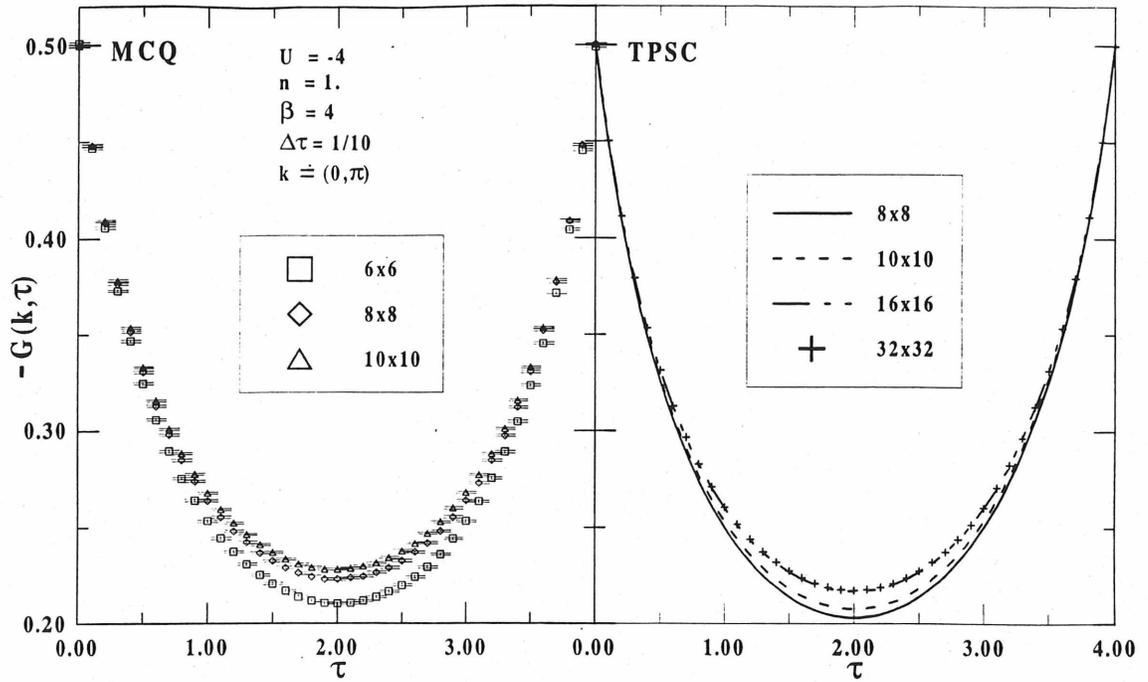


Figure 12: Fonction de Green en temps imaginaire pour des systèmes de différentes tailles. On présente les données pour le cas $U = -4$, $n = 1$, $\mathbf{k} = (0, \pi)$ avec pour le MCQ $\Delta\tau = 1/10$. La partie de gauche montre les données MCQ tandis que la partie de droite a été obtenue suite l'utilisation des séries de Fourier sur l'approche analytique évaluée en fréquence de Matsubara.

gauche montre les résultats MCQ et la partie de droite le traitement analytique. Une première observation est que l'approche analytique surestime l'importance du pseudogap. Cependant, l'évolution avec la taille du réseau semble se faire de façon sensiblement identique dans les deux cas. Ce résultat suggère que le pseudogap n'est pas dû à un effet de taille finie mais serait bien présent dans le poids spectral et ce à des températures bien supérieures à la température critique. De plus, il est possible d'évaluer le poids spectral dans la limite thermodynamique pour notre approche analytique. Tel que publié [78], ce résultat montre qu'il y a bien un pseudogap dans cette limite à une température $T = 1/5$.

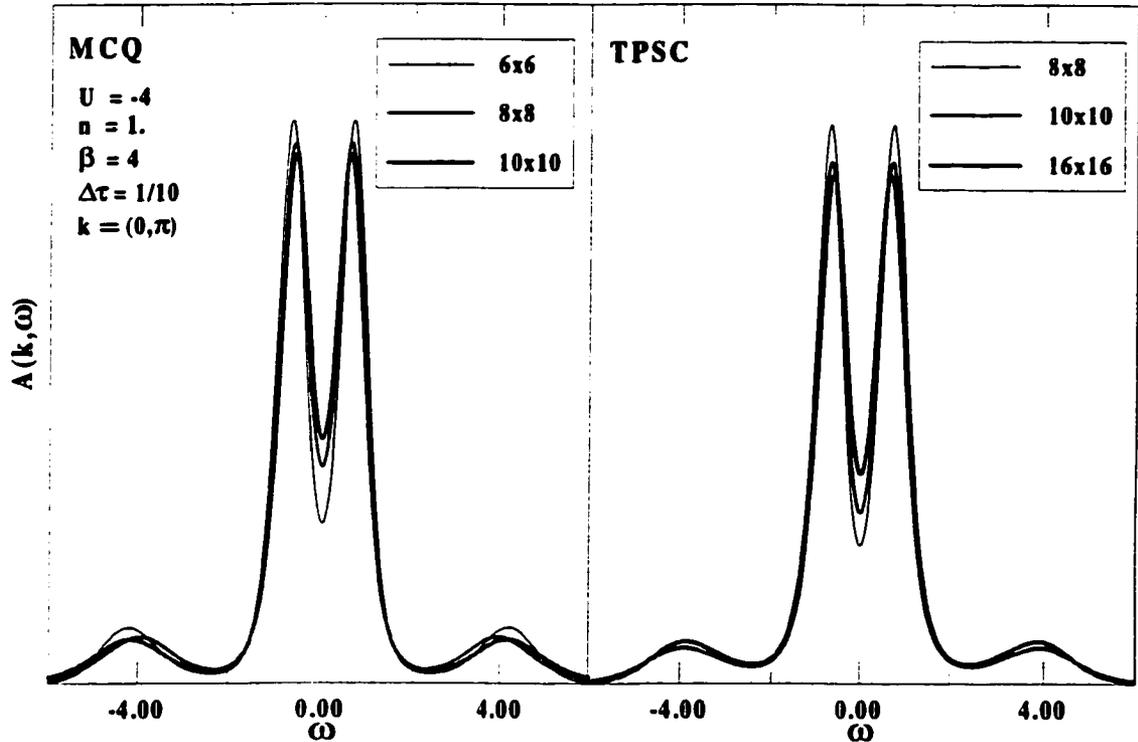


Figure 13: Poids spectral pour des systèmes de différentes tailles et au vecteur d'onde $\mathbf{k} = (0, \pi)$. La partie de gauche de la figure montre les résultats MCQ et la partie de droite les résultats de l'approche analytique (TPSC). Ces résultats viennent du cas $U = -4$, $n = 1$ avec pour les données MCQ $\Delta\tau = 1/10$.

3.4 Régime classique renormalisé

3.4.1 Comportement critique de la susceptibilité de paires

Comme nous avons vu, l'abaissement du poids de quasiparticule est accompagné d'une hausse du facteur de structure de paires. C'est pourquoi nous allons détailler l'étude du comportement de la susceptibilité de paires dans le régime de température où le pseudogap est observé. Une observation directe des résultats Monte Carlo nous indique que la susceptibilité de paires devient très piquée autour de la fréquence de Matsubara $q_n = 0$. Pour mettre cet effet en

évidence nous pouvons observer le rapport

$$T\chi(\mathbf{q}, iq_n = 0)/S_\Delta(\mathbf{q}) \quad (3.4)$$

entre la susceptibilité de paires à $q_n = 0$ et le facteur de structure de paires donné par la relation suivante:

$$S_\Delta(\mathbf{q}) = T \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{q_n} \chi(\mathbf{q}, iq_n) e^{iq_n \eta} \quad (3.5)$$

À la figure 14, nous présentons le résultat observé pour le cas uniforme $\mathbf{q} = 0$. Pour chaque point, nous avons évalué entre 5000 et 30000 mesures par la technique MCQ. Nous présentons le comportement haute température en médaillon. On observe que les effets quantiques deviennent de plus en plus importants au fur et à mesure que l'on abaisse la température. La contribution au facteur de structure provenant de la composante à fréquence nulle diminue ainsi de façon linéaire avec l'abaissement de la température jusqu'à une température où on observe un changement brusque dans ce comportement. Le minimum est observé à $T = 1/2$ soit à une température légèrement supérieure à la température où apparaît le pseudogap dans la densité d'états. À partir de ce minimum, l'importance de la contribution provenant de la susceptibilité à fréquence nulle augmente très rapidement avec l'abaissement de la température. Ce comportement représente un retour vers un régime classique à basse température. À très basse température, on voit l'apparition d'un maximum puis un retour vers un régime quantique. On peut remarquer que la température à laquelle apparaît ce maximum dépend de la taille du système. On argumentera à la section 3.6.3 que cet effet est probablement dû à un effet de taille finie et qu'à très basse température, lorsque la longueur de corrélation est du même ordre de grandeur que la taille du système, les effets quantiques se manifestent à nouveau.

Le fait que la principale contribution au facteur de structure de paires viennent de la susceptibilité à fréquence de Matsubara nulle pour $T < 1/2$ est une caractéristique qui montre que, pour ce qui est des propriétés à deux

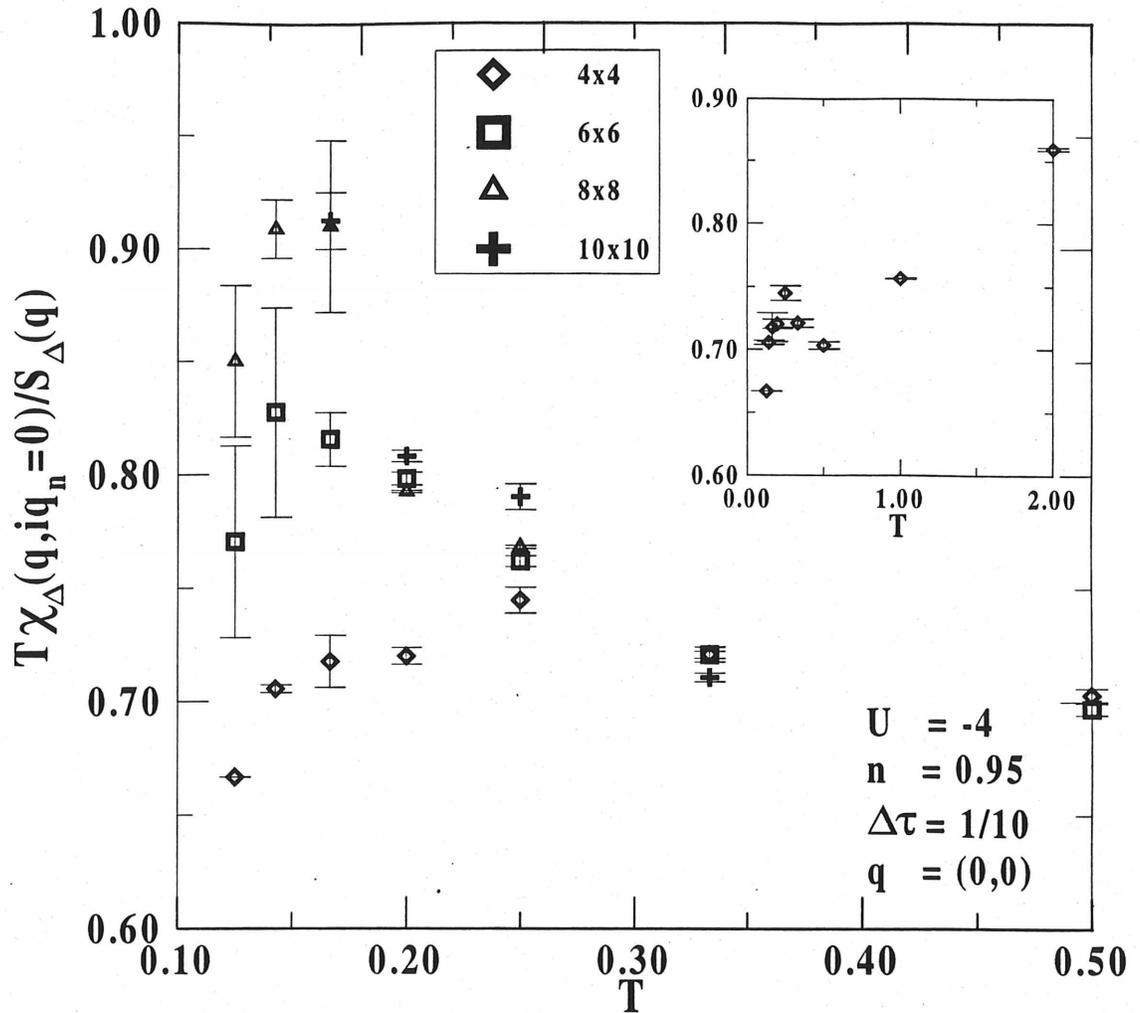


Figure 14: Contribution de la susceptibilité de paires uniforme à fréquence nulle au facteur de structure de paires en fonction de la température. La valeur 1 correspond au cas où le facteur de structure serait totalement déterminé par cette fréquence. Les points proviennent des mesures MCQ pour le cas $U = -4$, $n = 0.95$ et sont présentés pour différentes tailles de réseaux.

particules, le système se comporte comme s'il était classique³. En fait, nous

³ On peut le comprendre par le fait que si le système est classique on peut supposer que l'opérateur Δ commute avec l'hamiltonien. Dans ces conditions, cet opérateur est

qualifierons de régime classique renormalisé le régime basse température où le rapport $T\chi(\vec{q} = 0)/S_{\Delta}(\mathbf{q} = 0)$ augmente en diminuant la température.

On observe un comportement critique classique lorsque l'écart entre les niveaux d'énergie est petit par rapport à la température. Ainsi, le système se comporte comme s'il y avait un continuum d'états disponibles, comme s'il était classique [21]. On précise que le régime est renormalisé pour indiquer que les paramètres d'écrivant la physique du système sont différents de ceux apparaissant dans le modèle et donc de ceux que l'on observe à haute température.

3.4.2 Fréquences caractéristiques

Il y a une deuxième quantité importante qui peut nous révéler que le régime où on observe le pseudogap est un régime classique renormalisé, c'est la fréquence caractéristique des fluctuations de paires. Celle-ci étant mesurée en fréquence réelle, on doit encore une fois faire appel au prolongement analytique pour mesurer cette quantité. On procède de la même façon que pour le calcul du poids spectral à une particule: on utilise une méthode de maximisation d'entropie pour déduire la partie imaginaire de la susceptibilité en fréquence réelle de la susceptibilité en temps imaginaire mesurée par MCQ. Ces deux quantités sont reliées par une relation spectrale⁴:

$$\chi(\mathbf{q}, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''(\mathbf{q}, \omega) \frac{e^{-\tau\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}}$$

Contrairement au cas de la fonction de Green à une particule, le noyau apparaissant ici a un pôle sur le domaine d'intégration. L'intégrale n'est pas pour autant indéfinie, car on peut montrer que la partie imaginaire de la susceptibilité s'annule à ce pôle qui est du premier ordre. Cependant, la présence de ce pôle indépendant du temps imaginaire $\Delta(\tau) = \Delta$ et la susceptibilité n'est non nulle que pour la fréquence de Matsubara nulle, $\chi(\mathbf{q}, iq_n) \propto \delta_{n,0}$

⁴ En utilisant cette relation, on peut montrer que si la fréquence caractéristique est petite par rapport à la température alors $\chi(\tau)$ est à peu près constante et le rapport (3.4) vaut près de 1.

rend le calcul numérique difficile. On surmonte facilement ce problème en utilisant le poids spectral introduit à la section 2.4.2:

$$A_{\chi}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega)}{\tanh(\beta\omega/2)} \quad (3.6)$$

Ce poids spectral peut être déduit de la susceptibilité en temps imaginaire par l'utilisation de la maximisation d'entropie et du noyau approprié. On peut par la suite aisément inverser la relation (3.6) pour déduire la partie imaginaire de la susceptibilité. Tout comme pour le poids spectral à une particule, la discrétisation du temps imaginaire limite la capacité de déduire le poids spectral qu'au domaine de fréquence autour de la fréquence nulle. Mais comme on pourra le voir, tout le poids spectral associé à la susceptibilité de paires est concentré dans ces fréquences.

On a représenté à la figure 15 la partie imaginaire de la susceptibilité divisée par la fréquence tel qu'obtenue par l'application de la MME aux données MCQ. Nous avons utilisé les conditions habituelles: $U = -4$, $n = 1$, $\Delta\tau = 1/10$ avec un réseau de taille 8×8 . Pour chaque température, nos simulations contiennent entre 125 000 et 160 000 mesures afin d'assurer une précision suffisamment élevée pour avoir le plus de détails possibles dans le poids spectral.

On voit qu'au fur et à mesure que l'on abaisse la température la susceptibilité de paires devient de plus en plus piquée autour de la fréquence nulle. Voyons quel effet cela a sur la fréquence caractéristique des fluctuations de paires. La fonction de corrélation de paires est liée à la partie imaginaire de la susceptibilité par la relation:

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega)}{\omega}$$

On voit que pour le cas uniforme, $\mathbf{q} = 0$, $\chi''(0, \omega)/\omega$ a la forme d'une lorentzienne centrée à fréquence nulle, il est donc justifié de prendre comme mesure de la fréquence caractéristique la demi-largeur à mi-hauteur de ce pic. Ce choix nous donne les fréquences présentées au tableau 3.

