

Méthodes d'amas quantiques à température finie appliquées au modèle de Hubbard

par

Dany Plouffe

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

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 11 mai 2011



Library and Archives
Canada

Published Heritage
Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Direction du
Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 978-0-494-83284-4

Our file Notre référence
ISBN: 978-0-494-83284-4

NOTICE:

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

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

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

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

AVIS:

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

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

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

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

Canada

Le 13 mai 2011

*le jury a accepté la thèse de Monsieur Dany Plouffe
dans sa version finale.*

Membres du jury

**Professeur David Sénéchal
Directeur de recherche
Département de physique**

**Professeur Patrick Fournier
Membre
Département de physique**

**Monsieur Nicolas Dupuis
Membre externe
Université Pierre et Marie Curie**

**Professeur André-Marie Tremblay
Président rapporteur
Département de physique**

Sommaire

Depuis leur découverte dans les années 80, les supraconducteurs à haute température critique ont suscité beaucoup d'intérêt en physique du solide. Comprendre l'origine des phases observées dans ces matériaux, telle la supraconductivité, est l'un des grands défis de la physique théorique du solide des 25 dernières années. L'un des mécanismes pressentis pour expliquer ces phénomènes est la forte interaction électron-électron. Le modèle de Hubbard est l'un des modèles les plus simples pour tenir compte de ces interactions. Malgré la simplicité apparente de ce modèle, certaines de ses caractéristiques, dont son diagramme de phase, ne sont toujours pas bien établies, et ce malgré plusieurs avancements théoriques dans les dernières années.

Cette étude se consacre à faire une analyse de méthodes numériques permettant de calculer diverses propriétés du modèle de Hubbard en fonction de la température. Nous décrivons des méthodes (la VCA et la CPT) qui permettent de calculer approximativement la fonction de Green à température finie sur un système infini à partir de la fonction de Green calculée sur un amas de taille finie. Pour calculer ces fonctions de Green, nous allons utiliser des méthodes permettant de réduire considérablement les efforts numériques nécessaires pour les calculs des moyennes thermodynamiques, en réduisant considérablement l'espace des états à considérer dans ces moyennes.

Bien que cette étude vise d'abord à développer des méthodes d'amas pour résoudre le modèle de Hubbard à température finie de façon générale ainsi qu'à étudier les propriétés de base de ce modèle, nous allons l'appliquer à des conditions qui s'approchent de supraconducteurs à haute température critique. Les méthodes présentées dans cette étude permettent de tracer un diagramme de phase pour l'antiferromagnétisme et la supraconductivité qui présentent plusieurs similarités avec celui des supraconducteurs à haute température.

Mots-clés : modèle de Hubbard, thermodynamique, antiferromagnétisme, supraconductivité, méthodes numériques, larges matrices

Remerciements

Je désire d'abord remercier mon directeur, David Sénéchal, pour son dévouement, sa patience et ses nombreux conseils qui ont permis d'élaborer cette thèse. Je voudrais en profiter pour remercier les autres membres du jury, soit André-Marie Tremblay, Patrick Fournier et Nicolas Dupuis pour les conseils qui ont permis d'amener cette thèse à un autre niveau. Je remercie du même coup toute l'équipe professorale du département de physique de l'Université de Sherbrooke qui a contribué à ma formation pendant toutes mes années à l'Université de Sherbrooke.

Je remercie le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) et le Regroupement québécois sur les matériaux de pointe (RQMP) pour l'important soutien financier tout au long de ce travail. Pour ce qui est de l'important support informatique, je voudrais remercier Patrick Vachon ainsi que toute l'équipe du Réseau québécois de calcul de haute performance (RQCHP) qui ont fait un travail exceptionnel pour permettre d'avoir les capacités informatiques pour obtenir les résultats de cette thèse. Tout particulièrement, je voudrais remercier dans cette équipe du RQCHP Carol Gauthier, Alain Veilleux et Michel Barrette avec qui j'ai collaboré plus étroitement.

Je voudrais aussi remercier ma famille et mes amis pour leur support moral tout au long de ce travail. Un merci spécial à mes parents pour leur écoute et leur support à tout moment et à ma copine Mireille qui m'a significativement supporté dans les derniers moments de cette thèse. Aussi, un merci à Dave et Chantal qui m'ont offert un toit et un support important à Sherbrooke dans les derniers moments de cette thèse. Enfin, un merci à tous mes collègues avec qui j'ai travaillé et ceux avec qui j'ai pu partager mon local de travail.

Table des matières

Sommaire	i
Remerciements	iii
Table des matières	v
Liste des tableaux	ix
Table des figures	xi
1 Introduction	1
1.1 Les supraconducteurs à haute température critique	1
1.2 Modèle de Hubbard	5
1.2.1 Modèle de Heisenberg	5
1.3 Des méthodes pour résoudre modèle de Hubbard	6
1.3.1 Les premières tentatives	7
1.3.2 Limites $d = 1$ et $d = \infty$	8
1.3.3 D'autres méthodes analytiques	8
1.3.4 Les méthodes d'amas	9
1.4 Objectif de cette thèse	10
2 Méthodes de calcul	13
2.1 Étude simple à faible et fort couplage	14
2.1.1 Limite faible couplage : approximations du champ moyen	14
2.1.2 Limite fort couplage	18
2.2 Introduction aux fonctions de Green	19
2.3 Résolution d'un amas de taille finie	21

2.3.1	Diagonalisation complète	22
2.3.2	Méthodes de Lanczos à température nulle	24
2.3.3	Méthode de Lanczos à température finie	27
2.3.4	Méthode de Lanczos à basse température et RVLM	34
2.3.5	Calculs des fonctions de Green à température finie	36
2.3.6	États de Lanczos comme vecteurs de base	40
2.4	Théorie des perturbations inter-amas	42
2.4.1	Décomposition du réseau	42
2.4.2	Traitement perturbatif du terme inter-amas	43
2.4.3	Périodisation	46
2.4.4	Quelques caractéristiques de la CPT	47
2.5	Approximation d'amas variationnel	48
2.5.1	Détails de la VCA	48
2.5.2	Restriction de l'espace variationnel	51
2.5.3	Lien entre la CPT et la VCA	52
2.5.4	Champ de Weiss	53
2.5.5	Potentiel chimique et cohérence thermodynamique	54
2.5.6	Calcul des paramètres d'ordre et des quantités à un corps	55
2.6	Considérations numériques	56
2.6.1	Convergence des sommes	56
2.6.2	Calcul de l'énergie	57
2.6.3	Sommation infinie	59
2.7	Aperçu des prochains chapitres	60
3	Antiferromagnetisme	63
3.1	Cas simple : étude du réseau avec $t = 1$	63
3.1.1	Paramètre d'ordre et changement de phase	63
3.1.2	Exposant critique	66
3.1.3	Température de Néel pour le cas demi-rempli	68
3.1.4	Signification de l'ordre en 2D à température finie	70
3.1.5	Comparaison avec le système à $T=0$	71
3.1.6	Remplissage et transition du 1 ^{er} ordre	73
3.1.7	Diagramme de phase antiferromagnétique	77
3.1.8	Comparaison avec d'autres méthodes	78