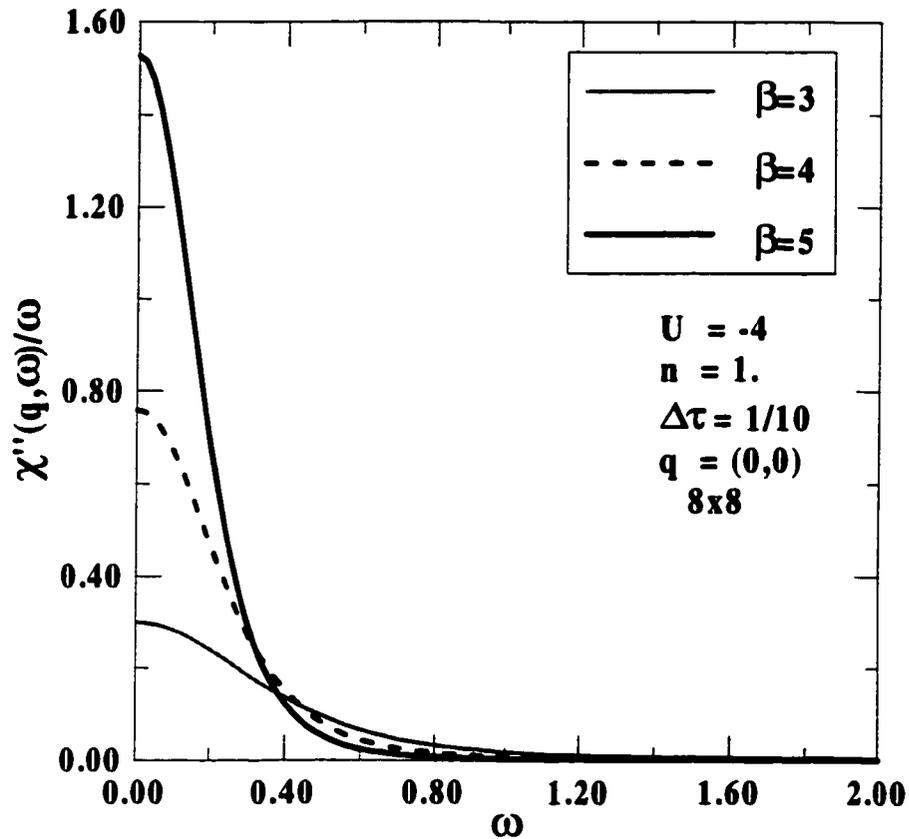


Figure 15: Partie imaginaire de la susceptibilité de paires uniforme divisée par la fréquence et en fonction de la fréquence. Les résultats proviennent du modèle de Hubbard avec $U = -4$, $n = 1$ sur un réseau carré 8×8 avec une discrétisation en temps imaginaire de $\Delta\tau = 1/10$. On présente les résultats aux températures $T = 1/3$, $1/4$ et $1/5$.

On voit qu'à haute température la fréquence caractéristique est supérieure à la température. Avec l'abaissement de la température, la fréquence caractéristique diminue rapidement et devient égale à la température lorsque le pseudogap s'ouvre dans le poids spectral à une particule. À température plus basse, $T = 1/5$, la fréquence devient inférieure à la température. Cependant, on doit noter que nos résultats sont entachés d'une certaine incertitude. Étant donné que la fréquence caractéristique s'obtient par un prolongement analytique, il est difficile d'estimer cette incertitude. On devine que si nos résultats MCQ étaient plus précis, on obtiendrait des pics un peu plus étroit sur la figure 15. On en déduit que nos

Tableau 3: Fréquences caractéristiques des fluctuations de paires du modèle de Hubbard à $U = -4$, $n = 1$ tel que mesuré par MCQ pour un réseau 8×8 avec une discrétisation du temps imaginaire $\Delta\tau = 1/10$.

T	ω_c
1/3	0.37
1/4	0.24
1/5	0.18

valeurs de fréquences caractéristiques sont une limite supérieure. Par ailleurs, le fait que nos données sont un peu plus précises à plus haute température, nous permet de déduire que le fait que ω_c varie plus rapidement que la température, T , est bien observé dans nos simulations.

Vilk et Tremblay [116] ont argumenté que le fait que la fréquence caractéristique devienne inférieure à la température est directement lié à l'apparition du pseudogap. Leur explication s'applique aussi bien pour le modèle de Hubbard attractif. Pour le montrer, nous devons considérer l'expression de la partie imaginaire de la self-énergie au niveau de Fermi en fonction de la susceptibilité de paires. On peut déduire de l'équation (2.37) la self-énergie retardée en faisant le prolongement analytique $ik_n \rightarrow \omega + i\eta$. On obtient la relation suivante:

$$\Sigma(\mathbf{k}_F, \omega + i\eta) = U \frac{n}{2} - UU_{pp} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega'}{\pi} [n(\omega') + f(\varepsilon(-\mathbf{k}_F + \mathbf{q}))] \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega')}{\omega - \omega' + \varepsilon(-\mathbf{k}_F + \mathbf{q}) + i\eta} \quad (3.7)$$

où $\varepsilon(\mathbf{k})$ est la relation de dispersion (dans notre approche analytique $\varepsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu^{(1)} + \Sigma^{(1)}$, voir équation (2.31)), $f(\varepsilon)$ est la fonction de distribution de Fermi-Dirac et $n(\omega)$ est celle de Bose-Einstein. On peut en extraire la partie imaginaire en procédant à l'intégration sur une composante du vecteur d'onde. La limite $\eta \rightarrow 0^+$ fait apparaître une fonction delta à l'intérieure des intégrales pour

la partie imaginaire de la self-énergie. On peut alors intégrer une des composantes du vecteur d'onde. Séparons donc le vecteur d'onde en ses deux composantes: q_{\parallel} et q_{\perp} . Afin de simplifier le calcul lorsque χ'' est piqué près de $\mathbf{q} = 0$, on approxime $\varepsilon(-\mathbf{k}_F + \mathbf{q}) \approx v_F q_{\parallel}$. On obtient alors pour la partie imaginaire de la self-énergie retardée:

$$\Sigma''_R(k_F, \omega) \approx -\frac{UU_{pp}}{2v_F} \int \frac{dq_{\perp}}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{\pi} [n(\omega') + f(\omega' - \omega)] \chi''(q_{\perp}, q_{\parallel}, \omega') \quad (3.8)$$

où $q_{\parallel} \approx (\omega' - \omega)/v_F$. Comme noté par Vilks et Tremblay [116], le comportement de type liquide de Fermi ou non-liquide de Fermi est déterminé par la largeur relative en fréquence de la fonction $g(\omega') = \chi''(\mathbf{q}, \omega')/\omega'$ par rapport à celle de $h(\omega') = n(\omega') + f(\omega' - \omega)$. Si $g(\omega')$ est à peu près constante sur le domaine de fréquence où $h(\omega')$ est non-nulle, alors on obtient un comportement caractéristique des liquides de Fermi:

$$\Sigma''_R(k_F, \omega) \propto \omega^2 + (\pi T)^2 \quad (3.9)$$

Cependant, lorsque la fréquence caractéristique des fluctuations de paires est petite par rapport à la température, on ne peut plus approximer $g(\omega')$ par une constante dans le domaine où $h(\omega')$ est non-nulle. Si la fonction $g(\omega')$ est tellement piquée pour $\omega' < T$ que l'on puisse approximer $h(\omega')$ par son comportement basse fréquence T/ω' , on obtient alors pour le comportement à basse fréquence de la self-énergie:

$$\begin{aligned} \Sigma''_R(k_F, \omega = 0) &\approx -\frac{UU_{pp}}{2v_F} \int \frac{dq_{\perp}}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{T}{\omega'} \chi''(q_{\perp}, q_{\parallel}, \omega') \\ &\approx -\frac{UU_{pp}T}{2v_F} \int \frac{dq_{\perp}}{2\pi} \chi(q_{\perp}, q_{\parallel} = 0, iq_n = 0) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Une contribution importante à l'intégrale sur les vecteurs d'onde vient du voisinage de $q_{\perp} \simeq 0$. Par nos résultats MCQ, figure 15, il semble à première vue que la partie imaginaire de la self à fréquence nulle augmente avec un abaissement de la température. Ce qui démontre que celle-ci ne correspond pas à un comportement du type liquide de Fermi. Cependant, on peut noter qu'il y a un facteur T devant l'intégrale dans l'équation (3.10) et que notre déduction dépendra de la dimension du système (à plus haute dimension les vecteurs d'onde au voisinage de $q_{\perp} = 0$ ont moins d'importance dans le résultat de l'intégral et le comportement de type liquide de Fermi peut être retrouvé).

3.5 Mécanisme pour la formation du pseudogap

3.5.1 Densité de suprafluide

Jusqu'à maintenant, nous avons montré que le spectre à une particule est caractérisé par un pseudogap à une température supérieure à la température critique, et que ce régime où apparaît le pseudogap est de type classique renormalisé. Cependant, on peut toujours se questionner sur le mécanisme qui serait responsable de la formation du pseudogap: Est-ce dû aux fluctuations de paires? A-t-on affaire à des paires locales préformées?

La densité de suprafluide est une quantité qui est nulle dans l'état normal et ne prend une valeur finie que pour des températures inférieures ou égales à la température critique (c'est également le cas pour une transition de type BKT). Pour ce qui est de la limite fort couplage, la densité de suprafluide prend une valeur finie que sous la température critique même si les électrons forment des paires à haute température (nous les appellerons paires locales préformées). À la température critique BKT, ces paires condensent et on observe alors une valeur finie de la densité de suprafluide.

Pour un réseau de taille finie, on ne s'attend pas à avoir un saut très prononcé dans la densité de suprafluide à la température critique. Ce saut devrait plutôt être étalé sur une certaine plage de température. Ainsi, selon la définition de la température critique, la densité de suprafluide pourrait apparaître à une température légèrement supérieure à cette température critique. C'est pourquoi nous étudierons la densité de suprafluide afin de bien montrer que la température où apparaît le pseudogap est bien supérieure à la température critique renforçant ainsi notre argumentation présentée par l'étude des effets de taille.

Scalapino et al. [98] ont suggéré une méthode permettant d'évaluer la densité de suprafluide par simulation MCQ. Cette méthode fait appel à la limite grande longueur d'onde et basse fréquence de la fonction de corrélation du

courant. Utilisant la théorie de réponse linéaire, ils ont montré que la densité de suprafluide sera donnée par:

$$\frac{n_s}{m^*} = \Lambda_{xx}(q_x \rightarrow 0, q_y = 0, iq_n = 0) - \Lambda_{xx}(q_x = 0, q_y \rightarrow 0, iq_n = 0)$$

où m^* est la masse effective et Λ_{xx} est la fonction de corrélation courant-courant dans la direction x :

$$\Lambda_{xx}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{N} \sum_{l,n} \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau - i\mathbf{q}(l-n)} \langle j_x(l, \tau) j_x(n, 0) \rangle$$

avec le courant défini sans le facteur de charge habituel:

$$j_x(l, \tau) = \sum_{\sigma} \left(\psi_{\sigma}^{\dagger}(l + \hat{x}, \tau) \psi_{\sigma}(l, \tau) - \psi_{\sigma}^{\dagger}(l, \tau) \psi_{\sigma}(l + \hat{x}, \tau) \right)$$

À la figure 16, on présente la fonction de corrélation courant-courant telle que mesurée par MCQ pour différents vecteurs d'onde à fréquence nulle. Cette quantité étant dynamique, nous avons fait 112 000 mesures pour atteindre une précision suffisante: Étant donné le peu de points disponibles, il est difficile d'estimer les valeurs limites d'intérêt. Une simple extrapolation linéaire semble montrer que la densité de suprafluide est très petite. Étant donné que l'on ne connaît pas la masse effective des porteurs, il est difficile d'avoir une estimation quantitative de cette densité. Ce que l'on peut faire est de comparer l'importance du poids de suprafluide $D_s = n_s \pi e^2 / m^*$ au poids de Drude $D = n_p \pi e^2 / m^*$ où n_p est la densité de porteur libre. Le poids de Drude s'obtient en considérant d'autres limites de la fonction de corrélation de paires:

$$\frac{n_p}{m^*} = \Lambda_{xx}(q_x \rightarrow 0, q_y = 0, iq_n = 0) - \Lambda_{xx}(q_x = 0, q_y = 0, iq_n \rightarrow 0)$$

Dans la figure 16, on a représenté la limite basse fréquence de la fonction de corrélation courant-courant uniforme par des cercles. Pour ces données nous avons fait une extrapolation à fréquence nulle en utilisant un lissage quadratique. Ainsi, nous pouvons conclure que le poids de Drude est beaucoup plus important que le poids de suprafluide et d'après la théorie développée par Scalapino et al.

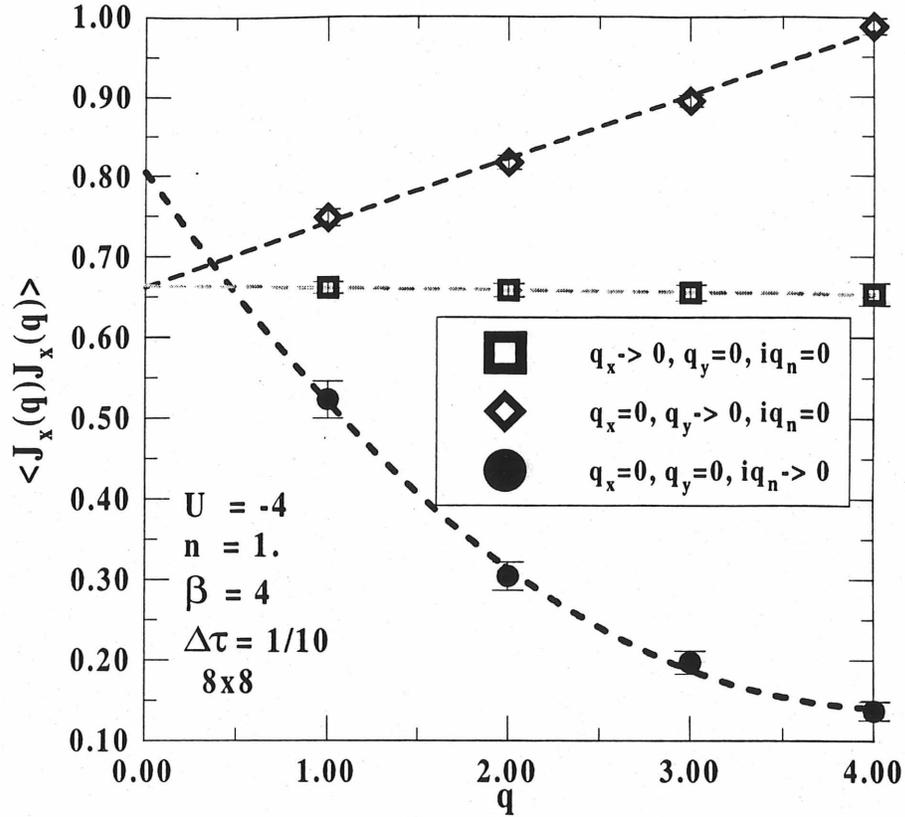


Figure 16: Fonction de corrélation courant-courant dans la direction \hat{x} pour différents vecteurs d'onde. Les carrés représentent $q_y = 0, iq_n = 0$ avec différentes valeurs de q_x , les losanges représentent le résultat pour différentes valeurs de q_y avec $q_x = 0$ et $iq_n = 0$ et les cercles représente le cas limite $iq_n \rightarrow 0$ avec $q_x = q_y = 0$. Les résultats présentés sont pour les conditions habituelles, $U = -4, n = 1, \Delta\tau = 1/10$ pour un réseau 8×8 à température $T = 1/4$.

[98], on aurait donc affaire à un métal et non à un supraconducteur. Ce résultat suggère que la présence d'un pseudogap dans le poids spectral ne serait pas liée à la présence d'un état ordonné. D'autre part, si l'on était en présence de paires locales préformées (comme dans les théories de couplage fort), on devrait observer une faible densité de porteurs libres et donc un poids de Drude assez faible. Étant donné que l'on a choisi une interaction intermédiaire $U = -4$, nous ne sommes pas très étonnés d'observer un poids de Drude relativement important et, donc, qu'il n'y a pas de présence de paires locales dans le régime avec pseudogap.

3.5.2 Précurseurs de l'état ordonné

On peut argumenter que le pseudogap est en fait un précurseur de l'état ordonné. Nous avons montré au chapitre 1 qu'à demi-remplissage le point critique est à température nulle. Cependant, pour un système de taille finie, lorsque la longueur de corrélation atteint la taille du système, celui-ci devrait présenter certaines caractéristiques de la phase ordonnée. Par exemple, on peut s'attendre à ce que le poids spectral présente un gap tel que prévu dans la phase supraconductrice. C'est pourquoi nous avons considéré un système de taille 4×4 à $\beta = 8$ afin de vérifier si le pseudogap est un précurseur de l'état ordonné.

À la figure 17, on présente le spectre à une particule obtenue par prolongement analytique des données MCQ à basse température. On observe qu'il y a alors un gap séparant les deux pics caractéristiques de l'état ordonné. On voit que ces deux pics sont situés aux mêmes fréquences que les maxima observés dans le régime caractérisé par un pseudogap. Ce résultat suggère que le pseudogap soit un précurseur de l'état supraconducteur et que celui-ci serait dû à la présence de fluctuations supraconductrices. Sur la figure 17, on voit la subsistance d'un petit pic à fréquence nulle. L'existence de ce pic est à vérifier. Celui-ci pourrait être dû à des effets de taille finie.

3.6 Longueurs caractéristiques

3.6.1 Longueur de corrélation de paires

Nous avons observé que le pseudogap est peu sujet à l'effet de la taille du système aux températures plus élevées. Malgré tout, il serait intéressant de voir comment se comporte cette caractéristique avec un changement de la taille du réseau. Nous avons trop peu de données MCQ pour pouvoir déterminer l'évolution en taille. Cependant, l'accord entre notre approche et le MCQ suggère d'utiliser le comportement en taille de notre approche pour prédire les résultats dans la limite thermodynamique.

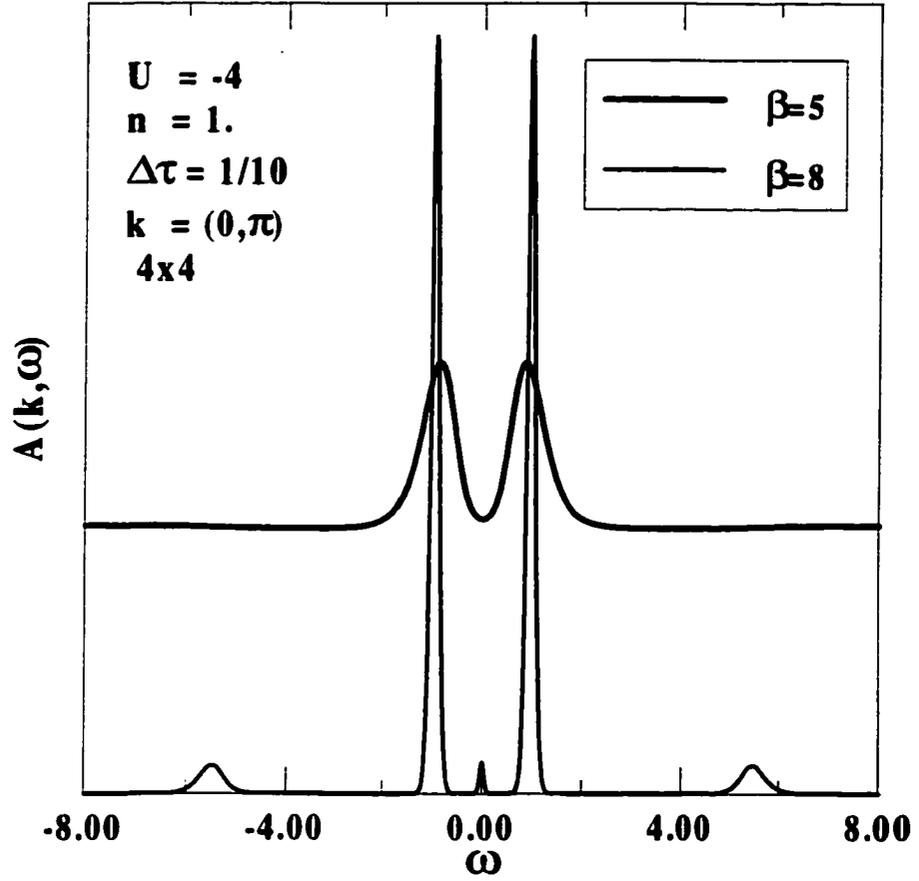


Figure 17: Spectre à une particule pour un réseau de taille 4×4 à basse température $T = 1/8$ et au vecteur d'onde $(0, \pi)$. En comparaison, on montre le spectre obtenu à $T = 1/5$. Les valeurs des paramètres du modèle sont $U = -4$, $n = 1$, avec une discrétisation du temps imaginaire de $\Delta\tau = 1/10$.

Pour bien détailler notre étude en taille, il faut trouver les longueurs caractéristiques du système. Le comportement critique de la susceptibilité de paires nous indique qu'une première longueur à prendre en compte est la longueur de corrélation de paires. Pour l'introduire, considérons notre approximation pour la fonction de corrélation:

$$\chi^{(1)}(\vec{q}) = \frac{\chi_0^{(1)}(\vec{q})}{1 + U_{pp}\chi_0^{(1)}(\vec{q})} \quad (3.11)$$

On aurait un point critique si l'on pouvait obtenir $U_{pp} = U_c \equiv -1/\chi_0^{(1)}(\bar{q} = 0)$. La valeur U_c est appelée valeur critique du vertex. On sait qu'à un point critique on observe une divergence d'une longueur de corrélation, ainsi il semble approprié de définir la longueur de corrélation de paires par:

$$\xi_L^2 = \xi_0^2 \frac{U_{pp}}{U_c - U_{pp}} \quad (3.12)$$

où

$$\xi_0^2 = -\frac{1}{2\chi_0(\bar{q} = 0)} \frac{\partial^2 \chi_0(\bar{q} = 0)}{\partial \mathbf{q}^2}$$

On a placé un indice L à la longueur de corrélation pour indiquer de façon explicite sa dépendance sur la taille du système. Comme on a vu, précédemment, à basse température, $\beta \simeq 4$, la susceptibilité de paires est piquée en fréquences de Matsubara et en vecteurs d'onde autour du point $\bar{q} = (0, 0, 0)$ qui est caractéristique de l'approche d'un point critique supraconducteur. On peut alors développer la fonction de corrélation autour de ce point. Utilisant la longueur de corrélation introduite précédemment, eq. (3.12), on peut écrire:

$$\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n = 0) \approx \frac{-U_{pp}^{-1} \xi_0^{-2}}{\xi_L^{-2} + \mathbf{q}^2} \quad (3.13)$$

Il est facile d'évaluer le comportement en température de la longueur de corrélation dans le régime classique renormalisé. Étant donné que celle-ci est reliée à la valeur du vertex, on doit considérer la relation utilisée pour évaluer ce vertex, soit l'équation (2.35). Incorporant l'approximation (3.13) dans cette condition on obtient:

$$\frac{T}{U_{pp} \xi_0^2} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \frac{1}{\xi_\infty^{-2} + \mathbf{q}^2} + C = \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \quad (3.14)$$

où C contient toutes les contributions des fréquences de Matsubara non-nulles de (2.35). Ces contributions sont non-singulières et dépendent faiblement de la température. On peut maintenant démontrer que le comportement critique correspond à celui du modèle sphérique [30]:

$$\xi_\infty = \Lambda^{-1} \exp(c/T) \quad (3.15)$$

On a introduit un paramètre, Λ^{-1} , pour assurer la convergence de l'intégrale. Celui-ci correspond à peu près à la plus petite dimension du système: la longueur de cohérence ξ_0 . La variable c est à peu près constante en température et est donnée par:

$$c = \pi |U_{pp}| \xi_0^2 (\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - C)$$

La faible dépendance en température de c à $n = 1$ a été analysée dans [30]. Il est possible de faire un lien entre la fréquence caractéristique et la longueur de corrélation. Daré et al. [31] ont trouvé que dans le cas répulsif, l'approximation TPSC prévoit que la fréquence caractéristique des fluctuations magnétiques suit le comportement suivant $\omega_c \propto \xi^{-z}$ avec $z = 2$ (z est appelé exposant dynamique). La symétrie entre notre approximation et celle du cas répulsif montre que dans notre cas la fréquence caractéristique de la susceptibilité de paires a un exposant critique avec la même valeur, $z = 2$. Ainsi, la fréquence caractéristique décroît plus rapidement que la température.

Pour un réseau de taille finie le résultat est différent. Supposons que le réseau est un carré de taille $L \times L$. Ici en traitant séparément le vecteur $\mathbf{q} = 0$ et en remplaçant le reste de la somme discrète sur les vecteurs d'onde par une intégrale, la relation (3.14) donne:

$$\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \approx \frac{T}{\pi U_{pp} \xi_0^2} \left[\frac{\xi_L^2}{L^2} + \ln \left(\frac{1 + \xi_L^2 \Lambda^2}{1 + \xi_L^2 / L^2} \right) \right]$$

Supposant que la valeur moyenne de double occupation est la même pour un réseau de taille finie que pour celui de taille infinie (ce qui est une bonne approximation car cette quantité est peu sujette aux effets de taille), on obtient la relation:

$$\ln(1 + \xi_\infty^2 \Lambda^2) = \frac{\xi_L^2}{L^2} + \ln \left(\frac{1 + \xi_L^2 \Lambda^2}{1 + \xi_L^2 / L^2} \right) \quad (3.16)$$

Ce résultat nous montre que si la longueur de corrélation est petite par rapport à la taille du système, $\xi_L \ll L$, elle est à peu près identique à celle du réseau de taille infinie $\xi_L \approx \xi_\infty$. Sinon, on aura $\xi_L < \xi_\infty$ car $x > \ln(1 + x)$. Dans ce dernier cas, la longueur de corrélation perd son comportement exponentiel et suit plutôt un comportement en loi de puissance:

$$\xi_L \propto \frac{L}{T^{1/2}} \quad (3.17)$$

Ce comportement pourrait persister tant que le système demeure dans un régime classique et qu'il est alors justifié de négliger la somme sur les fréquences de Matsubara dans la règle de somme (2.35). Cependant, on sait par la diminution de l'importance relative de la susceptibilité statique observée à basse température (figure 14) que le système redevient quantique. On montrera que le comportement en température obtenu (3.17) démontre aussi un retour vers un régime quantique lorsque les effets de taille sont importants (voir section 3.6.2).

3.6.2 Effet des fluctuations sur le spectre à une particule

Voyons comment l'augmentation de la longueur de corrélation pourrait induire un pseudogap dans le poids spectral. Considérons donc l'expression de la self-énergie retardée en fonction de la susceptibilité de paires, eq. (2.37). Comme le régime est classique, il est justifié, à basse fréquence, de ne conserver que la contribution à la self-énergie provenant de la susceptibilité statique:

$$\Sigma(\mathbf{k}_F, ik_n) = U \frac{n}{2} - UU_{pp} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}, 0) \frac{1}{-ik_n - \epsilon(-\mathbf{k}_F + \mathbf{q}) + \mu}$$

Utilisant le développement longue portée présentée à l'équation (3.13), nous pouvons faire le prolongement analytique de la self-énergie.

$$\Sigma_R(\mathbf{k}_F, \omega + i\eta) \approx U \frac{n}{2} - \frac{UT}{\xi_0^2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{1}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} \frac{1}{\omega + i\eta + \epsilon(-\mathbf{k}_F + \mathbf{q}) - \mu}$$

Supposant que l'on puisse linéariser la relation de dispersion, on écrit $\epsilon(-\mathbf{k}_F + \mathbf{q}) \simeq \epsilon(-\mathbf{k}_F) - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_F$. Ainsi, on peut calculer de façon analytique la partie réelle et la partie imaginaire de la self-énergie retardée. On obtient une forme semblable à ce qui fut obtenu par Vilk et Tremblay dans le cas répulsif [117]:

$$\begin{aligned} \Sigma'_R(\mathbf{k}_F, \omega) &\simeq U \frac{n}{2} - \frac{UT}{4\pi\xi_0^2} \frac{1}{\sqrt{v_F^2 \xi^{-2} + \omega^2}} \ln \left| \frac{\sqrt{\omega^2 + v_F^2 \xi^{-2}} + \omega}{\sqrt{\omega^2 + v_F^2 \xi^{-2}} - \omega} \right| \\ \Sigma''_R(\mathbf{k}_F, \omega) &\simeq \frac{UT}{4\xi_0^2} \frac{1}{\sqrt{\omega^2 + \xi^{-2} v_F^2}} \end{aligned} \quad (3.18)$$

On est alors à même d'évaluer le poids spectral. Celui-ci est relié à la self-énergie retardée par la relation habituelle:

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -2\text{Im}G_R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-2\Sigma_R''(\mathbf{k}, \omega)}{(\omega - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_R'(\mathbf{k}, \omega))^2 + (\Sigma_R''(\mathbf{k}, \omega))^2} \quad (3.19)$$

Vérifions quelle est la condition nécessaire pour l'apparition du pseudogap. La présence d'un pseudogap à basse fréquence signifie que le poids spectral à fréquence nulle doit être convexe, c'est-à-dire que:

$$\left. \frac{\partial^2 A(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega^2} \right|_{\omega=0} > 0$$

Pour vérifier comment on peut satisfaire une telle condition, étudions le comportement de la self-énergie autour de la fréquence nulle. Par la définition du niveau de Fermi [71], on a:

$$\epsilon(\mathbf{k}_F) - \mu + \Sigma_R'(\mathbf{k}_F, \omega = 0) = 0$$

On peut également montrer que la partie imaginaire de la self-énergie est optimale à fréquence nulle (pour un liquide de Fermi on y observe un maximum alors que d'après la relation (3.18), on y observe un minimum) et que la partie réelle y possède un point d'inflexion. Ainsi, on obtient:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 A(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega^2} \right|_{\omega=0} &= \frac{1}{\Sigma_R''(\mathbf{k}, 0)} \left[\left. \frac{\partial^2 \Sigma_R''(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega^2} \right|_{\omega=0} + \frac{2}{\Sigma_R''(\mathbf{k}_F, 0)} \left(1 - \left. \frac{\partial \Sigma_R'(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{\Sigma_R''(\mathbf{k}_F, 0)} \left[\frac{(\pi^2 - 8)}{4\pi^2} \frac{|U_{pp}| T \xi^3}{\xi_0^2 v_F^3} + \frac{8\xi}{\pi v_F} - \frac{8\xi_0^2 v_F}{|U_{pp}| T \xi} \right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

où la deuxième ligne est obtenue en utilisant les résultats analytiques pour la self-énergie (3.18). Regardons dans un premier temps, l'information que l'on peut déduire de la première ligne. Le premier terme à l'intérieur des crochets du côté droit est positif tandis que le deuxième est négatif (la partie imaginaire de la self-énergie retardée étant négative). On reconnaît que le terme entre parenthèse est l'inverse du poids de quasiparticule (définition usuelle). Ainsi, la disparition

du poids de quasiparticule ne représente pas l'apparition d'un pseudogap. Au contraire, il indique une augmentation de la concavité du poids spectral à basse fréquence. Afin qu'il puisse y avoir un pseudogap la partie imaginaire de la self-énergie doit être élevée à fréquence nulle et y avoir une forte convexité.

L'étude de la deuxième ligne de l'équation (3.20), nous révèle que lorsque le troisième terme est dominant, c'est-à-dire à basse température et en présence d'une longueur de corrélation petite, le poids spectral est concave. Cette concavité augmente avec l'abaissement de la température. Cependant, lorsque la longueur de corrélation est suffisamment importante, le terme dominant est le premier terme. On a alors affaire à un poids spectral convexe. Il y aura donc un pseudogap à basse fréquence. La condition de convexité repose principalement sur la comparaison entre le premier et le troisième terme (mentionnons que le deuxième terme contribue également à la présence d'un pseudogap):

$$\left(\frac{\xi}{v_F}\right)^4 > \frac{32\pi^2}{\pi^2 - 8} \frac{\xi_0^4}{U^2 T^2} \quad (3.21)$$

La condition (3.21), nous révèle que plus la vitesse de Fermi sera petite plus il sera facile d'ouvrir un pseudogap. Ce résultat concorde avec notre observation que le pseudogap semble apparaître d'abord près des singularités de van Hove, $(0, \pi)$, où la vitesse de Fermi est plus petite. Lorsque le comportement de la fonction de corrélation est exponentiel en température, tel que présenté à la formule (3.15), il est clair qu'un pseudogap apparaît à basse température. Cependant, qu'arrive-t'il lorsque les effets de taille sont importants? On a montré à la relation (3.17), que dans ces conditions la longueur de corrélation croît en suivant une loi de puissance en $1/T^{1/2}$. Alors, les trois termes apparaissant dans la relation (3.20), ont un comportement identique en température, c'est-à-dire en $1/T^{1/2}$. Ainsi, si un pseudogap est présent dans le système, il demeurera et deviendra même plus prononcé avec l'abaissement de la température jusqu'à donner un gap à température nulle. Il faut cependant, noter que notre approximation classique n'est sûrement pas valide jusqu'à cette température.

3.6.3 Longueur d'onde thermique de de Broglie

Comme on a montré précédemment, il est plus facile de créer un pseudogap lorsque la vitesse de Fermi est plus faible. Il est donc intéressant d'introduire une nouvelle quantité, la longueur d'onde thermique de de Broglie [116]:

$$\xi_{th} = \frac{v_F}{T} \quad (3.22)$$

En fonction de cette nouvelle quantité, la condition pour l'existence d'un pseudogap (3.21) prend la forme:

$$\left(\frac{\xi}{\xi_{th}} \right)^4 > \frac{32\pi^2}{\pi^2 - 8} \frac{\xi_0^4 T^2}{U^2}$$

Il est possible d'estimer la longueur de corrélation de paires et la longueur d'onde thermique de de Broglie à partir des mesures MCQ. Pour la longueur de corrélation, c'est assez simple: considérant la susceptibilité de paires statique, $\chi(\mathbf{q}, iq_n = 0)$ nous pouvons en extraire la longueur de corrélation en utilisant le développement autour du vecteur d'onde $\mathbf{q} = 0$, équation (3.13). Il est à noter qu'étant donné que nous avons des réseaux de petite taille, le résultat est moins précis à basse température où la susceptibilité de paires est fortement piquée autour de $\mathbf{q} = 0$.