3.2	Variation du potentiel chimique	81
3.3	Ajout des sauts aux premiers et deuxièmes voisins	84
3.3.1	Perturbation de la symétrie particule-trou : saut au deuxième voisin	84
3.3.2	Antiferromagnétisme et cuprates	86
3.3.3	Réseau frustré avec cohérence thermodynamique	90
3.4	Limites de l'application de la VCA à l'antiferromagnétisme	94
3.5	Résumé du chapitre	95
4	Supraconductivité	97
4.1	Demi-remplissage à température nulle	97
4.2	Demi-remplissage à température finie	103
4.3	Supraconductivité pour les systèmes dopés	106
4.4	Supraconductivité pour les systèmes frustrés	109
4.5	Comparaison avec les supraconducteurs à haute température critique . .	110
4.6	Limites de l'application de la VCA a la supraconductivité	113
4.7	Résumé du chapitre	113
5	Application aux systèmes plus grands	115
5.1	RVLM : détermination des paramètres	116
5.1.1	Sélection des états de base	124
5.1.2	Chaleur spécifique avec la RVLM	125
5.1.3	Chaleur spécifique pour l'ensemble grand-canonique	130
5.1.4	Utiliser la base des vecteurs de Lanczos	132
5.2	Application de la LVM à la VCA	136
5.3	Application de la RVLM à la VCA	139
5.4	Discussion des résultats et des méthodes étudiées	141
5.5	Résumé du chapitre	144
	Conclusion	147
	A Réseau réciproque et transformée de Fourier	153
A.1	Représentation mixte d'un opérateur à deux indices	156
	Bibliographie	157

Liste des tableaux

2.1	Dimension de l'espace d'Hilbert en fonction de la sélection des états : ensemble canonique à demi-rempli, ensemble grand-canonique (tous). . .	23
3.1	Densité d'électron critique à partir de laquelle l'ordre antiferromagnétique disparaît (N_{AF}) et la phase paramagnétique (N_{PM}) apparaît.	79
3.2	Densité d'électron critique à partir de laquelle l'ordre antiferromagnétique disparaît (N_{AF}) et la phase paramagnétique (N_{PM}) apparaît. $U = 8$, $t = 1$ et le potentiel chimique de l'amas μ' est utilisé comme paramètre variationnel. La transition pour les amas B10 et 3×4 résulte de la disparition de la solution antiferromagnétique plutôt qu'un croisement avec la solution normale.	84
4.1	Valeur du couplage critique U_c où se produit le changement de phase entre l'ordre supraconducteur (aux plus faibles couplages) et l'ordre antiferromagnétique, lorsque l'on considère un seul paramètre d'ordre à la fois. La deuxième colonne représente la valeur du couplage U_D à partir de laquelle l'ordre supraconducteur disparaît dans les calculs.	101

Table des figures

1.1	Structure de bande du La_2CuO_4 , d'après la référence [2].	2
1.2	Structure des plans de cuivre et d'oxygène des cuprates.	3
1.3	Structure du RCCO et du LSCO. Figure tirée de la référence [3].	3
1.4	Diagramme de phase générique des cuprates. Figure tirée de la référence [3].	4
2.1	Comportement attendu de la température de Néel à faible couplage (champ moyen) en rouge et fort couplage (Heisenberg) en vert. Valeur hypothétique de T_N lorsqu'on rassemble les deux solutions en bleu.	19
2.2	Les amas utilisés pour les calculs de la CPT et VCA. La ligne pointillée orangée définit le super-réseau.	44
2.3	Représentation diagrammatique de la fonctionnelle de Luttinger-Ward. . .	49
3.1	Fonctionnelle de Potthoff (décalée selon sa valeur à $M'=0$) en fonction du champ de Weiss M' pour différentes températures ($U = 8$, amas 2×2). .	64
3.2	Paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction de la température à $U = 8$	65
3.3	Paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction de la température à $U = 8$ (points rouges).	67
3.4	Température de Néel et T_X en fonction du terme d'interaction U	69
3.5	Température de Néel divisée par J en fonction du terme d'interaction U .	69
3.6	Température de Néel T_N , énergie de condensation E_c et valeur du champ de Weiss M^* en fonction de U	72
3.7	Aimantation alternée en fonction de U à $T = 0$	73
3.8	Fonctionnelle de Potthofen fonction du champ de Weiss M' pour différentes températures ($U = 8$, amas 2×2 et $\mu = 6.4$).	74

3.9 Solutions AF et PM en fonction de la température ($U = 8, \mu = 6.4$, amas 2×2).	75
3.10 Remplissage du réseau de la solution antiferromagnétique AF et paramagnétique PM calculé de deux façons différentes.	76
3.11 Même conditions que la figure 3.10, mais pour un amas 2×3	76
3.12 Diagrammes de phase antiferromagnétique pour deux différents amas, avec $U = 8$ et $t = 1$. Les deux diagrammes sont séparés en trois régions : antiferromagnétique (AF), paramagnétique (PM) et séparation de phase (PS).	77
3.13 Diagramme de phase obtenu par Hartree-Fock. Les phases observées sont les phases antiferromagnétiques commensurable (C) et incommensurable (IC). $U = 2$ et $t = 1$. Tiré de la référence [46].	80
3.14 Température de crossover en fonction du remplissage pour deux valeurs de U , obtenu par la TPSC. Tiré de la référence [44].	81
3.15 Diagramme de phase antiferromagnétique pour différentes valeurs de U . Amas 2×3 , $t = 1$ et le potentiel chimique est utilisé comme paramètre variationnel.	81
3.16 Remplissage du réseau en fonction de la température calculée à partir de la fonction de Green et à partir du grand potentiel thermodynamique. Amas 2×3 , $\mu = 6.4$, $U = 8$, $t = 1$, avec variation du potentiel chimique de l'amas.	82
3.17 Diagramme de phase antiferromagnétique pour deux amas différents. Le potentiel chimique de l'amas comme paramètre variationnel ($U = 8$, $t = 1$)	83
3.18 Diagramme de phase antiferromagnétique avec l'ajout d'un saut au 2 ^e voisin (diagonal). Amas 2×3 , $U = 8$, $t = 1$, avec variation du potentiel chimique de l'amas.	85
3.19 Exemple de discontinuité dans la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss antiferromagnétique. Amas 2×3 , $U = 8$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$ et $\mu' = 6.35$	86
3.20 Diagramme de phase antiferromagnétique pour différentes valeur de U pour le réseau frustré. Amas 2×2 avec $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$	88
3.21 Comparaison des diagrammes de phase antiferromagnétique à fort couplage (même conditions que la figure 3.23), mis à l'échelle selon J	89
3.22 Même graphique que la figure 3.21, avec un agrandissement autour du demi-remplissage.	89