L'évaluation de la longueur d'onde thermique de de Broglie est plus difficile. Nous devons d'abord faire le prolongement analytique de la fonction de Green pour différents vecteurs d'onde afin d'en extraire la vitesse de Fermi. L'évaluation de cette dernière n'est pas très précise. Elle est extraite de la position du pic dans le poids spectral pour chacun des vecteurs d'onde choisis (voir par exemple la figure 9). La dispersion de ces pics nous permet d'évaluer les différentes composantes de la vitesse de Fermi. Par la suite, nous pouvons évaluer la norme de la vitesse de Fermi et la longueur d'onde thermique par la relation (3.22).

Nous présentons à la figure 18 la longueur de corrélation et la longueur thermique obtenue pour un réseau de taille 6×6 et de taille 8×8 en fonction de

la température. Nous présentons les résultats pour une interaction $U = -4$ avec un remplissage $n = 0.95$. Les deux longueurs sont données en unité de pas du réseau. Afin de voir l'effet de taille finie nous avons extrapolé la longueur de corrélation pour un réseau de taille infinie en utilisant la relation (3.16). À certaines températures le résultat extrapolé du réseau 6×6 ne s'accorde pas avec celui extrapolé du réseau 8×8 . Nous avons alors considéré la moyenne des deux résultats. Le calcul de la longueur de corrélation ne doit être considéré que comme une estimation du premier ordre. Une des raisons en est que le paramètre Λ n'est pas connu. Pour notre calcul, nous avons utilisé $\Lambda = \pi$. On peut toutefois vérifier que le changement de la valeur de Λ change peu l'extrapolation au réseau de taille infinie.

Aux températures les plus élevées, la longueur d'onde thermique est plus grande que la longueur de corrélation et elle augmente avec l'abaissement de la température en suivant la loi de puissance $1/T$. La longueur de corrélation quant à elle augmente avec l'abaissement de la température en suivant un comportement exponentiel tel que prévu $\xi \propto \exp(c/T)$. Ainsi à une certaine température la longueur de corrélation devient plus grande que la longueur d'onde thermique. On peut l'observer à une température légèrement inférieure à la température où apparaît le pseudogap dans le poids spectral. On peut aussi observer que les effets de taille finie changent peu la longueur de corrélation car celle-ci est relativement petite par rapport à la taille du réseau et ce pour un vaste domaine de température ($\xi \simeq 1.32$ à $T = 1/4$).

En terminant, remarquons que l'on n'observe pas explicitement dans la figure 18 le comportement en $\xi \propto 1/T^{1/2}$ prévu à très basse température. La raison en est simplement que les effets de taille semblent peu importants pour l'ensemble des points présentés. S'il existe un régime de température où un tel comportement est présent alors on s'attend à ce que la longueur thermique puisse rattraper la longueur de corrélation (la première de ces longueurs ayant un comportement en $1/T$). Ainsi, cet effet pourrait provoquer le retour vers un régime quantique observé à très basse température pour des systèmes de petite taille (voir section 3.4).

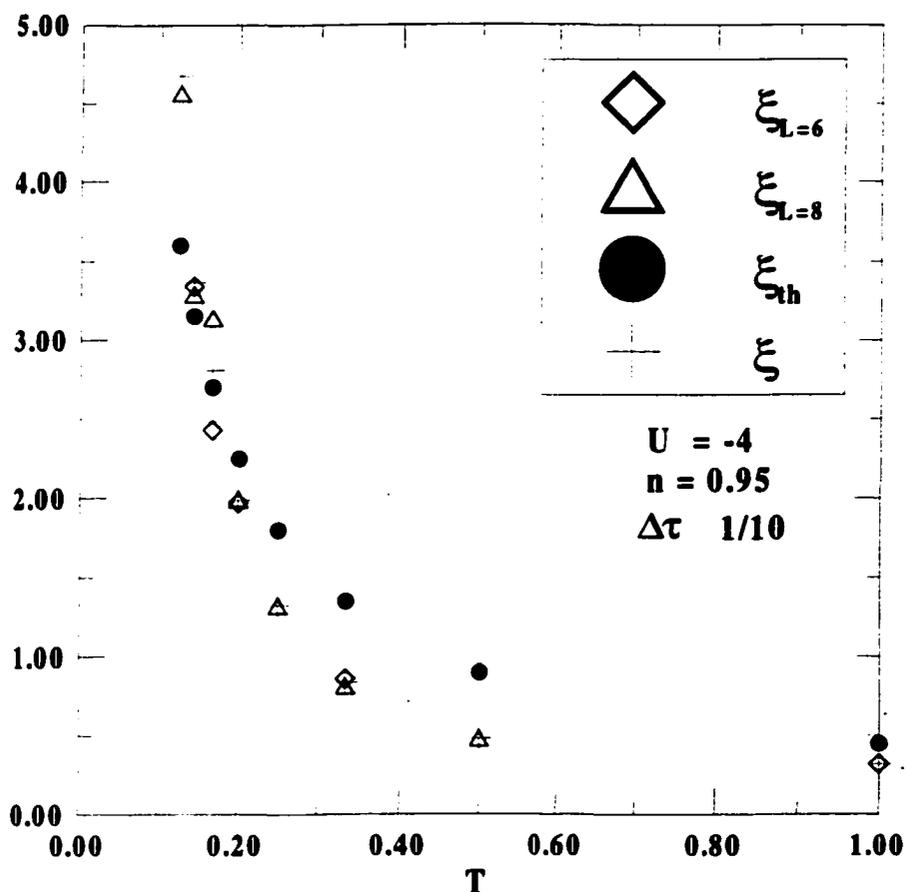


Figure 18: Longueur de corrélation de paires comparée à la longueur d'onde de de Broglie en fonction de la température. Les données sont extraites des mesures MCQ pour un cas à interaction $U = -4$, et remplissage $n = 0.95$. Les losanges représentent la longueur de corrélation pour un réseau de taille 6×6 , les triangles, celle d'un réseau 8×8 , les croix extrapolée pour la limite thermodynamique et les cercles pleins, la longueur d'onde de de Broglie pour un réseau 8×8 .

3.7 Hors demi-remplissage

Il est intéressant de se demander si les résultats présentés pour le cas demi-rempli peuvent s'extrapoler hors du demi-remplissage. La principale différence vient du fait que le comportement critique est alors de type $O(2)$.

Ce comportement critique permet l'existence d'un point critique de type BKT à température finie. Cependant, il est à noter que les systèmes étudiés par MCQ sont beaucoup trop petits pour nous révéler la présence d'un tel point critique. Ce problème est encore plus prononcé près du demi-remplissage où le comportement critique est de type $O(3)$ pour une large plage de température. Dans ces conditions, on peut s'attendre à ce que le crossover entre les comportements critiques $O(2)$ et $O(3)$ ne puisse avoir lieu car la longueur de corrélation devrait être du même ordre de grandeur que la taille du système à une température trop élevée. Ceci peut être vérifié par la comparaison du facteur de structure de paires uniforme au facteur de structure de charge pris au vecteur d'onde $\mathbf{Q} \equiv (\pi, \pi)$. Ce dernier est défini par:

$$S_\rho(\mathbf{Q}) = \langle \rho(\mathbf{Q})\rho(\mathbf{Q}) \rangle$$

où la densité de particule est donnée par:

$$\rho(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k})\psi_\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$$

La comparaison entre le facteur de structure de charge et celui de paires est présentée à la figure (19). Sur la partie de gauche de la figure, on peut voir qu'au remplissage $n = 0.95$, ces deux quantités sont presque identiques. La différence ne se fait sentir qu'à très basse température où l'incertitude sur nos résultats est importante. Pour fins de comparaison, nous présentons dans la même figure les facteurs de structure pour le remplissage $n = 0.8$. On voit que dans ce dernier cas le comportement critique est de type $O(2)$ car le facteur de structure de charge n'est pas critique.

Une autre quantité nous révèle la brisure de la symétrie $O(3)$, c'est la valeur du potentiel chimique. Comme on a vu au chapitre 1, c'est cette quantité qui brise la symétrie $O(3)$ dans le modèle de Hubbard. Dans le tableau 4, nous présentons les valeurs du potentiel chimique utilisées dans les calculs MCQ pour le réseau 8×8 . Aux valeurs présentées, nous avons soustrait le terme $U/2$. Rappelons que pour le cas demi-rempli, on a $\mu - U/2 = 0$.

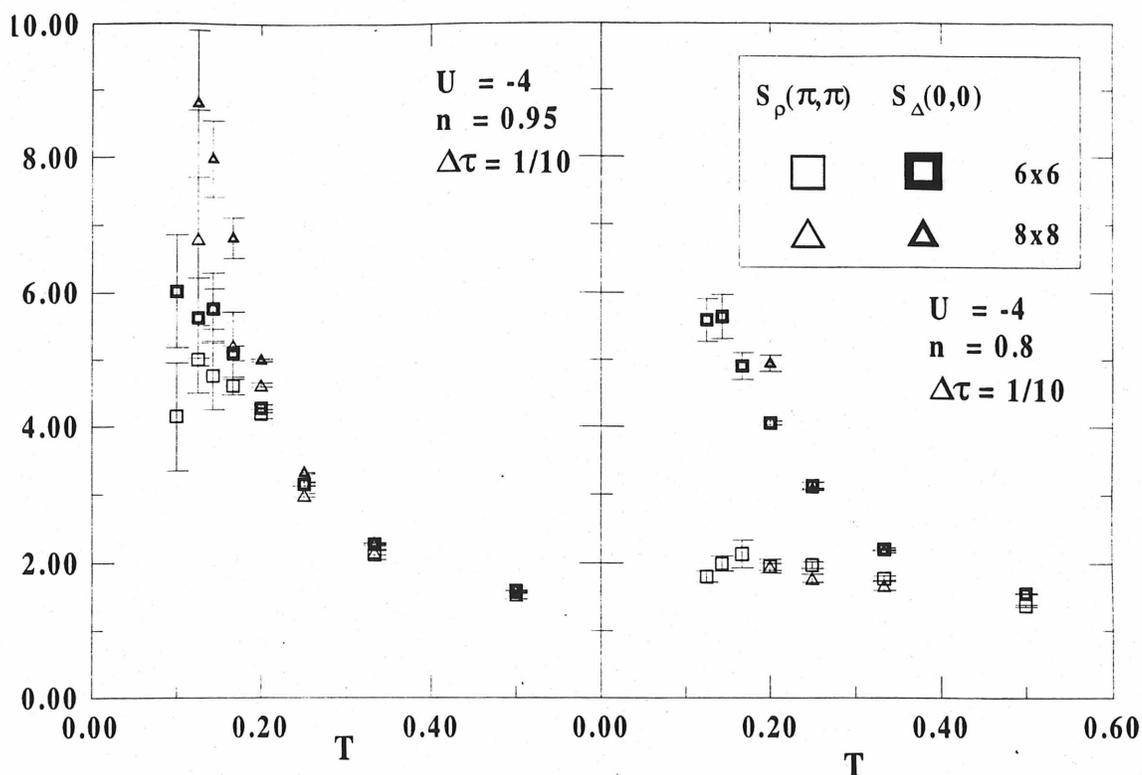


Figure 19: Comparaison entre le facteur de structure de paires (symboles gras) et le facteur de structure de charge (symboles vides) en fonction de la température. Les carrés présentent les résultats pour le réseau 6×6 et les triangles pour le réseau 8×8 . La partie de gauche montre les résultats au remplissage $n = 0.95$ et celle de droite pour $n = 0.8$. Pour les deux remplissages nous avons utilisé une interaction $U = -4$ et une discrétisation de $\Delta\tau = 1/10$.

On remarque qu'au remplissage $n = 0.95$, aux températures d'intérêt, le potentiel chimique est bien inférieur à la température. En comparant les valeurs présentés au tableau 4 à la figure 19, on peut remarquer que la différence entre le facteur de structure de paires et le facteur de structure de charge (voir figure 19) se fait sentir lorsque la température est du même ordre de grandeur que le potentiel chimique ($T \simeq 2\mu$): $T \simeq 1/8$ au remplissage $n = 0.95$ et $T \simeq 1/3$ à $n = 0.8$.

Tableau 4: Potentiel chimique du modèle de Hubbard à $U = -4$ tel que mesuré par MCQ pour un réseau 8×8 avec une discrétisation du temps imaginaire $\Delta\tau = 1/10$.

n	T	$\mu - U/2$
0.95	1/3	-0.082
0.95	1/4	-0.06
0.95	1/5	-0.06
0.95	1/8	-0.07
0.8	1/3	-0.275
0.8	1/4	-0.26
0.8	1/5	-0.25

Nous avons publié une étude détaillée du remplissage $n = 0.95$ [2]. Nous avons montré dans ce cas nous observons également la présence d'un pseudogap et ce à une température bien supérieure à la température critique. Dans la figure 20 nous montrons le poids spectral obtenu par l'application de la MME aux données MCQ. Pour le remplissage $n = 0.95$, nous montrons le poids spectral au vecteur d'onde $\mathbf{k} = (0, \pi)$. Le fait que ce point n'est pas exactement sur la surface de Fermi est responsable de l'asymétrie observée entre les fréquences négatives et les fréquences positives. Dans la partie de droite de cette même figure nous présentons le poids spectral au remplissage $n = 0.8$ pour le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (0, 3\pi/4)$. On voit que ce point est très près de la surface de Fermi. Pour les deux remplissages nous présentons les résultats pour une température $T = 1/5$ avec une interaction $U = -4$.

Nous voyons qu'à la température $T = 1/5$, pour chacun des remplissages étudiés, le poids spectral à une particule présente un pseudogap. Ceci semble montrer que près du demi-remplissage, la température à laquelle apparaît le pseudogap, T^* , dépend faiblement du remplissage. Si l'on compare la valeur du poids de quasiparticule pour chacun de ces remplissages, il semble que la température $T^*(n)$ diminue légèrement au fur et à mesure que l'on s'éloigne

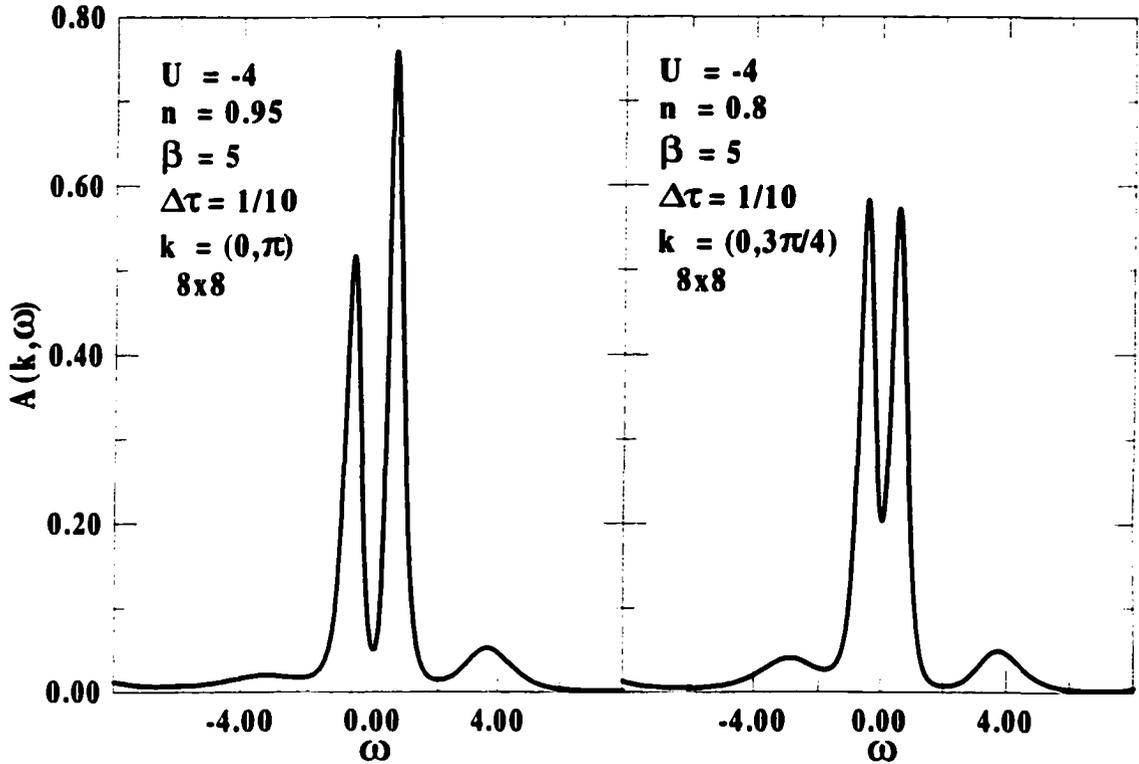


Figure 20: Poids spectral au remplissage $n = 0.95$ et au vecteur d'onde $\mathbf{k} = (0, \pi)$ et au remplissage $n = 0.8$ pour le vecteur $\mathbf{k} = (0, 3\pi/4)$. Les deux courbes ont été obtenues par l'application de la technique de maximisation d'entropie aux données MCQ. Nous présentons les résultats à température $T = 1/5$ avec interaction $U = -4$.

du demi-remplissage. En fait, ce comportement pourrait très bien être similaire au comportement de la température critique champ moyen, T_c^0 , en fonction du remplissage. Pour illustrer ce fait, nous présentons au tableau 5, la valeur de la température critique prédite par un calcul champ moyen pour différents remplissages. Nous donnons également la valeur du poids spectral basse fréquence mesuré par MCQ à $T = 1/4$ (voir équation (3.2)). Il faut dire que le poids spectral ne démontre pas tout à fait un comportement monotone en remplissage. Cependant, il faut dénoter que pour le remplissage $n = 0.95$, le vecteur d'onde pour lequel nous avons évalué ce poids, $\mathbf{k} = (0, \pi)$, n'est pas situé sur la surface de Fermi et se trouve légèrement en dehors de la mer de Fermi. Cela pourrait

expliquer le fait que le poids spectral basse fréquence y est légèrement inférieur à celui mesuré au demi-remplissage. Afin d'obtenir une comparaison plus détaillée il serait intéressant d'avoir une mesure de la température où apparaît le pseudogap en fonction du remplissage, $T^*(n)$.

Tableau 5: Température critique prédite par une théorie champ moyen pour différents remplissages pour un réseau de taille infinie avec une interaction $U = -4$. Pour fins de comparaison, nous présentons également la valeur du poids spectral basse fréquence mesurée à $T = 1/4$ pour un réseau de taille 8×8 .

n	T_c^0	\bar{z}
1.	0.7386	0.446 ± 0.001
0.95	0.7374	0.441 ± 0.003
0.8	0.7198	0.514 ± 0.001

Le fait que le comportement en remplissage de T^* serait semblable à celui de T_c^0 renforcerait notre argumentation selon quoi le pseudogap est dû aux fluctuations supraconductrices.

CONCLUSION

À basse température, lorsque les effets de corrélation sont importants le modèle de Hubbard présente des caractéristiques pouvant être assimilées à un régime classique renormalisé. Près du demi-remplissage, ce modèle possède un paramètre d'ordre qui présente une symétrie plus élevée. Nous avons montré que, dans ces conditions, une approximation de type RPA avec un vertex renormalisé concorde avec ce qui est observé par les simulations Monte Carlo. Ce résultat avait déjà été observé et utilisé comme justification heuristique de l'approximation TPSC appliquée au modèle de Hubbard répulsif.

Ces études préalables nous ont fourni une base pour la généralisation de l'approximation TPSC. En plus d'enrichir le formalisme à la base de cette approximation, nous l'avons appliquée au modèle de Hubbard attractif. Pour le cas à interaction intermédiaire étudié nous avons montré que notre approximation permet de retrouver, sans paramètre ajustable, la valeur du vertex observée par les simulations MCQ.

Nous avons également montré que dans le régime classique renormalisé le spectre à une particule est caractérisé par un abaissement du poids à basse énergie au niveau de Fermi: un pseudogap. Au début de cette thèse, nous avons argumenté que la présence du pseudogap dans un large domaine de température dans le modèle de Hubbard attractif permet de mieux comprendre la présence d'un pseudogap dans les supraconducteurs à haute température critique et ce à des températures beaucoup plus importantes que la température critique. Notre explication provient de l'élargissement de la symétrie du paramètre d'ordre qui serait responsable d'un abaissement de la température critique sans toutefois avoir d'effet marqué sur la température où apparaissent les fluctuations critiques. Notre étude a été présentée pour une interaction inférieure au couplage maximisant la température critique (régime d'interaction faible à intermédiaire), $U = -4$. Ainsi le pseudogap observé n'est pas dû à des effets d'interactions fortes.

Certains résultats expérimentaux sur les supraconducteurs à haute température critique permettent d'appliquer notre étude à ces systèmes. Corson et

al. [24] ont observé par des mesures de conductivité à haute fréquence que le régime où apparaît le pseudogap dans les SC hT_c est un régime classique renormalisé. De plus, leur étude a montré que la température critique est associée à une disparition de la cohérence de phase.

Malgré les résultats obtenus, il semble évident que notre approximation ne permet pas d'expliquer les résultats observés au delà du cas d'interaction intermédiaire. Nous avons découvert récemment qu'il est possible, dans l'esprit de l'approximation TPSC, d'améliorer le formalisme en ajoutant un vertex dynamique non uniforme (voir l'annexe C). Une telle approximation pourrait permettre d'améliorer l'estimation de la susceptibilité critique. Cependant, il y aurait un effet plus important sur l'estimation de la self-énergie. De plus, il serait intéressant de vérifier si elle permettrait d'obtenir des résultats intéressants à plus forte interaction.

En terminant, mentionnons également les améliorations possibles de la méthode Monte Carlo. Dans un premier temps, il serait possible d'accélérer la vitesse de convergence par un choix approprié d'estimateurs. Assaraf et Caffarel [6] ont présenté une méthode où, par l'utilisation de simulations préalables, il est possible de renormaliser les estimateurs pour de nouveaux estimateurs avec une plus faible variance. Une autre amélioration notable pour le cas à forte interaction et à basse température, consiste à améliorer l'ergodicité de l'algorithme. Une telle amélioration a été proposée par Iwamatsu et Okabe [50]. Leur méthode est basée sur les travaux de Tsallis et Stariolo [110] et ils l'ont appliquée à l'étude par simulation Monte Carlo d'un double puits quantique.

La technique de prolongement analytique par maximisation d'entropie pourrait également être raffinée. Tel que mentionné dans le rapport de Touchette et Poulin [106], nous avons développé un nouvel algorithme basé sur une technique de recuit simulé grandement utilisée dans les problèmes d'optimisation [41]. La force de cette méthode provient de sa capacité de trouver le minimum absolu d'une fonction lorsque celle-ci possède plusieurs minima locaux. Cependant, il est difficile d'évaluer l'incertitude sur les résultats obtenus par cette technique.

Une méthode qui nous permettrait de faire un prolongement analytique tout en permettant d'évaluer l'incertitude sur le résultat obtenu serait une technique de Monte Carlo bayésien [40,93,94].

ANNEXE A

Table de formules

Pour faciliter l'utilisation de la technique développée, cette annexe constitue une table des principales formules utiles. Aucune des formules présentées ici ne dépend du choix de l'hamiltonien. Le lecteur intéressé à un hamiltonien particulier est donc invité à évaluer les équation du mouvement pour son hamiltonien et à y ajouter les formules qui lui seront utiles.

A.1 Définitions

On considère une fonction de Green de forme matricielle 2×2 dont les éléments hors diagonaux sont associés aux paramètres d'ordre et les termes diagonaux sont les termes normaux. On considère le système en présence d'un champ source externe, ϕ , couplé aux paramètres d'ordre.

L'équation de Dyson peut être considérée comme une définition de la self-énergie

$$(\mathbf{G}_0^{-1}(1, \bar{3}) - \phi(1, \bar{3}) - \Sigma(1, \bar{3}; \phi)) \mathbf{G}(\bar{3}, 2; \phi) = \delta(1 - 2)$$

Définition de la fonction de corrélation:

$$\chi(1, 2, 3, 4; \phi) \equiv -\frac{\delta}{\delta\phi(2, 1)} \mathbf{G}(3, 4; \phi)$$

où

$$\frac{\delta}{\delta\phi(1, 2)} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\delta\phi_{21}(1, 2)} \\ \frac{\delta}{\delta\phi_{12}(1, 2)} & 0 \end{pmatrix}$$

Définition du vertex irréductible:

$$\Gamma(1, 2, 3, 4; \mathcal{G}) \equiv \frac{\delta}{\delta\mathcal{G}(2, 1)} \Sigma(3, 4; \mathcal{G})$$

où

$$\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(1, 2)} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}_{21}(1, 2)} \\ \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}_{12}(1, 2)} & 0 \end{pmatrix}$$

On peut passer d'une expression en fonction du champs ϕ à une en fonction de \mathcal{G} par un changement de variable. Par exemple, ce changement pour le champ ϕ peut s'écrire:

$$\Phi(1, 2; \mathcal{G}) \equiv \phi(1, 2) \Big|_{G_{HD}[\phi]=\mathcal{G}}$$

A.2 Règles exactes

Il est à noter que dû à la forme matricielle de l'opérateur dérivée, la dérivation d'un produit de matrices ne se fait pas de façon usuelle. En utilisant le fait que cette matrice n'a que des composantes hors diagonales, on peut démontrer la relation suivante:

$$\frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \mathbf{A} \mathbf{B} = \left(\frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \mathbf{A} \right) \mathbf{B} + \sigma_x \mathbf{A}_D \sigma_x \frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \mathbf{B} + \sigma_x \mathbf{A}_{HD} \frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \sigma_x \mathbf{B}$$

Cette relation se démontre par la règle de commutation entre une matrice diagonale, \mathbf{D} , et une matrice hors diagonale, \mathbf{H} , (matrices 2×2):

$$\mathbf{H} \mathbf{D} = \sigma_x \mathbf{D} \sigma_x \mathbf{H}$$

et par la règle de commutation entre deux matrices hors diagonales, \mathbf{H}_1 et \mathbf{H}_2 :

$$\mathbf{H}_1 \mathbf{H}_2 = \sigma_x \mathbf{H}_2 \mathbf{H}_1 \sigma_x$$

Pour démontrer la règle de dérivation en chaîne lorsque l'on passe d'une dérivation par rapport au champ ϕ à une par rapport au champ \mathcal{G} , il suffit de le faire de façon usuelle puis de ramener le tout sous forme matricielle.

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} &= \left(\frac{\delta \mathbf{G}_{12}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi(2, 1)} \right) \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}_{12}(\bar{3}, \bar{4})} + \left(\frac{\delta \mathbf{G}_{21}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi(2, 1)} \right) \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}_{21}(\bar{3}, \bar{4})} \\ &= \left(\frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \mathbf{G}_{HD}(\bar{3}, \bar{4}; \phi) \right) \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4})} + \left(\frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \sigma_x \mathbf{G}_{HD}(\bar{3}, \bar{4}; \phi) \right) \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4})} \sigma_x \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

La définition de l'inverse de la fonction de Green permet de faire un lien entre la dépendance de G^{-1} sur ϕ et celle de G . Il suffit de considérer la relation:

$$\mathbf{G}(1, \bar{3}; \phi) \mathbf{G}^{-1}(\bar{3}, 2; \phi) = \delta(1 - 2) \quad (\text{A.2})$$

Cette relation nous permet de dériver plusieurs relations intéressantes. Par exemple, on peut l'utiliser pour démontrer la relation de Bethe-Salpeter.

A.3 Calcul au premier ordre

La fonction de Green au premier ordre en \mathcal{G} :

$$G(1, 2; \mathcal{G}) = G(1, 2) + \mathcal{G}(1, 2) + O(\mathcal{G}^2) \quad (\text{A.3})$$

nous permet d'évaluer \mathbf{G}^{-1} au premier ordre:

$$G^{-1}(1, 2; \mathcal{G}) = G^{-1}(1, 2) - G^{-1}(1, \bar{3}) \mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4}) G^{-1}(\bar{4}, 2) + O(\mathcal{G}^2) \quad (\text{A.4})$$

Combinant (A.4) avec la relation de Dyson (2.12) on obtient une expression pour le champ externe au premier ordre en \mathcal{G} :

$$\begin{aligned} \Phi(1, 2; \mathcal{G}) &= -\mathcal{G}(\bar{4}, \bar{3}) \left[\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{4}, \bar{3})} (\mathbf{G}^{-1}(1, 2; \mathcal{G}) + \Sigma(1, 2; \mathcal{G})) \right]_{\mathcal{G}=0} + O(\mathcal{G}^2) \\ &= \mathcal{G}(\bar{4}, \bar{3}) \left(\sigma_x \mathbf{G}^{-1}(1, \bar{4}) \sigma_x \mathbf{G}^{-1}(\bar{3}, 2) - \Gamma(\bar{3}, \bar{4}, 1, 2) \right) + O(\mathcal{G}^2) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Pour ce qui est du développement au premier ordre en ϕ , on obtient:

$$\mathbf{G}(1, 2; \phi) = \mathbf{G}(1, 2) - \phi(\bar{4}, \bar{3}) \chi(\bar{3}, \bar{4}, 1, 2) + O(\phi^2) \quad (\text{A.6})$$

qui découle de la définition de χ . Pour \mathbf{G}^{-1} , le résultat correspondant se démontre en considérant l'équation de Dyson (2.12) avec la définition du vertex (2.23) et la règle de dérivation en chaîne (A.1):

$$\mathbf{G}^{-1}(1, 2; \phi) = \mathbf{G}^{-1}(1, 2) - \phi(1, 2) + \phi(\bar{4}, \bar{3}) \chi(\bar{3}, \bar{4}, \bar{5}, \bar{6}) \Gamma(\bar{6}, \bar{5}, 1, 2) + O(\phi^2) \quad (\text{A.7})$$

C'est la combinaison de (A.6) avec (A.7) dans (A.2) qui permet de démontrer la relation de Bethe-Salpeter.

A.4 Calcul au deuxième ordre

Pour assurer une autocohérence dans l'estimation du vertex, il faut aller au deuxième ordre. Ceci correspond au premier terme de la dépendance en ϕ de la partie diagonale des matrices. L'observation que la partie hors diagonale des matrices peut s'exprimer comme une somme de puissances impaires de ϕ simplifie grandement le problème. On peut ainsi obtenir $\mathbf{G}(\mathcal{G})$ au deuxième ordre en \mathcal{G} sans introduire de nouvelles fonctions:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(1, 2; \mathcal{G}) = & \mathbf{G}(1, 2) + \mathcal{G}(1, 2) \\ & - \mathcal{G}(\bar{6}, \bar{5}) \left(\sigma_x \mathbf{G}^{-1}(\bar{4}, \bar{6}) \sigma_x \mathbf{G}^{-1}(\bar{5}, \bar{3}) - \Gamma(\bar{5}, \bar{6}, \bar{4}, \bar{3}) \right) \chi_{\text{HD}}(\bar{3}, \bar{4}, 1, 2; \mathcal{G}) + O(\mathcal{G}^3) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Pour \mathbf{G}^{-1} , on utilise l'équation de Dyson (2.12), les règles de la section (A.2) et le fait que la matrice $\Phi(\mathcal{G})$ étant hors diagonale n'a dans la phase normale que des puissances impaires en \mathcal{G} .

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{-1}(1, 2; \mathcal{G}) = & \mathbf{G}^{-1}(1, 2) - \mathbf{G}^{-1}(1, \bar{3}) \mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4}) \mathbf{G}^{-1}(\bar{4}, 2) \\ & - \mathcal{G}(\bar{4}, \bar{3}) \Gamma_{\text{HD}}(\bar{3}, \bar{4}, 1, 2; \mathcal{G}) + O(\mathcal{G}^3) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Afin de bien obtenir les relations (A.8) et (A.9) à l'ordre quadratique en \mathcal{G} , il nous faut obtenir Γ_{HD} et χ_{HD} à l'ordre linéaire en \mathcal{G} . Ceci peut se faire en utilisant les définitions (2.23) et (2.14) et que seule les parties diagonales de \mathbf{G} et de Σ ont des termes de puissances paires dans leur développement en \mathcal{G} . On obtient pour Γ_{HD} une expression où apparaît un vertex à trois particules:

$$\Gamma_{\text{HD}}(1, 2, 3, 4; \mathcal{G}) = \mathcal{G}(\bar{5}, \bar{6}) \left[\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{5}, \bar{6})} \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(2, 1)} \Sigma(3, 4; \mathcal{G}) \right]_{\mathcal{G}=0} + O(\mathcal{G}^3) \quad (\text{A.10})$$

De la même façon l'expression pour χ_{HD} fait apparaître une fonction de corrélation à trois particules:

$$\begin{aligned} \chi_{\text{HD}}(1, 2, 3, 4; \mathcal{G}) = & -\Phi(\bar{5}, \bar{6}; \mathcal{G}) \left[\frac{\delta}{\delta \phi(\bar{5}, \bar{6})} \frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \mathbf{G}(3, 4; \phi) \right]_{\phi=0} \\ = & \mathcal{G}(\bar{8}, \bar{7}) \left(-\sigma_x \mathbf{G}^{-1}(\bar{5}, \bar{8}) \sigma_x \mathbf{G}^{-1}(\bar{7}, \bar{6}) + \Gamma(\bar{7}, \bar{8}, \bar{5}, \bar{6}) \right) \left[\frac{\delta}{\delta \phi(\bar{5}, \bar{6})} \frac{\delta}{\delta \phi(2, 1)} \mathbf{G}(3, 4; \phi) \right]_{\phi=0} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

où on a fait appel au développement de Φ au premier ordre en \mathcal{G} , (A.5). Introduisant les développements du deuxième ordre (A.8) et (A.9) dans (A.2), on peut montrer qu'il existe une relation liant le vertex à trois particules et la fonction de corrélation à trois particules:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(6,5)} \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(4,3)} \Sigma(1,2;\mathcal{G}) \right]_{\mathcal{G}=0} &= -\sigma_x \mathbf{G}^{-1}(3,6) \sigma_x \mathbf{G}^{-1}(1,4) \mathbf{G}^{-1}(5,2) + \left(\mathbf{G}^{-1}(1,\bar{7}) \right. \\
&\quad \times \sigma_x \left(\sigma_x \mathbf{G}^{-1}(\bar{9},4) \sigma_x \mathbf{G}^{-1}(3,\bar{10}) - \Gamma(3,4,\bar{9},\bar{10}) \right) \sigma_x \\
&\quad \times \left(\sigma_x \mathbf{G}^{-1}(\bar{11},6) \sigma_x \mathbf{G}^{-1}(5,\bar{12}) - \Gamma(5,6,\bar{11},\bar{12}) \right) \\
&\quad \times \left. \left[\frac{\delta}{\delta \phi(\bar{11},\bar{12})} \frac{\delta}{\delta \phi(\bar{9},\bar{10})} \mathbf{G}(\bar{7},\bar{8};\phi) \right]_{\phi=0} \mathbf{G}^{-1}(\bar{8},2) \right)
\end{aligned} \tag{A.12}$$

En annexe C, on utilise ces résultats afin de proposer une façon d'ajouter la cohérence entre les propriétés à une et à deux particules.