3.23	Diagramme de phase antiferromagnétique pour différentes valeurs de U pour le réseau frustré. Amas 2×3 avec $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$	90
3.24	Comparaison des diagrammes de phase antiferromagnétique à fort couplage (même conditions que la figure 3.23), mis à l'échelle selon J	91
3.25	Même graphique que la figure 3.24, avec une échelle ajustée autour du demi-remplissage.	91
3.26	Diagramme de phase antiferromagnétique pour le réseau frustré en ajoutant le potentiel chimique de l'amas μ' comme paramètre variationnel. Amas 2×3 avec $U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$	91
3.27	Fonctionnelle de Potthoff en fonction du potentiel chimique de l'amas μ' à laquelle on a soustrait sa valeur maximale. Amas 2×3 avec $U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$	92
4.1	Paramètre d'ordre supraconducteur D à température nulle en fonction du couplage U . $t = 1$, demi-rempli. Les amas sont tracés à la figure 2.2. . . .	98
4.2	Paramètre d'ordre antiferromagnétique M en fonction du couplage U . $t = 1$, demi-rempli.	100
4.3	Solution de la self-énergie de Potthoff en fonction du couplage U pour un amas 2×2 pour les solutions antiferromagnétique (AF) et supraconductrice (SC).	100
4.4	Paramètre d'ordre supraconducteur D (à gauche) et paramètre d'ordre antiferromagnétique (à droite) en fonction du couplage U dans le cas où la coexistence de phase est considérée. $t = 1$, demi-remplissage	101
4.5	Mêmes conditions que pour la figure 4.3, mais en ajoutant la coexistence de phase (AF+SC).	102
4.6	Température critique de l'ordre supraconducteur à l'état normal en fonction de U , avec $t = 1$ et demi-remplissage	104
4.7	Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction de la température, avec $U = 3$, $t = 1$, demi-remplissage.	104
4.8	Température critique de l'ordre supraconducteur à l'état normal en fonction de U , avec $t = 1$ et demi-remplissage pour l'amas 2×2	105
4.9	Fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss supraconducteur D' . $U = 8$, $t = 1$, amas 2×3	106

4.10	Température critique pour le changement de phase supraconducteur en fonction du remplissage. $t = 1$, amas 2×3	107
4.11	Température critique en fonction du remplissage pour différentes valeurs de U . $t = 1$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$, amas 2×3	110
4.12	Diagramme de phase SC et AF du modèle de Hubbard bidimensionnel calculé avec la VCA à $U = 8$	111
5.1	Énergie relative en fonction du nombre d'itérations M dans la méthode de Lanczos.	117
5.2	Chaleur spécifique en fonction du nombre d'itérations dans la méthode de Lanczos.	118
5.3	Énergie en fonction du nombre de vecteurs aléatoires.	119
5.4	Énergie en fonction du nombre de vecteurs aléatoires pour différentes séries de vecteurs aléatoires	120
5.5	Paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction du nombre de vecteurs aléatoires R pour différentes séries de vecteurs aléatoires	121
5.6	Chaleur spécifique pour différents nombres de vecteurs aléatoires R à $U = 8$, $t = 1$ et demi-remplissage. $M = 40$	122
5.7	Chaleur spécifique pour différents ensembles de vecteurs aléatoires. Chaque courbe correspond à une série différente de vecteurs aléatoires. $U = 8$, $t = 1$ et demi-remplissage. $M = 40$	123
5.8	Distribution des énergies trouvées après avoir généré plusieurs solutions (voir texte). Amas 2×4 , $U = 8$, $T = 0.2$, $t = 1$, $R = 50$	124
5.9	Même conditions qu'au graphique 5.8, en comparant cette fois-ci la distribution des solutions pour deux valeurs de R . Dans le graphique de gauche, nous générons une direction aléatoire et dans celui à droite, on utilise plutôt des signes aléatoires.	125
5.10	Chaleur spécifique pour différentes valeurs de U . Amas 2×3 , $t = 1$ et demi-remplissage. Notons que l'axe de la température est en échelle logarithmique.	127
5.11	Chaleur spécifique pour différentes valeurs de U . Amas 2×4 , $t = 1$, $R = 200$ et demi-remplissage.	127
5.12	Chaleur spécifique pour différentes valeurs de U calculée avec la RVLM. Amas B10, $t = 1$, $R = 150$ ($R = 50$ pour $T > 1.5$) et demi-remplissage.	128

5.13	Chaleur spécifique pour différents amas (2×4 , B10 et 3×4) en utilisant la RVLM pour $U = 4$ (à gauche) et $U = 5$. Nous avons utilisé $t = 1$, $R = 120$ et demi-remplissage.	129
5.14	Chaleur spécifique pour un amas 2×3 dans l'état normal et dans l'état antiferromagnétique. Les calculs ont été réalisés en diagonalisant complètement le hamiltonien sur l'amas. $U = 2$, $t = 1$, $\mu = 1$ (demi-remplissage), dans l'ensemble grand-canonique. La ligne verticale pointillée indique la température de transition.	130
5.15	Chaleur spécifique pour deux ensembles de vecteurs aléatoires. Amas 2×4 , $U = 8$, $t = 1$, $R = 300$ et $\mu = 4$ (demi-remplissage).	131
5.16	Chaleur spécifique pour différents nombres d'itérations M' dans la méthode de Lanczos. Amas 2×4 , $U = 8$, $t = 1$, demi-remplissage, ensemble canonique.	134
5.17	Même situation que la figure 5.16, mais en prenant cette fois-ci $U = 4$. . .	134
5.18	Comparaison de la RVLM ($R = 200$) et la LVM ($M' = 500$) pour $U = 8$. Les données sont tirées des figures 5.16 et 5.11. Système demi-rempli, ensemble canonique, $t = 1$, amas 2×4	135
5.19	Même situation que la figure 5.18, mais en prenant cette fois-ci $U = 4$. . .	136
5.20	Chaleur spécifique pour différents nombres d'itérations M' en utilisant la LVM. Amas B10, $U = 8$, $t = 1$, demi-remplissage, ensemble canonique. . .	137
5.21	Température de Néel en fonction du terme d'interaction U pour l'amas 2×4 , à l'aide de la LVM. La courbe pour l'amas 2×3 provient de la figure 3.4. Système demi-rempli, $t = 1$, ensemble canonique.	138
5.22	Fonction de partition canonique totale en fonction du nombre de vecteurs aléatoires R pour l'amas B10 à $T = 0.5$, $U = 8$, $t = 1$, système demi-rempli. Elle est calculée à partir de l'équation 5.2. Les trois courbes correspondent à des ensembles de vecteurs aléatoires différents.	141
A.1	(a) Décomposition du réseau γ en un super-réseau d'amas de 10 sites . (b) Réseau et super-réseau réciproques de la configuration de l'image de gauche.	154

Chapitre 1

Introduction

1.1 Les supraconducteurs à haute température critique

Les supraconducteurs à haute température critique sont des matériaux qui ont attiré beaucoup d'attention, autant du côté théorique qu'expérimental, depuis leur découverte en 1986 par J. G. Bednorz and K. A. Müller [1]. Ces matériaux allaient amener un regain d'intérêt pour la supraconductivité puisqu'ils permettaient d'atteindre des températures critiques significativement plus élevées. Cependant, on a rapidement réalisé que ces matériaux ne pouvaient pas s'expliquer par la simple théorie BCS, qui avait permis de comprendre les supraconducteurs dits conventionnels.