ANNEXE B

Transformation de Legendre

B.1 Définition

Avant de voir l'application de la transformation de Legendre, voyons la définition de cette transformation. La description présentée ici s'inspire de celle retrouvée dans *Encyclopædia of Mathematics* [38].

Supposons que l'on connaisse une fonction $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ régulière sur l'ensemble ouvert A d'un espace normé X . On peut considérer cette fonction comme une surface dans l'espace. La surface étant alors décrite par l'ensemble des points $(x, f(x))$ où $x \in A$.

La possibilité d'évaluer la transformation de Legendre, f^* , de la fonction f repose sur l'existence d'une seconde description de la surface. Celle-ci correspond à la famille des plans tangents à la surface. On doit alors faire appel à une nouvelle variable servant à paramétriser les plans tangents, $x^* \in B$ et à une fonction tangente affine pour la description de ces plans, $f^*(x^*)$. L'ensemble ouvert B appartient à un espace normé X^* . L'équivalence entre les deux descriptions provient de l'existence d'une application biunivoque de A sur B . Cette application permet de définir la transformation de Legendre. Supposant que f est une fonction sur \mathbb{R}^n et que le déterminant $\det(\partial^2 f / \partial x_i \partial x_j)$ est finie sur A , la transformation de Legendre sera donnée par les formules suivantes:

$$f'(x) = x^*, \quad f^*(x^*) = \langle x, f'(x) \rangle - f(x)$$

où

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i, \quad f'(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

Ainsi, lorsqu'on s'intéresse à la transformation de Legendre d'une fonction, il faut connaître la dérivée de Fréchet correspondante $f'(x)$ et la définition de la

norme dans l'espace d'intérêt. La transformation de Legendre introduit donc une nouvelle variable prenant des valeurs dans un ensemble B qui peut être relié de façon biunivoque à l'ensemble A des valeurs admises par la variable x .

B.2 Transformation de Legendre de la fonction de partition

Dans notre cas, nous nous intéressons à la transformation de Legendre de la fonction de partition $Z[\phi]$. Par rapport à la description de la section précédente nous pouvons identifier f au logarithme de la fonction de partition $\ln Z[\phi]$ et la variable x au champ ϕ . L'opération $\langle x, y \rangle$ est quant à elle remplacée par la trace $\text{Tr}\{xy\}$ telle qu'introduite en mécanique statistique quantique. La dérivée de Fréchet de la fonction de partition correspond à la partie hors diagonale de la fonction de Green $\mathbf{G}_{\text{HD}}(\phi)$.

Nous devons donc trouver une transformation qui permet d'appliquer l'ensemble ouvert des valeurs admissibles par la variable ϕ de façon biunivoque sur un ensemble ouvert des valeurs d'une variable \mathcal{G} . Utilisant la définition présentée à la section précédente nous pouvons introduire la transformation de Legendre que nous avons présentée à la section 2.2:

$$W[\mathcal{G}] = \left(-\ln Z[\Phi] - \text{Tr}(\mathbf{G}_{\text{HD}}(\bar{1}, \bar{2}; \phi)\phi(\bar{2}, \bar{1})) \right)_{\mathbf{G}_{\text{HD}}[\Phi]=\mathcal{G}}$$

où

$$\mathbf{G}_{\text{HD}}(1, 2; \phi) = -\frac{\delta \ln Z[\phi]}{\delta \phi(2, 1)}$$

Tout comme il nous a été possible de montrer que la partie hors diagonale de la fonction de Green pouvait être obtenue par la variation de la fonction de partition par rapport au champ externe ϕ , eq.(2.7), la partie hors diagonale de la self-énergie pourra être générée par la variation d'une fonctionnelle par rapport au champ introduit par la transformée de Legendre, \mathcal{G} . Nous avons montré (2.22) que:

$$\frac{\partial W[\mathcal{G}]}{\partial \mathcal{G}(2, 1)} = -\Phi(1, 2; \mathcal{G})$$

Or, de l'équation de Dyson, (2.12), nous avons:

$$\Phi(1, 2; \mathcal{G}) = -\mathbf{G}_{\text{HD}}^{-1}(1, 2; \mathcal{G}) - \Sigma_{\text{HD}}(1, 2; \mathcal{G})$$

Si l'on considère l'approximation du premier ordre en terme anormal, on obtient la relation suivante:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\text{HD}}^{-1}(1, 2; \mathcal{G}) &= -\mathbf{G}^{-1}(1, \bar{3})\mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4})\mathbf{G}^{-1}(\bar{4}, 2) \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(2, 1)} \text{Tr} \left(\mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4})\mathbf{G}^{-1}(\bar{4}, \bar{5})\mathcal{G}(\bar{5}, \bar{6})\mathbf{G}^{-1}(\bar{6}, \bar{3}) \right) \end{aligned}$$

Dès lors, on peut montrer qu'au premier ordre en terme anormal les termes hors diagonaux de la self-énergie seront donnés par:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{HD}}(1, 2; \mathcal{G}) &= \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(2, 1)} \left(W[\mathcal{G}] + \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathcal{G}(\bar{3}, \bar{4})\mathbf{G}^{-1}(\bar{4}, \bar{5})\mathcal{G}(\bar{5}, \bar{6})\mathbf{G}^{-1}(\bar{6}, \bar{3})) \right) \\ &\equiv \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(2, 1)} \Theta[\mathcal{G}] \end{aligned}$$

Ainsi les termes diagonaux du vertex irréductible sont donnés par la dérivation seconde de cette même fonctionnelle par rapport aux termes anormaux de la fonction de Green.

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) = \left[\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(2, 1)} \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(4, 3)} \Theta[\mathcal{G}] \right]_{\mathcal{G}=0}$$

ANNEXE C

Autocohérence

C.1 Comparaison à un hamiltonien avec interaction non-locale

Une critique importante de notre approche vient du fait que celle-ci ne présente pas d'autocohérence entre les propriétés à une particule et les propriétés à deux particules. Ainsi, la self-énergie au deuxième niveau d'approximation est différente de celle au premier niveau. Afin d'ajouter de l'autocohérence dans notre approximation il faudrait pouvoir utiliser la self-énergie obtenue au deuxième niveau pour réévaluer le vertex et la fonction de corrélation qui pourraient alors être utilisés pour passer au niveau suivant et ainsi de suite, itérer jusqu'à convergence de l'approximation.

Dans cette annexe, nous proposons une méthode pour ajouter l'autocohérence. Le fait qu'au deuxième niveau la self-énergie est dynamique et délocalisé peut sembler compliquer les choses si l'on veut garder une certaine cohérence. Cependant, avant de débiter les calculs, on peut se guider en étudiant des relations simples mais appliquées à un hamiltonien un peu plus complexe que celui de Hubbard. Nous allons considérer un hamiltonien avec interaction non-locale. Ce hamiltonien présente deux termes. Le premier étant le terme d'énergie cinétique pour les électrons. Le deuxième pourrait être considéré comme un terme d'énergie cinétique pour les paires de Cooper.

$$\mathcal{H} = -\psi^\dagger(\bar{1})t(\bar{1}, \bar{2})\psi(\bar{2}) + \Delta^\dagger(\bar{1})V(\bar{1}, \bar{2})\Delta(\bar{2})$$

Pour un hamiltonien de ce type, la self-énergie au premier ordre en interaction sera donnée par:

$$\Sigma(1, 2; \mathcal{G}) \approx V(1, \bar{3})\mathcal{G}(\bar{3}, \bar{3})\delta(1 - 2) + \sigma_x V(1, 2)\mathbf{G}(1, 2)\sigma_x + O(\mathcal{G}^2)$$

où la matrice d'interaction est définie par:

$$\mathbf{V}(1, 2) = \begin{pmatrix} V(1, 2) & 0 \\ 0 & -V(2, 1) \end{pmatrix}$$

Il semble donc possible d'approximer la renormalisation du vertex de façon telle que la partie diagonale de la self-énergie soit non-locale tandis que la partie hors diagonale demeure locale. Une telle approximation donnerait un vertex dont l'élément (1, 1) pourrait être approximé par:

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) \approx \sigma_x V(3, 1) \sigma_x \delta(1 - 2) \delta(3 - 4)$$

Utilisant une telle approximation avec l'équation de Bethe-Salpeter (2.24), on obtient une fonction de corrélation de paires de forme RPA mais avec un vertex dynamique et délocalisé au dénominateur.

$$\chi(\vec{q}) = \frac{\chi_0(\vec{q})}{1 + \Gamma(\vec{q})\chi_0(\vec{q})}$$

C.2 Équation autocohérente pour le vertex irréductible

Voyons maintenant comment il serait possible d'ajouter l'autocohérence. On considère que l'on a obtenu notre première approximation pour le vertex et la fonction de corrélation: $\Gamma^{(1)}$ et $\chi^{(1)}$ donné respectivement par les relations (2.30), et (2.33). Ainsi, utilisant l'équation du mouvement et l'équation de Bethe-Salpeter nous avons obtenu $\Sigma^{(2)}$ et $\mathbf{G}^{(2)}$ donné par (2.37) et (2.38). On voit de par sa définition que pour réévaluer Γ , il nous faudrait connaître $\Sigma^{(2)}$ au premier ordre en \mathcal{G} . Pour y arriver nous pouvons procéder de la même façon que pour le terme indépendant de \mathcal{G} : en utilisant l'équation du mouvement (2.10).

$$\begin{aligned} \Sigma(1, 2; \mathcal{G}) = & U\mathcal{G}(1, 1)\delta(1 - 2) - U\chi(1, 1, 1^\pm, \bar{3})\mathbf{G}^{-1}(\bar{3}, \bar{4})\mathcal{G}(\bar{4}, \bar{5})\mathbf{G}^{-1}(\bar{5}, 2) \\ & + U\chi(1, 1, 1^\pm, \bar{3}; \mathcal{G})\mathbf{G}^{-1}(\bar{3}, 2) + O(\mathcal{G}^2) \end{aligned} \quad (C.1)$$

Pour estimer le terme $\chi(\mathcal{G})$ à l'ordre linéaire en \mathcal{G} , nous utilisons les développements du deuxième ordre pour $\mathbf{G}(\mathcal{G})$ et $\mathbf{G}^{-1}(\mathcal{G})$ que nous avons

présentés en annexe A. Utilisant le fait que les termes du deuxième ordre doivent s'annuler du côté gauche de l'identité suivante:

$$\mathbf{G}^{-1}(1, \bar{3}; \mathcal{G})\mathbf{G}(\bar{3}, 2; \mathcal{G}) = \delta(1 - 2)$$

on peut montrer que:

$$\begin{aligned} \chi(1, 2, 3, 4; \mathcal{G}) &= \chi(1, 2, 3, 4) - \mathcal{G}(1, 4)\mathbf{G}(3, 2) \\ &+ \chi(1, 2, \bar{5}, \bar{6}) \left(\Gamma(\bar{6}, \bar{5}, \bar{7}, \bar{8})\mathcal{G}(\bar{8}, 4) + \Gamma_{\text{HD}}(\bar{6}, \bar{5}, \bar{7}, \bar{8}; \mathcal{G})\mathbf{G}(\bar{8}, 4) \right) \mathbf{G}(3, \bar{7}) \\ &+ O(\mathcal{G}^2) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Incorporant (C.2) dans (C.1), nous obtenons:

$$\Sigma_{\text{HD}}(1, 2; \mathcal{G}) = U\delta(1 - 2)\mathcal{G}(1, 1) + U\chi(1, 1, \bar{5}, \bar{6})\Gamma_{\text{HD}}(\bar{6}, \bar{5}, \bar{7}, 2; \mathcal{G})\mathbf{G}(1, \bar{7}) + O(\mathcal{G}^3) \quad (\text{C.3})$$

La définition du vertex irréductible (2.23), nous permet en combinant (C.3) et (A.10) d'obtenir une relation déterminant la partie diagonale du vertex en l'absence de champ externe en fonction d'un vertex à trois particules:

$$\begin{aligned} \Gamma(1, 2, 3, 4) &= U\delta(1 - 2)\delta(1 - 3)\delta(1 - 4) \\ &+ U\mathbf{G}(3, \bar{7})\sigma_x\chi(3, 3, \bar{5}, \bar{6})\sigma_x \left[\frac{\delta}{\delta\mathcal{G}(2, 1)} \frac{\delta}{\delta\mathcal{G}(\bar{5}, \bar{6})} \Sigma(\bar{7}, 4, \mathcal{G}) \right]_{\mathcal{G}=0} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Notre schéma d'approximation pourrait donc être développé de la façon suivante: on approxime la self-énergie au deuxième ordre en \mathcal{G} . Partant de cette approximation on évalue tel que présenté au chapitre 2, $\Gamma^{(1)}$, $\chi^{(1)}$, $\Sigma^{(1)}$ et $G^{(1)}$. On y ajoute le calcul de la dérivée seconde de la self-énergie. Étant donné que cette dernière correspond à un vertex à trois particules, on pourrait garder cette quantité fixée et assurer l'autocohérence entre les propriétés à une et à deux particules en utilisant les relations de Dyson, eq.(2.12), notre expression exacte pour la self-énergie, eq.(2.37), l'équation de Bethe-Salpeter, eq.(2.24), et l'expression du vertex irréductible en fonction de vertex plus complexe, eq.(C.4). Cette façon de procéder s'apparente à la méthode hiérarchique proposée par Kadanoff et Martin [53] qui consiste à utiliser les équations du mouvement pour

les fonctions de corrélation à une et à deux particules qui permettent de faire le lien entre elles et avec la fonction de corrélation à trois particules. Par la suite, utilisant une approximation pour la fonction de corrélation à trois particules sous forme d'une combinaison de fonctions à une et à deux particules, ils proposent une solution autocohérente pour les fonctions de Green à une et deux particules.

C.3 Suggestion pour l'ajout de l'autocohérence

Dans cette dernière section, nous proposons une approximation pour le vertex à trois particules. Il est possible de développer une approximation qui respecte l'esprit de la technique présentée au chapitre deux. Nous utilisons la relation (A.12). Encore une fois, on introduit une matrice, Λ , qui sera déterminée par les corrélations locales:

$$\begin{aligned}
UG(1, \bar{7})\chi(3, 4, \bar{9}, \bar{10}) & \left[\frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{9}, \bar{10})} \frac{\delta}{\delta \mathcal{G}(\bar{5}, \bar{6})} \Sigma(\bar{7}, \bar{8}; \mathcal{G}) \right]_{\mathcal{G}=0} \sigma_x \chi(1, 1, \bar{5}, \bar{6}) \sigma_x \mathbf{G}(\bar{8}, 2) \\
& = -\sigma_x \Sigma(1, \bar{5}) \sigma_x \chi(3, 4, \bar{5}, 2) + U \left[\frac{\delta}{\delta \phi(4, 3)} \frac{\delta}{\delta \phi(1, 1)} \mathbf{G}(1^\mp, 2; \phi) \right]_{\phi=0} \\
& \approx -U \Lambda \sigma_x \mathbf{G}(1, \bar{5}) \sigma_x \mathbf{G}(\bar{6}, 1) \chi(3, 4, \bar{8}, \bar{7}) \Gamma(\bar{7}, \bar{8}, \bar{5}, \bar{6}) \mathbf{G}(1, 2)
\end{aligned} \tag{C.5}$$

Pour justifier cette approximation, on peut considérer l'équation du mouvement pour la fonction de corrélation à deux particules:

$$\begin{aligned}
\sigma_x \mathbf{G}_0^{-1}(1, \bar{5}) \sigma_x \chi(3, 4, \bar{5}, 2) & = -\delta(1-4) \mathbf{G}(3, 2) + U \mathbf{G}(1, 2) \chi(3, 4, 1, 1) \\
& + U \left[\frac{\delta}{\delta \phi(4, 3)} \frac{\delta}{\delta \phi(1, 1)} \mathbf{G}(1^\mp, 2; \phi) \right]_{\phi=0}
\end{aligned}$$

On voit apparaître dans cette relation une fonction de Green à trois particules via le terme de dérivation. On propose donc une approximation pour cette fonction qui permet de résoudre l'équation du mouvement à partir des quantités introduites précédemment.

$$\begin{aligned}
U \left[\frac{\delta}{\delta \phi(4, 3)} \frac{\delta}{\delta \phi(1, 1)} \mathbf{G}(1^\mp, 2; \phi) \right]_{\phi=0} & \approx \sigma_x \Sigma(1, \bar{5}) \sigma_x \chi(3, 4, \bar{5}, 2) - U \chi(3, 4, 1, 1) \mathbf{G}(1, 2) \\
& - U \sigma_x \mathbf{G}(1, 4) \sigma_x \mathbf{G}(3, 1) \mathbf{G}(1, 2)
\end{aligned} \tag{C.6}$$

On peut vérifier qu'au premier ordre en U l'égalité entre les deux côté est vérifiée de façon exacte. Ainsi, en introduisant l'approximation (C.6) dans la première ligne de (C.5) on obtient la deuxième ligne de cette même équation où on a ajouté le facteur multiplicatif Λ . Combinant les relations (C.4) et (C.5), il devient alors possible d'approximer le vertex irréductible.