Les supraconducteurs à haute température critique, appelés familièrement cuprates, font partie d'une vaste classe de matériaux dans lesquels la théorie des bandes et ses raffinements comme la théorie des liquides de Fermi n'est plus applicable. Ceci s'observe par exemple dans le cas du La_2CuO_4 qui, malgré la présence d'une bande calculée au niveau de Fermi, présente une phase isolante antiferromagnétique. La structure de bande de ce matériau, calculée à partir de l'approximation de la densité locale (*Local Density Approximation* ou LDA) [2] est présentée à la figure 1.1.

Les cuprates tel le La_2CuO_4 ont quelques caractéristiques communes. Côté structure, ils sont composés d'atomes de cuivre et d'oxygène disposés dans un plan selon une structure bien précise, soit celle présentée à la figure 1.2. Ces plans de cuivre et d'oxygène sont superposés les uns aux autres. Entre ces plans s'insère un autre arrangement composé de terres rares et d'oxygène qui varie d'un composé à l'autre (voir figure 1.3). La substitu-

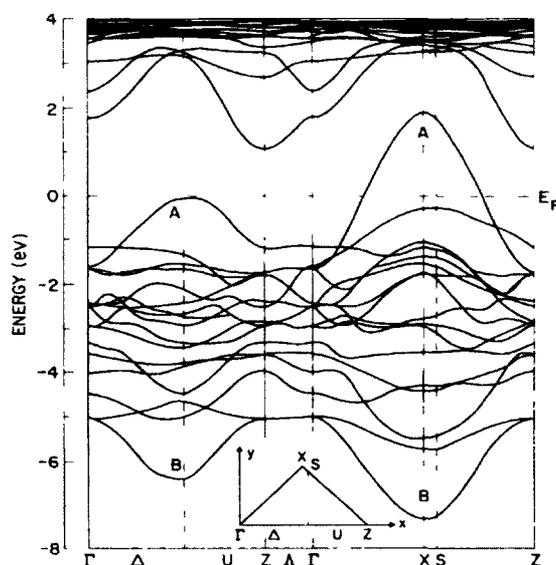


FIGURE 1.1 – Structure de bande du La_2CuO_4 , d'après la référence [2]

tion partielle des atomes de terre rare permet de doper les plans de CuO_2 avec des trous ou des électrons. Le retrait d'atomes d'oxygène présents entre les plans de CuO_2 permet aussi de varier le remplissage dans ces plans.

Du côté des propriétés électroniques, la physique des cuprates se passe principalement dans les plans de CuO_2 . Ainsi ces matériaux présentent un caractère quasi bidimensionnel. La faible dimensionalité du système rend plus importantes les fluctuations quantiques, ce qui donne naissance à des caractéristiques particulières. Les cuprates présentent entre autres un diagramme de phase qui est similaire d'un composé à l'autre. Un diagramme générique de cette classe de matériaux est présenté à la figure 1.4. Nous y retrouvons d'abord, autour du demi-remplissage, une phase antiferromagnétique. Celle-ci s'étend sur une plus large plage de fréquence du côté dopé aux trous. Autour du demi-remplissage, le système se comporte comme un isolant de Mott antiferromagnétique. De chaque côté de la phase antiferromagnétique apparait un dôme supraconducteur. Celui du côté dopé aux électrons s'étend sur une plus large plage de remplissage.

L'existence de l'isolant de Mott antiferromagnétique autour du demi-remplissage suggère que, contrairement à ce qui est considéré dans la théorie des bandes, les électrons ne peuvent plus être considérés comme des particules indépendantes. Ainsi les interactions entre les électrons doivent être traitées au-delà d'un simple potentiel moyen. Nous ver-

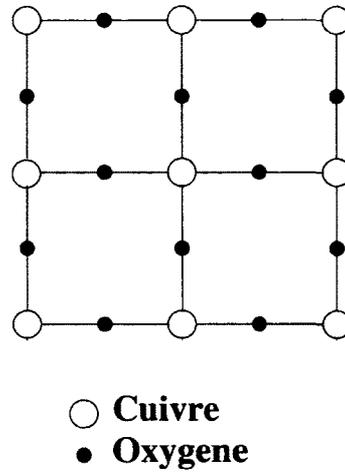


FIGURE 1.2 – Structure des plans de cuivre et d’oxygène des cuprates

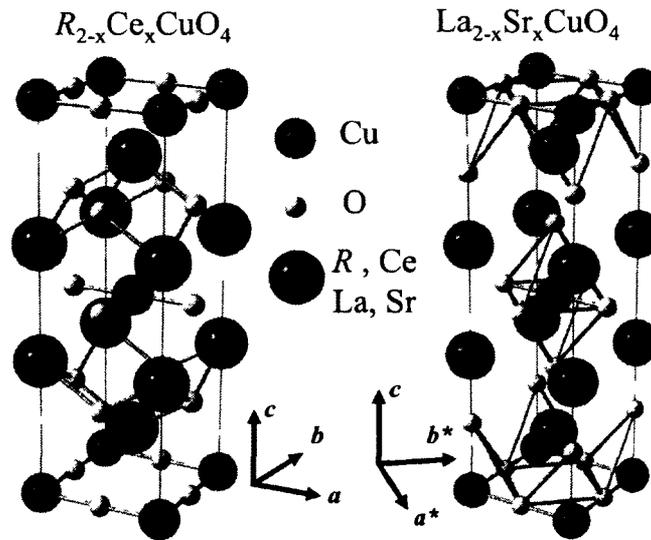


FIGURE 1.3 – Structure du RCCO et du LSCO. Figure tirée de la référence [3].

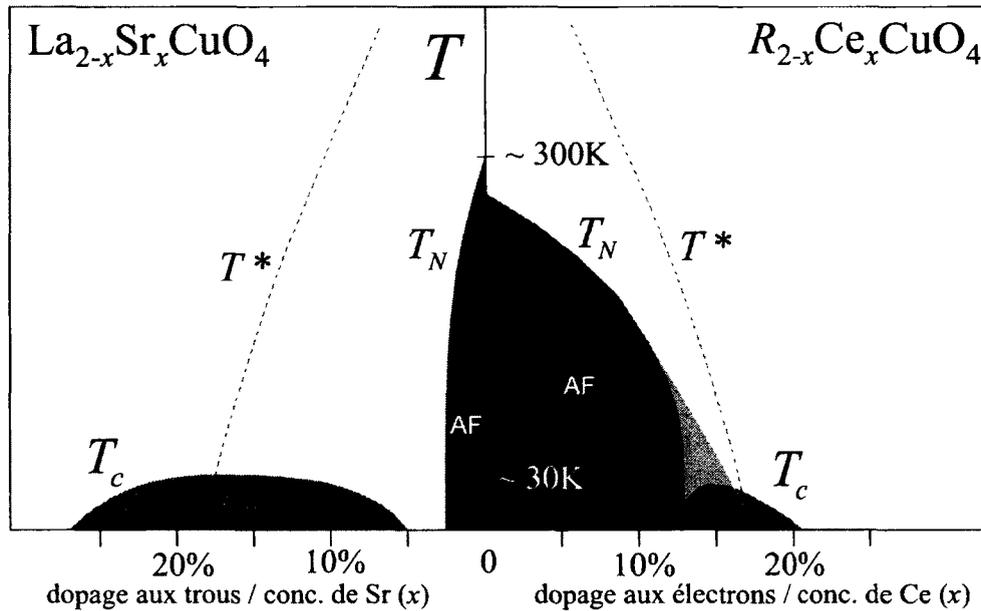


FIGURE 1.4 – Diagramme de phase générique des cuprates. Figure tirée de la référence [3].

rons à la section suivante comment une forte interaction entre les électrons peut donner naissance à un comportement antiferromagnétique.

Une autre caractéristique importante du diagramme de phase est la proximité des phases antiferromagnétique et supraconductrice. Ceci laisse croire qu'un mécanisme lié à la tendance du système à l'antiferromagnétisme pourrait contribuer à faire apparaître la supraconductivité. Or, tel que nous le verrons dans ce document, un modèle considérant les fortes interactions électrons-électrons peut présenter dans certaines conditions une phase supraconductrice.

Comprendre l'origine des phases observées dans les cuprates telle la supraconductivité, est l'un des grands défis de la physique théorique du solide des 25 dernières années. Nous adopterons le point de vue, largement répandu, que la supraconductivité de ces matériaux tire son origine des interactions électron-électron et qu'elle peut être expliquée sommairement dans le cadre d'un modèle très simplifié : le modèle de Hubbard [4].

1.2 Modèle de Hubbard

Le modèle le plus simple pour considérer explicitement les interactions entre les électrons a été suggéré par Hubbard en 1963 [5]. Ce modèle traite l'interaction entre les électrons qui sont sur des sites différents à travers un potentiel moyen, mais garde explicitement l'interaction entre les électrons occupant le même site.

Le modèle de Hubbard peut s'écrire sous la forme

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

où $c_{i,\sigma}$ ($c_{i,\sigma}^\dagger$) est l'opérateur d'annihilation (de création) d'un électron de spin σ au site i , t_{ij} est le terme de saut (ou d'hybridation) entre le site i et le site j et U est le terme d'interaction entre les électrons occupant le même site.

Nous retrouvons deux cas limites dans ce modèle. D'abord, lorsque l'interaction est absente, soit $U = 0$, nous retrouvons la simple théorie des bandes. Dans ce cas, les énergies que peuvent avoir les électrons sont déterminées par la relation de dispersion $\varepsilon(\mathbf{k})$ donnée par

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} t_{ij} \quad (1.2)$$

où \mathbf{k} est le vecteur d'onde considéré et \mathbf{r}_i est la position du site i . L'énergie totale du système peut alors se déterminer avec cette relation de dispersion.

Dans l'autre cas limite, lorsque $t = 0$, les électrons sont entièrement localisés. Dans ce cas, l'énergie du système est donnée par la double occupation moyenne ($\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$) multipliée par U . Ce cas est plutôt trivial. Il sera en fait plus intéressant d'étudier le cas où $U \gg t$, qui nous permet de retrouver le modèle de Heisenberg.

Pour les cuprates, le modèle de Hubbard à une bande semble suffisant pour décrire la physique des basses énergies [6, 7]. C'est pourquoi c'est celui qui nous intéressera dans ce document, pour comprendre entre autres ce que ce modèle simplifié peut donner comme diagramme de phase.

1.2.1 Modèle de Heisenberg

Un cas limite qui nous intéressera dans ce document sera celui où le système est demi-rempli avec $U \gg t$. En traitant le terme cinétique (associé à t) comme perturbation, on

peut montrer que l'hamiltonien effectif est dans ce cas le modèle de Heisenberg qui peut s'écrire sous la forme :

$$H_J = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.3)$$

où \mathbf{S}_i est l'opérateur de spin au site i et J_{ij} est le terme d'échange entre le site i et j . Par rapport au modèle de Hubbard, ce terme est donné par

$$J_{ij} = 4t_{ij}^2/U \quad (1.4)$$

Ce terme d'échange est associé à une correction de l'énergie provenant du saut virtuel d'un électron vers le site voisin et qui revient ensuite à son site initial. Ceci permet d'abaisser l'énergie du système, comme toute correction du deuxième ordre à l'état fondamental.

Comme $J > 0$, les spins ont tendance à s'ordonner de manière antiparallèle d'un site à l'autre (antiferromagnétisme). En effet, étant donné le principe d'exclusion de Pauli, les sauts virtuels sont possibles seulement si les spins sont antiparallèles. Donc l'énergie est abaissée seulement pour les spins anti-parallèles. Pour le réseau carré, le modèle de Heisenberg présente une phase antiferromagnétique à température nulle [8]. Cependant, à température finie, cet ordre doit disparaître puisque nous avons affaire à un système bidimensionnel [9]. Cependant le couplage existant entre les plans de CuO_2 , même faible par rapport aux sauts intraplans, permet de stabiliser la phase AF à température finie dans les cuprates.

Ce comportement antiferromagnétique est aussi observé dans des mesures de dispersion de neutrons sur des cuprates demi-rempli [10, 11]. Ceci est un indice montrant que les cuprates sont des systèmes dans lequel l'interaction locale électron-électron doit être considérée.

1.3 Des méthodes pour résoudre modèle de Hubbard

Déterminer les propriétés du modèle de Hubbard peut s'avérer être une tâche ardue, et ce malgré la simplicité apparente du modèle de Hubbard. Bien que le comportement de ce modèle soit bien compris dans les limites $t_{ij} = 0$ ou $U = 0$, la présence simultanée de ces deux termes rend complexe la détermination des propriétés du modèle. Différentes

stratégies ont été adoptées pour résoudre le modèle de Hubbard. Chacune de ces méthodes comporte ses avantages et inconvénients. Nous allons voir ici un bref aperçu de différentes méthodes existantes, ce qui permettra de mieux situer le contexte de cette thèse.

1.3.1 Les premières tentatives

Lorsque Hubbard a publié son premier article sur le modèle de Hubbard [5], il a offert deux façons de solutionner le modèle de Hubbard. D'abord, il a appliqué une approche du champ moyen. Dans ce type d'approche, on simplifie de façon effective le hamiltonien en remplaçant le terme à deux corps (le terme potentiel dans notre cas) en produit d'un terme à un corps et d'un champ moyen. Dans ce cas-ci, Hubbard a suggéré de considérer la densité d'électrons comme étant constante sur tout le réseau, en remplaçant $n_{i\sigma}n_{i-\sigma}$ par $n_{i\sigma}\langle n_{i-\sigma} \rangle$, où il a supposé $\langle n_{i\sigma} \rangle = n_\sigma$ constant en fonction des sites du réseau. Il s'est penché sur le ferromagnétisme du modèle de Hubbard. Or, dans le cas où $U > 0$, le système a plutôt tendance à adopter un comportement antiferromagnétique, tel que nous le verrons au chapitre suivant.