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) \approx U\delta(1-2)\delta(1-3)\delta(1-4) - U\Lambda\delta(3-4)\sigma_x \mathbf{G}(3, \bar{5})\sigma_x \mathbf{G}(\bar{6}, 3)\Gamma(1, 2, \bar{5}, \bar{6}) \quad (C.7)$$

La relation peut se simplifier si l'on considère en première approximation le résultat obtenu au chapitre deux et que l'on utilise la relation (C.7) afin d'améliorer l'approximation.

$$\Gamma^{(2)}(1, 2, 3, 4) = U\delta(1-2)\delta(1-3)\delta(1-4) - U\Lambda\delta(1-2)\delta(3-4)\sigma_x \mathbf{G}^{(1)}(3, 1)\sigma_x \mathbf{G}^{(1)}(1, 3)\Gamma^{(1)}$$

Supposant que les itérations permettent de converger vers une solution unique, on obtiendrait alors un vertex à deux points, $\Gamma(1, 2, 3, 4) = \Gamma(1, 2, 3, 4)\delta(1-2)\delta(3-4) \equiv \Gamma^*(1, 3)\delta(1-2)\delta(3-4)$, correspondant à la solution de la relation:

$$\Gamma^*(1, 2) = U\delta(1-2) - U\Lambda\sigma_x \mathbf{G}^*(2, \bar{3})\sigma_x \mathbf{G}^*(\bar{3}, 2)\Gamma^*(1, \bar{3})$$

On voit que l'on obtient une forme RPA pour la renormalisation du vertex. Étant donné que le coefficient devant le vertex droit est négatif dans l'espace de Fourier, on remarque que le vertex sera inférieur, en valeur absolue, à l'interaction nue. De plus, il est facile de montrer que le comportement aux grandes fréquences de ce vertex est identique au résultat exact: $\lim_{q_n \rightarrow \infty} \Gamma(\mathbf{q}, iq_n) \rightarrow U$. Il ne reste ainsi qu'à déterminer le facteur multiplicatif Λ .

Considérant la relation où nous avons introduit le facteur Λ . Nous pouvons la réécrire sous la forme:

$$\Lambda \left(\chi(3, 4, 1, 1) - \chi_0(3, 4, 1, 1) \right) \mathbf{G}(1, 2) \approx \sigma_x \frac{\Sigma(1, \bar{5})}{U} \sigma_x \chi(3, 4, \bar{5}, 2) + \left[\frac{\delta}{\delta\phi(4, 3)} \frac{\delta}{\delta\phi(1, 1)} \mathbf{G}(1^\pm, 2; \phi) \right]_{\phi=0} \quad (C.8)$$

où

$$\chi_0(3, 4, 1, 1) = -\sigma_x \mathbf{G}(1, 4) \sigma_x \mathbf{G}(3, 1)$$

Le deuxième terme du côté droit de l'égalité est assez simple à évaluer de façon locale. Dans un premier temps, on peut écrire ce terme sous la forme suivante:

$$\left[\frac{\delta}{\delta\phi(4, 3)} \frac{\delta}{\delta\phi(1, 1)} \mathbf{G}(1^\pm, 2; \phi) \right]_{\phi=0} = \chi(3, 4, 1, 1) \mathbf{G}(1, 2) + \left(\begin{array}{c} \langle \psi_\uparrow(3) \psi_\downarrow(4) \psi_\downarrow^\dagger(1) \psi_\uparrow^\dagger(1) \psi_\uparrow(1^-) \psi_\uparrow^\dagger(2) \rangle \\ 0 \end{array} \quad \begin{array}{c} 0 \\ \langle \psi_\downarrow^\dagger(3) \psi_\uparrow^\dagger(4) \psi_\uparrow(1) \psi_\downarrow(1) \psi_\downarrow^\dagger(1^+) \psi_\downarrow(2) \rangle \end{array} \right)$$

Le premier terme du côté droit de l'équation (C.8) est plus compliqué. De façon locale, on peut trouver une expression simple en utilisant le fait que la self-énergie peut s'écrire:

$$\Sigma(1, 2) = -U \mathbf{G}^{-1}(1, \bar{3}) \sigma_x \chi(2, 2, \bar{3}, 2^\pm) \sigma_x$$

Comme présenté au chapitre 2 lors du calcul de la self-énergie, équation (2.25) et (2.28), nous regardons la contribution provenant des différents termes locaux pour déterminer Λ de l'équation (C.8). Il faut faire attention car plusieurs ordonnances sont possibles: $3 = 1^\pm$, $2 = 1^\pm$, $3 = 2^\pm$ et $4 = 1^\pm$. Il y a donc 12 termes différents: 6 pour l'ordonnance respective des indices 1, 2 et 3 multiplié par un facteur deux provenant de l'ordonnance des indices 1 et 4. Dès lors, on obtient l'approximation:

$$\Lambda(\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - \frac{n^2}{4}) = \frac{1}{6} \left(\frac{n^2 - 4\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle + \frac{3}{4}(n^2 - 4n\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle)}{n} + \frac{(2 + 3n)\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - 5n^2/4}{2 - n} \right) \mathbb{I} + \frac{1}{4} \sigma_x \frac{\Sigma(1, \bar{5})}{U} \mathbf{G}(\bar{5}, \bar{6}) \left(\frac{\Sigma(\bar{6}, 1^+)}{U} + \frac{\Sigma(\bar{6}, 1^-)}{U} \right) \left(\frac{2}{n} - \frac{2}{2 - n} \right) \sigma_x \sigma_z$$

où \mathbb{I} est la matrice identité. En fait, il serait sans doute plus juste de présenter ce résultat comme étant un ansatz plutôt qu'une approximation.

ANNEXE D

Prolongement analytique

Comme nous l'avons vu au dernier chapitre, il est possible de déterminer le poids spectral à partir de la connaissance de la fonction de Green en temps imaginaire. On peut établir un lien entre ces deux quantités en utilisant la représentation de Lehmann [108]. La relation ainsi obtenue est appelée représentation spectrale de la fonction de Green en temps imaginaire. Celle-ci est donnée par la relation (D.1).

$$G(\mathbf{k}, \tau) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} A(\mathbf{k}, \omega) \quad (D.1)$$

Son domaine de validité est restreint à $\tau \in (0, \beta)$ (L'utilisation de "(" au lieu de "[" signifie que la borne n'est pas incluse dans le domaine).

Donc, nous voulons déterminer le poids spectral, $A(\omega)$, pour un ensemble de valeurs de ω en utilisant la connaissance de la fonction de Green, $G(\tau)$ pour un ensemble de valeurs de τ . Il est à noter que pour des données Monte Carlo, notre connaissance de la fonction de Green n'est que statistique et qu'à chaque valeur de $G(\tau)$ nous devons associer une incertitude, $\sigma(\tau)$.

Le problème auquel nous faisons face est que l'équation (D.1) n'est pas réversible. Plus précisément on qualifiera ce problème comme étant "mal posé". Dans la section qui suit, nous détaillons les différentes raisons pour laquelle ce problème est dit mal posé. Nous mentionnons comment chacun de ces problèmes pourrait être réglé. Dans la seconde section nous décrivons la fonctionnelle d'entropie introduite afin de régulariser le problème. Enfin, dans la dernière section, nous proposons différents algorithmes permettant de déterminer le poids spectral. Une comparaison de deux de ces algorithmes a été présentée par Touchette et Poulin [106].

D.1 Problèmes mathématiquement mal posés

Baym et Mermin [9] ont montré que si l'on connaît la fonction de Green en temps imaginaire sur toute la plage $(0, \beta)$ alors il n'existe qu'une seule fonction $A(\omega)$ permettant de satisfaire la relation (D.1) et ayant les propriétés d'un poids spectral [108]. Pour le cas qui nous intéresse, on peut dire que nous n'avons pas suffisamment d'information pour déterminer sans équivoque le poids spectral. Ce manque d'information provient de différentes raisons: premièrement, la fonction de Green n'a été évaluée qu'en un certain nombre de points en temps imaginaire, $\tau_i (i \in [1, N])$; deuxièmement, nos données sont caractérisées par une incertitude statistique.

Tel que mentionné par Schäfer et Sternin [97], il existe plusieurs façons de régulariser le problème. D'abord, la discrétisation des fréquences permet de réduire le nombre de solutions possibles. Cependant, ça n'aurait pas de sens de réduire le nombre de fréquences à un point tel que la solution soit unique car la solution n'aurait probablement pas une allure physiquement acceptable. De plus, elle ne respecterait peut être pas certaines propriétés des poids spectraux telle la positivité. La discrétisation des fréquences ramène le problème à la solution de la relation:

$$G(\tau_i) = \sum_{j=1}^M K(\tau_i, \omega_j) A(\omega_j), \quad i \in [1, N] \quad (D.2)$$

où on a introduit le noyau

$$K(\tau, \omega) = \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \quad (D.3)$$

Sous forme matricielle, la relation (D.2) prend la forme simple $G = KA$. Ainsi la solution du problème devient $A = K^{-1}G$. Cependant, comme nous avons mentionné, lors de la discrétisation on doit garder un nombre de fréquences plus importants que le nombre de données en temps imaginaire, $M > N$. Ainsi, la matrice K est une matrice rectangulaire et son inverse n'est pas unique.

Afin de déterminer une solution unique, on doit faire appel à d'autres méthodes de régularisation comme la maximisation d'entropie. Cette méthode

consiste à choisir parmi les solutions celle qui contient le moins d'information possible. Par information contenue dans une fonction, on parle du comportement de cette fonction. Plus une fonction est monotone, moins on peut en tirer d'information, le cas limite étant la fonction constante. Pour quantifier cette propriété on utilise la fonctionnelle d'entropie, $S(A)$. Celle-ci mesure l'absence d'information contenue dans une distribution.

Le choix de la méthode de maximisation d'entropie repose sur le fait qu'étant donné que le poids spectral est évalué en un nombre de points plus élevé, celui-ci a la capacité de contenir plus d'information que ne peut en contenir la fonction de Green. Ce qui n'a pas de sens car on utilise la fonction de Green afin de déterminer le poids spectral, ainsi l'information contenue dans le poids spectral devrait être limitée par l'information contenue dans la fonction de Green et l'information que l'on a sur les propriétés des poids spectraux. Ainsi, on cherchera parmi les poids spectraux qui satisfont la relation (D.2) celui qui maximise la fonctionnelle d'entropie $S(A)$.

Il est à noter que l'imposition de certaines conditions physiques pour le poids spectral peut réduire de façon considérable le nombre de solutions possibles. Par exemple, on peut montrer que le fait que le poids spectral soit positif en tout point, impose que la fonction de Green ait un maximum unique dans l'intervalle $(0, \beta)$ et un comportement monotone de part et d'autre de ce maximum. La présence de bruit dans nos données MCQ peut faire en sorte que la fonction de Green ne respecte pas cette propriété (Ce problème sera plus accentué pour des valeurs de $\Delta\tau$ plus faibles). Il faut alors ajouter parmi l'ensemble des solutions admises, celles qui ne permettent pas de satisfaire de façon exacte la relation (D.2). Une façon d'y parvenir consiste à faire une décomposition en valeurs singulières du noyau, eq. (D.3), et de tronquer les valeurs propres les plus faibles. On obtient alors un noyau qui permet une plus grande indépendance du poids spectral par rapport à de petites fluctuations de la fonction de Green.

La décomposition en valeurs singulières du noyau n'est pas l'unique méthode permettant d'élargir le nombre de solutions. On peut également élargir

l'ensemble des solutions à toutes les fonctions possibles respectant certaines conditions physiques et à chercher parmi ces solutions, celle qui permet de minimiser

$$\chi^2(A, G) = \sum_i \frac{\left(G(\tau_i) - \sum_j K(\tau_i, \omega_j) A(\omega_j)\right)^2}{\sigma^2(\tau_i)}$$

On fait alors face au problème de minimisation des moindres carrés tout en maximisant la fonctionnelle d'entropie. En faisant appel aux statistiques bayésiennes [93], on peut ramener la détermination du poids spectral à la recherche de la fonction permettant de maximiser la probabilité:

$$P(A|G, \alpha) = e^{-\frac{1}{2}\chi^2(A, G) + \alpha S(A)} \quad (D.4)$$

Le facteur α a été introduit afin de donner plus ou moins d'importance au terme d'entropie par rapport au terme de moindres carrés. Le choix d'une valeur pour ce facteur est assez complexe et nous référons le lecteur à l'article de Jarrell et Gubernatis [52].

D.2 Fonctionnelle d'entropie

Pour le choix de la fonctionnelle d'entropie plusieurs auteurs proposent la fonctionnelle d'entropie introduite par Jaynes (voir [49]) qui est mesurée par rapport à un modèle par défaut, $m(\omega)$.

$$S(A|m) = \int d\omega \left(A(\omega) - m(\omega) - A(\omega) \ln(A(\omega)/m(\omega)) \right)$$

Le choix de cette fonctionnelle vient de l'entropie conditionnelle d'une distribution continue. Étant donné que le poids spectral n'a pas une normalisation assurée, on ajoute à cette entropie conditionnelle le terme $A - m$ qui fait en sorte que la normalisation de A devrait être aussi rapprochée que possible de celle du modèle par défaut. On peut vérifier que notre entropie a un maximum unique donnée par $A = m$ et qu'elle respecte la propriété de convexité de l'entropie. Pour

le démontrer, on suppose que le poids spectral est une quantité positive en tout point. Il est à noter que cette entropie donne l'entropie de la distribution A mesurée par rapport à celle de m et sera donc négative pour toute fonction A et nulle pour $A = m$. Le modèle par défaut doit contenir le moins d'information possible, c'est pourquoi on choisit $m(\omega) = m$. On peut vérifier qu'en général, le terme en χ^2 dans (D.4) est dominant pour la maximisation de la probabilité (D.4) et qu'un changement du modèle par défaut ou de l'entropie a peu d'effet sur le poids spectral obtenu.

D.3 Algorithme pour la maximisation d'entropie

Parmi les algorithmes introduits pour trouver le minimum de l'équation (D.4), on mentionne généralement les algorithmes de Bryan [17] et de Meshkov et Berkov [76]. Ces deux algorithmes sont deux méthodes différentes pour la recherche du maximum de l'équation (D.4). Il est à noter que ces deux méthodes donnent des résultats quelques peu différents [106]. Pour l'étude du poids spectral dans cette thèse notre choix s'est porté sur l'algorithme de Bryan, car cet algorithme s'est avéré plus rapide que celui de Meshkov. On a toutefois vérifié que les résultats obtenus par chacun des algorithmes ne sont pas très différents de façon quantitative aussi bien que de façon qualitative. Nous avons également développé un nouvel algorithme donnant des résultats sensiblement identiques à la méthode de Bryan. L'avantage de ce nouvel algorithme permet de séparer les différents problèmes reliés à la technique de prolongement analytique et ainsi de faire ressortir l'effet de la précision des données. Malgré que celui-ci ne fut pas utilisé pour les résultats présentés au troisième chapitre, nous tenons à présenter ce nouvel algorithme car nous pouvons ainsi détailler les différents éléments des techniques de régularisation.

S'inspirant des travaux de Geman et Geman [41], le nouvel algorithme vise à chercher parmi les solutions de l'équation (D.2), celle qui maximise l'entropie. La difficulté dans la recherche du maximum de la probabilité (D.4), vient de la présence de minimum locaux dans la partie provenant des moindres carrés, χ^2 .

Cependant, le terme d'entropie est parfaitement convexe. C'est pourquoi notre algorithme consiste à considérer comme point de départ une valeur de α très élevée pour ainsi n'accorder que peu d'importance au χ^2 . Ce terme ne devrait induire qu'un petit déplacement dans la position du maximum. Trouvant la position de ce maximum, on change notre modèle par défaut, on abaisse légèrement la valeur de α et on cherche la nouvelle position du maximum de la probabilité. Ainsi, on peut introduire peu à peu dans le poids spectral l'information contenue dans la fonction de Green. Interprétant le paramètre α comme une température que l'on abaisse, cette approche correspond à une méthode de recuit simulé. Une caractéristique importante pour l'utilisation de cette méthode vient du fait que la fonctionnelle d'entropie a un comportement convexe en fonction du poids spectral [7].

Voici plus en détail le fonctionnement de la méthode. Initialement, on considère une valeur de α très élevée et on cherche la fonction A maximisant

$$P_0(A|G, \alpha) = \exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2(A, G) + \alpha_0 S(A, m)\right)$$

Le maximum de l'entropie est à $A = m$. Le terme α étant important, la solution au problème de maximisation devrait être tout près du point $A = m$ mais légèrement déplacée dû à la présence du terme de moindres carrés, χ^2 . Appelons cette solution A_1 . On peut dire que le χ^2 ajoute dans le poids spectral une partie de l'information contenue dans la fonction de Green. On abaisse alors la valeur de α et on cherche alors la fonction A qui maximise

$$P_1(A|G, \alpha) = \exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2(A, G) + \alpha_1 S(A, A_1)\right)$$

On a ainsi encore une entropie convexe mais avec un minimum déplacé à $A = A_1$. Le choix d'abaisser la valeur de α vient du fait que le nouveau modèle par défaut, A_1 , contient plus d'information que n'en contenait m . Afin d'aller chercher encore une certaine quantité d'information, on se doit donc d'abaisser la valeur de α . On itère ainsi jusqu'à convergence de la fonction A vers une solution $A_n \simeq A_{n-1}$.