Le terme à deux corps peut être décomposé de différentes façons lorsqu'on utilise une approche de type champ moyen. Cependant, un des inconvénients importants cette approche est le fait qu'on élimine les fluctuations liées aux corrélations locales. Celles-ci deviennent particulièrement importantes à fort couplage. Le champ moyen peut tout de même être un point de départ intéressant à l'étude du modèle de Hubbard, pour avoir un premier aperçu de ses caractéristiques. Nous verrons une approche du champ moyen pour les ondes de densité de spin à la section 2.1.1.

Une autre approche suggérée par Hubbard consistait à faire une approximation de la fonction de Green du modèle de Hubbard. Elle est basée sur l'équation du mouvement de la fonction de Green (nous définirons la fonction de Green au chapitre suivant). Connaissant le hamiltonien et l'évolution de la dérivée d'une valeur moyenne par rapport au temps (donnée en fonction d'autres fonctions de corrélation), il est possible de faire quelques approximations pour obtenir une fonction de Green dans la limite fort couplage. Cette approche permet d'observer un gap dans la densité d'états, qui est une indication que le système est un isolant de Mott. Cette approximation développée par Hubbard est appelé l'approximation de Hubbard-I. C'est une approche très limitée dû à ses approximations trop simplificatrices. D'autres approches permettent d'obtenir des résultats plus crédibles.

1.3.2 Limites $d = 1$ et $d = \infty$

Deux approches différentes ont permis de solutionner exactement le modèle de Hubbard, chacune dans un cas particulier. En une dimension, Lieb et Wu ont obtenu à partir de l'Ansatz de Bethe différentes quantités physiques dans l'état fondamental, tels l'énergie, la fonction d'onde et le potentiel chimique [12]. Bien que cette solution soit donnée sous la forme d'équations auto-cohérentes, elle peut nous fournir plusieurs résultats intéressants, telle l'absence de transition métal-isolant à U fini pour une chaîne infinie. Cependant cette approche ne permet pas le calcul de fonctions de corrélation, ce qui limite beaucoup son intérêt. De plus, elle se limite strictement au cas unidimensionnel.

Dans l'autre cas limite, où la dimension de l'espace est infinie, la théorie du champ moyen dynamique (DMFT) devient exacte. Cette approche, qui peut être appliquée de façon générale en dimension quelconque, établit une correspondance entre le réseau infini et un problème auto-cohérent d'un seul site couplé à un bain (pour une révision détaillée de cette méthode, voir la référence [13]). Bien que cette approche élimine les corrélations spatiales en raison de la restriction à un seul site, elle conserve les corrélations dynamiques locales. Dans le cas où la dimension est infinie, cette méthode devient des plus pertinentes puisque les quantités physiques ne dépendent plus du vecteur d'onde. En effet, dans cette situation, le nombre de coordination devient infini, chaque site ayant une infinité de voisins. Cette méthode a permis entre autres de trouver la valeur critique de U où survient la transition métal-isolant. Cependant, cette approche exclue les corrélations à courte portée, ce qui limite son intérêt dans le cas bidimensionnel.

1.3.3 D'autres méthodes analytiques

Des méthodes analytiques où on tente de deviner intuitivement le comportement du modèle de Hubbard ont apporté différentes compréhensions dudit modèle. Il existe ainsi des approches variationnelles, où on tente de deviner la forme du fondamental tout en incluant des éléments variationnels. C'est le cas de l'approximation développée par Gutzwiller [14, 15], qui a proposé d'utiliser le fondamental sous la forme $|\psi\rangle = g^{\hat{D}}|\psi_0\rangle$, où $\hat{D} = \sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ est l'opérateur de la double occupation et $|\psi_0\rangle$ est un simple produit de fonctions d'onde associées aux électrons indépendants. Cette approche nous permet d'avoir une aperçu de la façon que se comporte le fondamental. Cependant, cette approche ne tient pas compte des corrélations magnétiques et prédit, de façon erronée, que le système unidimensionnel reste métallique peu importe la valeur finie que prend U .

De l'autre côté, l'approche auto-cohérente à deux particules (TPSC¹), développée par Vilk *et al.* [16], peut se comprendre dans une perspective à N-corps où la fonction de Green s'écrit comme une somme de graphes. Certains graphes sont éliminés pour permettre d'obtenir une somme qui peut se calculer. Des contraintes sont ensuite ajoutées pour respecter les règles de somme pour le spin et la charge. Le principe de Pauli est aussi respecté. Contrairement à l'approche du champ moyen, la TPSC respecte le théorème de Mermin-Wagner [9], qui stipule qu'aucune brisure de symétrie n'est possible en une ou deux dimensions à température finie, tel que nous le verrons plus loin. Cependant, la TPSC est spécifique au modèle de Hubbard à une bande et n'est valide qu'à couplage faible ou intermédiaire. Nous verrons plus tard des résultats obtenus par TPSC, que nous pourrons ensuite comparer avec ceux que nous avons obtenus.

1.3.4 Les méthodes d'amas

Avec la rapide augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, des méthodes numériques ont pu être envisagées. Dans ce document, nous nous intéresserons en particulier aux méthodes d'amas, où on détermine d'abord les propriétés du hamiltonien sur un amas à l'aide d'une approche numérique. Le traitement de ce résultat dépend par la suite de la méthode choisie. Nous allons faire un bref survol ici de certaines méthodes d'amas, mais nous y reviendrons plus tard dans les autres chapitres.

Pour résoudre le modèle de Hubbard sur un amas, l'approche non-perturbative la plus efficace est sans aucun doute le Monte Carlo quantique (QMC²). En fait il existe plusieurs versions du QMC, dont la méthode de Hirsch-Fye[17] et le Monte Carlo quantique en temps continu [18]. Le QMC est exacte numériquement, dans les limites des erreurs statistiques, et permet de considérer des amas de taille plus importante que les autres méthodes d'amas exactes. Le QMC a comme point de départ l'action formulée à partir d'une intégrale de chemin dans le temps imaginaire. Cette intégrale est ensuite décomposée en termes plus simples afin d'obtenir une formulation à partir d'électrons indépendants couplés par des champs. Bien que le QMC ait connu beaucoup de succès, cette approche est limitée par le problème de signe, qui rend difficile les calculs lorsque le système est loin du demi-remplissage ou lorsque les termes de saut ne sont plus limités aux premiers voisins.

Pour traiter le résultat obtenu pour un amas, différentes méthodes ont été suggérées.

-
1. Two-Particles Self-Consistent Approach
 2. Quantum Monte Carlo

D'abord, il est possible de généraliser la DMFT en utilisant un amas plutôt qu'un simple site : c'est ce qu'on appelle la théorie du champ moyen dynamique par cellule (CDMFT³). Tout comme la DMFT, il s'agit de résoudre un problème auto-cohérent d'un amas couplé à un bain. Il est possible d'ajuster les paramètres du bain afin de permettre l'apparition de différentes phases sur l'amas, ce qui rend l'approche flexible.

Une autre méthode d'amas est l'approximation dynamique par amas (DCA⁴) qui a été suggérée par Hettler *et al*[19, 20]. De façon simplifiée, elle est similaire à la CDMFT mais elle est définie dans l'espace réciproque plutôt que dans l'espace réel. Il s'agit ainsi d'une approche auto-cohérente basée sur la fonction de Green d'un système fini, tout comme la CDMFT. La première zone de Brillouin est décomposée en N_c sous-cellules pour simplifier le problème. Lorsque $N_c = 1$, on retrouve la DMFT. L'approche préserve l'invariance par translation et traite de façon exacte les corrélations de courtes portées.

Pour avoir une vue d'ensemble des différentes méthodes d'amas, dont celles présentées ci-haut et d'autres méthodes, il est possible de consulter l'article de Maier *et al.* [21].

1.4 Objectif de cette thèse

Cette thèse s'intéressera d'abord à développer des méthodes servant à la résolution du modèle de Hubbard à température finie. Ces méthodes auront comme point de départ le calcul numérique de la fonction de Green du modèle de Hubbard sur un amas. Cette fonction de Green sera ensuite utilisée afin d'extrapoler les propriétés du modèle sur un réseau infini.

Plus l'amas sera grand en taille, plus la solution déterminée à partir de notre approche devrait tendre vers la solution exacte sur le réseau infini. Ainsi, l'un des intérêts de cette thèse consistera à étudier des méthodes permettant de calculer la fonction de Green sur des amas de plus en plus grands. Les méthodes développées consisteront à réduire considérablement le nombre d'états à considérer dans les calculs de moyennes thermodynamiques. Nous verrons entre autres qu'en utilisant seulement quelques vecteurs aléatoires de base, nous pouvons réaliser une moyenne thermodynamique avec une précision intéressante.

Notre étude consistera d'abord à vérifier que la VCA (approximation de l'amas variationnel), qui a été principalement appliquée à température nulle, peut aussi être utilisée

3. Cellular Density Mean Field Theory

4. Dynamical Cluster Approximation

pour étudier le modèle de Hubbard lorsque le système est placé à température finie. Nous étudierons ainsi les phases antiferromagnétique et supraconductrice. Pour faciliter cette première étude, nous allons solutionner exactement le modèle de Hubbard sur de petits amas, en diagonalisant complètement le hamiltonien. Nous verrons ensuite dans un deuxième temps des méthodes permettant d'obtenir la fonction de Green pour des amas plus grands, en réduisant considérablement l'espace des états à considérer pour calculer les moyennes thermodynamiques.

Nous en profiterons pour appliquer la VCA dans des conditions s'approchant de celles des supraconducteurs à haute température. Nous pourrons ainsi obtenir un diagramme de phase et le comparer avec celui des cuprates.

Chapitre 2

Méthodes de calcul

L'étude du modèle de Hubbard peut s'avérer être une tâche complexe lorsqu'on veut obtenir diverses quantités telle la fonction de Green ou la moyenne thermodynamique de différentes observables. La présence simultanée des termes cinétique et potentiel, qui ont des effets opposés sur le comportement des électrons, rend impossible dans la plupart des cas la détermination de solutions exactes pour les diverses quantités physiques qui nous intéressent. Ce chapitre présentera quelques approches nous permettant d'obtenir des solutions approximatives qui nous permettront de mieux comprendre le modèle de Hubbard.

Dans ce chapitre, nous verrons d'abord à la section 2.1 une étude simple des cas à fort et faible couplages, en étudiant plus spécifiquement l'antiferromagnétisme. Nous y verrons particulièrement l'approche du champ moyen, une méthode simple nous permettant d'obtenir des résultats tel que le paramètre d'ordre et la température de transition dans le cas de l'antiferromagnétisme. Après une brève introduction aux fonctions de Green à la section 2.2, nous passerons ensuite, à la section 2.3, à la résolution d'un amas de taille finie, ce qui nous permet de déterminer certaines quantités telle la fonction de Green, ce qui nous permettra par la suite de calculer les diverses quantités à un corps du réseau. Nous verrons finalement aux sections 2.4 et 2.5 deux approches d'amas, la VCA¹. et la CPT², qui permettent d'extrapoler la fonction de Green d'un réseau à partir des résultats d'un amas.

1. L'approximation de l'amas variationnel ou *Variational cluster approach*
2. La théorie des perturbations inter-amas ou *cluster perturbation theory*

2.1 Étude simple à faible et fort couplage

Tel que vu au chapitre précédent, lorsque $U \gg t$, le modèle de Hubbard demi-rempli se comporte comme le modèle de Heisenberg. Ce dernier présente un fort caractère antiferromagnétique. Il a été démontré que son fondamental est antiferromagnétique pour un réseau carré en utilisant entre autres des analyses à taille finie [22].³ Ceci nous indique qu'à très fort couplage, le fondamental du modèle de Hubbard devrait être antiferromagnétique. À $U = 0$, il est évident que le système est paramagnétique, dû à l'absence d'interaction entre les électrons. Il y a donc une valeur de U à partir de laquelle le système passe d'une phase paramagnétique à antiferromagnétique. L'objectif de cette section est d'expliquer comment une approximation de champ moyen permet de prédire la température critique T_N .

2.1.1 Limite faible couplage : approximations du champ moyen

Des approches de type champ moyen permettent de donner des résultats crédibles dans certains cas limites, comme lorsque la dimension est grande. Elles permettent par exemple d'obtenir les bons exposants critiques et d'avoir un comportement réaliste du paramètre d'ordre. Elles offrent aussi un point de départ relativement simple à l'étude du modèle de Hubbard dans le cas bidimensionnel, particulièrement à faible couplage. Avant de se lancer dans des méthodes plus sophistiquées, nous allons présenter l'approximation du champ moyen.

Pour étudier l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard à faible couplage, nous pouvons utiliser l'approximation du champ moyen (ACM). Le principe au coeur du champ moyen est de simplifier de façon effective le hamiltonien en remplaçant les termes à deux corps par le produit d'un terme à un corps et d'un champ moyen. Voyons comment ceci peut être appliqué au modèle de Hubbard.