Cette méthode semble donner des résultats concluants. Cependant, il reste à vérifier que la solution est unique et n'a pas de comportement singulier par rapport au choix du point de départ. Il reste aussi à déterminer l'évolution optimale pour les valeurs du paramètre α . Typiquement, nous utilisons comme point de départ $\alpha_0 = \frac{1}{2}\chi^2(m, G)$, puis à la première itération $\alpha_1 = \frac{1}{2}\chi^2(A_1, G)$ et ainsi de suite.

Le problème de l'incertitude statistique est tenu en compte par le fait que nous utilisons une décomposition en valeurs singulières du noyau et que nous tronquons les valeurs propres les plus petites. Pour décrire cette procédure nous pouvons utiliser la notation matricielle où nous avons N valeurs de τ et supposer que notre discrétisation des fréquences conserve $M > N$ points en fréquence. Ainsi, A est un vecteur de dimension M , G est un vecteur de dimension N et le noyau, K , est une matrice de dimension $N \times M$. On procède par la diagonalisation en valeurs singulières du noyau:

$$K = Q_1 \Sigma Q_2$$

La matrice Σ est une matrice rectangulaire $n \times M$. Seules les composantes le long de la diagonale données par les points $(1, 1)$ à (N, N) sont non-nulles. Les dernières composantes étant petites, elles représentent une forte dépendance du poids spectral sur de petites variations de la fonction de Green. C'est pourquoi il est approprié de tronquer la matrice Σ en remplaçant ces derniers éléments par des zéros. On note la matrice tronquée par Σ_s et le nouveau noyau par $K_s = Q_1 \Sigma_s Q_2$. Cette modification du noyau augmente le nombre de poids spectraux permettant de satisfaire la représentation spectrale (D.2).

BIBLIOGRAPHIE

- [1] A. A. Abrikosov et al., *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Pergamon, Elmsford, N.Y. (1965).
- [2] S. Allen et al., Phys. Rev. Lett. **83**, pp. 4129-4132 (1999).
- [3] S. Allen et al., en préparation.
- [4] P. W. Anderson, Phys. Rev. **112**, pp. 1900-1916 (1958). Aussi disponible dans *The Many-Body Problem*, D. Pines.
- [5] F. Aryasetiawan et O. Gunnarsson, Rep. Prog. Phys. **61**, pp. 237-312 (1998); L. Steinbeck et al., Comp. Phys. Comm. **125**, pp. 105-118 (2000).
- [6] R. Assaraf et M. Caffarel, Phys. Rev. Lett. **83**, pp. 4682-4685 (1999).
- [7] H. Attouch, SIAM J. Optimization **6**, pp. 769-806 (1996).
- [8] J. Bardeen, L. Cooper et J. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, pp. 1175-1204 (1957). Aussi disponible dans *The Many-Body Problem*, D. Pines.
- [9] G. Baym et N. D. Mermin, J. Math. Phys. **2**, pp. 232-234 (1961).
- [10] G. Baym, L. P. Kadanoff, Phys. Rev. **124**, pp. 287-299 (1961).
- [11] G. Baym, Phys. Rev. **127**, pp. 1391-1401 (1962).
- [12] J. G. Bednorz et K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, pp. 189-193 (1986).
- [13] V. L. Berezinskiï, Sov. Phys. JETP **32**, p. 493 (1971); idem JETP **34**, p. 610 (1972).
- [14] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino et R. L. Sugar, Phys. Rev. **D24**, p. 2278 (1981).
- [15] N. N. Bogoliubov et al., *A New Method in the Theory of Superconductivity*, Academic of Sciences of USSR Press, Moscou, 1958, traduit en anglais par Consultants Bureau Inc, New-York, 1959.
- [16] C. Bourbonnais et L. G. Caron, Physica **B143**, p. 451 (1986); J. Sólyom, Adv. Phys. **28**, p. 201 (1979).
- [17] R. K. Bryan, *Solving oversampled data problems by maximum entropy*, dans *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, P. Fougères ed., p. 221 (1989).
- [18] N. Bulut et al., Phys. Rev. **B47**, pp. 2742-2753 (1993).
- [19] M. Capezzali, *Superconductivity in two dimensions*, thèse de doctorat, Institut de Physique, Université de Neuchâtel (1998).

- [20] M. Capezzali et al., cond-mat/9806211 publié dans *Physica B*; cond-mat/9809349 publié dans *Physica C*
- [21] S. Chakravarty et al., *Phys. Rev.* **B39**, pp. 2344-2371 (1989).
- [22] L. Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **66**, pp. 369-372 (1991).
- [23] R. Chitra et G. Kotliar, cond-mat/9911223
- [24] S. Coleman, *Comm. Math. Phys.* **59**, p. 259 (1973).
- [25] J. Corson et al., *Nature* **398**, pp. 221-223 (1999).
- [26] A. Cuccoli et al., *Phys. Rev.* **B52**, pp. 10221-10231 (1995); L. Capriotti et al., *Proceedings of NATO Adv. Research Workshop*, Trieste, Aug. 1996, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1997, pp. 397-404.
- [27] N. J. Curro et al., *Phys. Rev.* **B56**, pp. 877-885 (1997).
- [28] P. Dai et al., cond-mat/9712311.
- [29] A.-M. Daré, *Le modèle de Hubbard à faible densité et à proximité du demi-remplissage*, thèse de doctorat, Département de Physique, Université de Sherbrooke (1994).
- [30] A.-M. Daré et al., *Phys. Rev.* **B49**, pp. 4106-4118 (1994).
- [31] A.-M. Daré et al., *Phys. Rev.* **B53**, pp. 14236-14251 (1996).
- [32] J. J. Deisz et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, p. 1312 (1996); J. J. Deisz et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, pp. 373-376 (1998); D. W. Hess et al., cond-mat/9808267/
- [33] J. Demsar et al., cond-mat/9812079; cond-mat/9905026.
- [34] H. Ding et al., *Nature* **382**, pp. 51-54 (1996); A. G. Loeser et al., *Science* **273**, pp. 325-329 (1996).
- [35] C. De Dominicis et P. C. Martin, *J. Math. Phys.* **5**, 14 (1964); V. Janiš, cond-mat/9806118.
- [36] V. J. Emery in *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, J. T. Devreese et al. Eds., Plenum (1979).
- [37] V. J. Emery et S. A. Kivelson, *Nature* **374**, pp. 434-437 (1995); E. W. Carlson et al., cond-mat/9902077.
- [38] *Encycloædia of Mathematics*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1989).
- [39] H. Frahm et V. E. Korepin, *Phys. Rev.* **B42**, p. 10553 (1990); P. DiFrancesco et al., *Conformal Field Theory*, Springer-Verlag, New-York (1996).

- [40] **Lecture Notes on the Many-body Problem**, C. Fronsdal ed., Benjamin, N.Y. (1962).
- [41] R. M. Fye, *Phys. Rev.* **B33**, p. 6271 (1986).
- [42] D. Gamerman, *Markov chain Monte Carlo*, coll. Texts in Statistical Science, Chapman & Hall, London (1997).
- [43] S. Geman et D. Geman, *IEEE transactions on PAMI-6*, pp.721-741 (1984).
- [44] A. Georges et al., *Rev. Mod. Phys.* **68**, p. 13 (1996).
- [45] D. R. Hamann, *Phys. Rev.* **186**, p. 549 (1969); N. E. Bickers et S. R. White, *Phys. Rev.* **B43**, p. 8044 (1991).
- [46] J. M. Hammersley et D. C. Handscomb *Les Méthodes de Monte Carlo*, Dunod, Paris (1967).
- [47] R. Haussmann, *Z. Phys. B* **91**, pp.291-308 (1993); *Phys. Rev.* **B49**, pp. 12975-12983 (1994).
- [48] J. E. Hirsch, *Phys. Rev.* **B28**, pp. 4059-4061 (1983); *Phys. Rev.* **B31**, pp. 4403-4419 (1985).
- [49] P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, p. 383 (1967).
- [50] C. Huscroft et al., cond-mat/9910226; Th. Maier et al., cond-mat/0002352.
- [51] S. Ihara, *Information theory for continuous systems*, World Scientific, Singapore (1993).
- [52] M. Iwamatsu et Y. Okabe, *Physica A* **278**, pp. 414-427 (2000).
- [53] V. Janiš, *J. Phys. Cond. Mat.* **10**, pp. 2915-2932 (1998); *J. Phys. Cond. Mat.* **8**, p. L173 (1996); cond-mat/9810175; cond-mat/9904069.
- [54] M. Jarrell et J. E. Gubernatis, *Phys. Rep.* **269**, pp. 133-195 (1996); J. E. Gubernatis et al., *Phys. Rev.* **B44**, pp. 6011-6029 (1991); R. N. Silver et al., *Phys. Rev.* **B41**, pp. 2380-2389 (1990).
- [55] L. P. Kadanoff et P. C. Martin, *Phys. Rev.* **124**, pp. 670-697 (1961).
- [56] M. Y. Kagan et al., *Phys. Rev.* **B57**, pp. 5995-6002 (1998); cond-mat/9911337.
- [57] O. K. Kalashnikov, E. S. Fradkin, *Sov. Phys. JETP* **28**, pp. 317-325 (1969); A. Lonke, *J. Math. Phys.* **12**, pp. 2422-2438 (1971).
- [58] M. H. Kalos et P. A. Whitlock *Monte Carlo Methods*, John Wiley & Sons, New York (1986).
- [59] *Recent Developments in High Temperature Superconductivity*, J. Klanut et al. Eds, Springer-Verlag, LNP 475, Berlin (1996)

- [60] W. Kohn et J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **118**, pp.41-45 (1960).
- [61] J. M. Kosterlitz et D. J. Thouless, *J. Phys.* **C5**, p. L124 (1972); idem **C6**, p. 1181 (1973).
- [62] B. Kyung (non-publié).
- [63] F. Lemay (non-publié).
- [64] M. Letz et al., *J. Low Temp. Phys.* **117**, pp. 149-174 (1999); *J. Phys. Chem. Solids* **59**, pp. 1838-1840 (1998); *J. Phys. Cond. Mat.* **10**, pp. 6931-6952 (1998).
- [65] K. Levin et al., cond-mat/0003133; voir les références incluses.
- [66] W. von der Linden et al., *J. Phys. Cond. Mat.* **8**, pp. 3881-3888 (1996).
- [67] E. Y. Loh et al., *Phys. Rev.* **B41**, pp. 9301-9307 (1990).
- [68] V. M. Loktev et al., *Phase Fluctuations and Pseudogap Phenomena*, soumis à Elsevier preprint (1999). Voir les références incluses.
- [69] J. W. Loram et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, pp. 1740-1743 (1993).
- [70] J. M. Luttinger et J. C. Ward, *Phys. Rev.* **118**, pp. 1417-1427 (1960).
- [71] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **119**, pp. 1153-1163 (1960).
- [72] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **121**, pp. 942-949 (1961).
- [73] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, 2th edt (1990).
- [74] F. Mancini, cond-mat/9803276.
- [75] D. van der Marel et G. Rietveld, *Phys. Rev. Lett.* **69**, pp. 2575-2577 (1992).
- [76] P. C. Martin et J. Schwinger, *Phys. Rev.* **115**, pp. 1342-1373 (1959).
- [77] N. D. Mermin et H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, p. 1113 (1966).
- [78] S. V. Meshkov et D. V. Berkov, *Int. J. Mod. Phys.* **C5**, pp. 987-995 (1994).
- [79] C. P. Moca et al., cond-mat/9904197; J. P. Wallington et J. F. Annett, *Phys. Rev.* **B61**, pp. 1433-1445 (2000); L. S. Borkowski et C. A. R. Sá de Melo, cond-mat/9810370; P. Pierri et G. C. Strinati, cond-mat/9811166; E. Babaev et H. Kleinert, cond-mat/9804206; P. A. Sreeram et S. G. Mishra, cond-mat/9909181.
- [80] S. Moukouri et al., *Phys. Rev.* **B61**, pp. 7887-7892 (2000).
- [81] S. Moukouri, Rapport sur les techniques de prolongement analytique, Département de Physique, Université de Sherbrooke, (1998).

- [82] J. W. Negele et H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Frontiers in Physics, Addison-Wesley, New-York (1988).
- [83] P. Nozières et J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **127**, pp. 1423-1440 (1962).
- [84] P. Nozières et S. Schmitt-Rink, *J. Low Temp. Phys.*, **59**, pp. 195-211 (1985).
- [85] P. Nozières et F. Pistolesi, cond-mat/9902273.
- [86] S. Pairault et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, pp. 5389-5392 (1998); cond-mat/9905242.
- [87] M. H. Pedersen, thèse de doctorat, Universität Zürich (1996).
- [88] D. Pines, *Tr. J. of Physics* **20**, pp. 535-547 (1996); D. Pines, *Z. Phys. B* **103**, pp. 129-135 (1997); J. Schmalian et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, pp. 3839-3842 (1998).
- [89] D. Pines, *The Many-Body Problem*, W. A. Benjamin ed., New-York, 1962.
- [90] R. Preuss et al., *Phys. Rev. Lett.* **79**, pp. 1122-1125 (1997); A. Dorneich cond-mat/9909352; C. Gröber et al., cond-mat/0001366.
- [91] M. Randeria, cond-mat/9710223, Varenna Lectures (1997).
- [92] Ch. Renner et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, pp. 149-152 (1998).
- [93] G. Rickayzen, *Phys. Rev.* **115**, pp. 195-808 (1959). Disponible dans *The Many-Body Problem*, D. Pines.
- [94] G. Rickayzen *Theory of Superconductivity*, John Wiley & Sons, New York (1965).
- [95] C. Robert, *L'analyse statistique bayésienne*, Economica, Paris (1992).
- [96] C. Robert et G. Casella, *Monte Carlo Statistical Methods*, Springer Verlag, Berlin (1999).
- [97] G. Ruani et P. Ricci, *Phys. Rev.* **B55**, pp. 93-96 (1997); M. Opel et al., *J. Low Temp. Phys.* **117**, pp. 347-352 (1999).
- [98] D. J. Scalapino et al., *Phys. Rev.* **B47**, pp. 7995-8007 (1993).
- [99] H. Schäfer et E. Stermin, *La physique au Canada*, mars-avril 1997, pp.77-85.
- [100] T. Schneider et al., *Z. Phys. B* **100**, pp. 263-276 (1996); R. Micnas et al., *Phys. Rev.* **B52**, pp. 16223-15232 (1995); J. J. Rodríguez-Núñez et al., *Int J. Mod. Phys. C8*, pp. 1145-1158 (1998); *Physica A* **232**, pp.403-416 (1996); M. H. Pedersen et al., *Acta Phys. Pol. A* **91**, pp. 419-422 (1997).
- [101] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Benjamin, New York (1964).
- [102] G. S. Setlur, cond-mat/9908269.
- [103] J. M. Singer et al., *Phys. Rev.* **B54**, pp. 1286-1301 (1996); *Eur. Phys. J. B* **7**, pp. 37-51 (1999).

- [104] J. M. Singer et al. *Eur. Phys. J. B* **2**, p. 37 (1998)
- [105] K. S. Singwi et M. P. Tosi, in *Solid State Physics*, vol. 36 H. Ehrenreich et al. Edt., Academic Press, N.Y. (1981).
- [106] M. Takigawa et al., *Phys. Rev.* **B43**, p. 247 (1991); H. Alloul et al., *Phys. Rev. Lett.* **70**, p. 1071 (1993).
- [107] T. Timusk et B. Statt, *Rep. Progr. Phys.* **62**, pp. 61-122 (1999).
- [108] H. Touchette et D. Poulin, *Aspects numériques des simulations du modèle de Hubbard: Monte Carlo quantique et méthode d'entropie maximum*, Rapport technique, CRPS (1999).
- [109] A.-M. S. Tremblay, *Méthode Monte Carlo pour les électrons sur réseau*, dans *Simulations numériques en physique*, L. Lewis, J Lopez edt., vol. 2, pp. 529-582 (1993).
- [110] A.-M. S. Tremblay, *Problèmes à N-corps*, Notes de cours, Département de Physique, Université de Sherbrooke, version préliminaire, mai 1997.
- [111] H. Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.*, vol. 10, p. 545 (1959).
- [112] C. Tsallis et D. A. Stariolo, *Physica A* **233**, p. 395 (1996).
- [113] Y. J. Uemura, *Proceedings of the 10th ann. HTS Workshop on Phys.*, Huston, March 1996, World-Scientific, Singapore, 1996, pp. 68-71.
- [114] Y. J. Uemura, *Hyperfine Interact.* **105**, pp. 35-46 (1997).
- [115] M. Vekić et S. R. White, *Phys. Rev.* **B47**, pp. 1160-1163 (1993).
- [116] Y. M. Vil'k et A.-M. S. Tremblay, *J. Phys. I (France)* **7**, pp. 1309-1357 (1997); Y. M. Vil'k et A.-M. S. Tremblay, *Europhys. Lett.* **33** pp. 159-163 (1996).
- [117] Y. M. Vil'k et al., *J. Phys. Chem. Solids* **59**, pp.1873-1875 (1998).
- [118] S. R. White et al., *Phys. Rev.* **B40**, p. 506 (1989).
- [119] S. R. White et D. J. Scalapino, cond-mat/0006071.
- [120] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **19**, p. 1312 (1967); E. H. Lieb et F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, p. 1445 (1968).
- [121] C. N. Yang et S. C. Zhang, *Mod. Phys. Lett.* **B4**, p. 759 (1990).
- [122] S. C. Zhang, *Science* **275**, pp. 1089-1096 (1997).