On peut écrire l'opérateur $n_{i\sigma}$ (nombre de particules de spin σ au site i) en fonction de sa valeur moyenne $\langle n_{i\sigma} \rangle$ et des fluctuations $\delta n_{i\sigma}$ autour de cette valeur moyenne :

$$n_{i\sigma} = \langle n_{i\sigma} \rangle + \delta n_{i\sigma} \quad (2.1)$$

3. Pour un résumé de la question et les différentes approches utilisées pour résoudre le fondamental du modèle de Heisenberg, voir [23]

Ainsi, le terme potentiel du modèle de Hubbard peut s'écrire sous la forme

$$n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} = n_{i\uparrow}\langle n_{i\downarrow} \rangle + n_{i\downarrow}\langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{i\uparrow} \rangle + \delta n_{i\uparrow} \delta n_{i\downarrow} \quad (2.2)$$

Dans le cas où les fluctuations sont petites, on peut négliger la valeur moyenne du produit $\delta n_{i\uparrow} \delta n_{i\downarrow}$, ce qui nous permet de garder ainsi seulement les termes à un corps. Ceci est justifié lorsque U est faible puisque dans ce cas les électrons interagissent faiblement entre eux : la double occupation est grande. Un indice nous indiquant que $\langle \delta n_{i\uparrow} \delta n_{i\downarrow} \rangle$ devrait être petit est qu'à $U = 0$, il devrait être nul, puisque le hamiltonien dans ce cas ne couple pas les termes de spin \uparrow et \downarrow . Ainsi, nous pouvons faire une approximation en remplaçant le terme à deux corps par

$$n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \sim n_{i\uparrow}\langle n_{i\downarrow} \rangle + n_{i\downarrow}\langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{i\uparrow} \rangle \quad (2.3)$$

Supposant l'existence d'un ordre antiferromagnétique sous forme d'ondes de densité de spin, la valeur moyenne de la densité électronique prend la forme suivante :

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{n}{2} + \eta(\sigma)m e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} \quad (2.4)$$

où $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ en deux dimensions, $\eta(\sigma) = +1$ et -1 pour $\sigma = \uparrow$ et $\sigma = \downarrow$ respectivement et m est le paramètre d'ordre qui représente l'ordre antiferromagnétique. Nous avons considéré un système à deux dimensions puisque c'est le cas qui nous intéresse ici. Le hamiltonien, qu'on associe aux ondes de densité de spin (ODS), devient alors

$$\begin{aligned} H_{ODS} &\sim \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} \langle n_{i-\sigma} \rangle - U \sum_i \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{i\uparrow} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{ZBA}} \left[\left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{Un}{2} \right) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \left(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \frac{Un}{2} \right) d_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k},\sigma} \right. \\ &\quad \left. - \frac{Um}{2} \eta(\sigma) (c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k},\sigma} + d_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}) \right] - UL \left(\frac{n^2}{4} - m^2 \right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

où $d_{\mathbf{k},\sigma} = c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}$ et L le nombre de sites.

La première somme de la dernière ligne est prise seulement sur la première zone de Brillouin antiferromagnétique (ZBA), définie par un des deux sous-réseaux composés des spins \uparrow (ou \downarrow) dans l'état de Néel. Pour obtenir cette dernière ligne, nous avons appliqué une transformée de Fourier et réarrangé les termes pour réécrire l'équation en fonction

de la première ZBA. On peut maintenant trouver les énergies propres du hamiltonien en fonction de \mathbf{k} et ω , considérant que celui-ci est diagonal par bloc . Ainsi, nous avons à diagonaliser les éléments diagonaux, soient $H_{\mathbf{k}\sigma}$, donnés par :

$$H_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger & d_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{Un}{2} & -Um\eta(\sigma) \\ -Um\eta(\sigma) & \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \frac{Un}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\sigma} \\ d_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Nous avons bien sûr $H_{ODS} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} H_{\mathbf{k}\sigma} - UL(n^2/4 - m^2)$. Pour simplifier les calculs, nous allons supposer un emboîtement parfait du réseau : $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$. C'est le cas si on limite le saut au premier voisin, avec tous les termes de sauts identiques. Les valeurs propres de $H_{\mathbf{k}\sigma}$ sont alors

$$\lambda_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{Un}{2} + \alpha \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + U^2 m^2}, \quad (2.7)$$

où $\alpha = \pm 1$. Les énergies propres des différents $H_{\mathbf{k}\sigma}$ définissent alors deux bandes, chacune définie par $\lambda_{\sigma}^{+}(\mathbf{k})$ et $\lambda_{\sigma}^{-}(\mathbf{k})$. Les valeurs propres de H_{ODS} correspondent alors aux différentes façons de combiner les valeurs propres des $H_{\mathbf{k}\sigma}$. Notons ici que $\lambda_{\downarrow}^{\alpha}(\mathbf{k}) = \lambda_{\uparrow}^{\alpha}(\mathbf{k})$. Nous enlèverons alors l'indice σ des énergies propres. On peut ainsi déterminer le grand potentiel $\Omega(T, \mu, m)$, ou plutôt sa densité, en considérant qu'il s'agit d'un système composé de quasi-particules indépendantes d'énergie $\lambda^{\alpha}(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu, m) &= -U \left(\frac{n^2}{4} - m^2 \right) - \frac{T}{L} \ln \left[\prod_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^{\text{ZBA}} Z_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} \right] \\ &= \frac{U^2 m^2}{U} - \frac{Un^2}{4} - \frac{2T}{L} \sum_{\mathbf{k}\alpha}^{\text{ZBA}} \ln [1 + e^{-(\lambda^{\alpha} - \mu)/T}] \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$Z_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha}(T, \mu, m) = \sum_{n_i=0,1} e^{-n_i(\lambda^{\alpha} - \mu)/T} \quad (2.9)$$

Pour simplifier les calculs, nous allons nous placer dans le cas à demi-rempli : $\mu = U/2$ et $n = 1$. Le grand potentiel est alors :

$$\Omega(T, \mu, m) = \frac{U^2 m^2}{U} - \frac{U}{4} - \frac{2T}{L} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{ZBA}} \ln \left[4 \cosh^2 \left(\frac{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + U^2 m^2}}{2T} \right) \right] \quad (2.10)$$

Considérant m comme un paramètre variationnel, on peut trouver la solution champ

moyen du système en minimisant le grand potentiel $\Omega(T, \mu, m)$ en fonction de m :

$$\frac{\partial \Omega(T, \mu, m)}{\partial m} = 0. \quad (2.11)$$

Cette équation donne deux solutions : soit $m = 0$, ou sinon m est donné par

$$1 = \frac{2}{L} \sum_{\mathbf{k}} \frac{U}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + U^2 m^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + U^2 m^2}}{2T} \quad (2.12)$$

Nous pouvons faire une approximation supplémentaire afin de simplifier l'analyse analytique de cette équation : nous allons considérer pour le reste des résultats une densité d'état $\rho(\epsilon)$ constante sur une plage de largeur W (la largeur de bande) :

$$\rho(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{W} & \text{si } -\frac{W}{2} \leq \epsilon \leq \frac{W}{2}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.13)$$

On peut donc remplacer la somme par une intégrale : $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{+W/2} \rho(\epsilon) d\epsilon$. L'équation 2.12 devient alors

$$\frac{W}{U} = \int_{-W/2}^{W/2} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + U^2 m^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon^2 + U^2 m^2}}{2T} \quad (2.14)$$

La température critique est donnée en posant $m = 0$. En intégrant par partie, nous obtenons que :

$$\begin{aligned} \frac{W}{U} &= \int_{-W/2}^{W/2} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh \frac{\epsilon}{2T} \\ &= \int_0^{W/4k_B T_c} \frac{dx}{x} \tanh x \\ &= \ln \frac{W}{4k_B T_c} \tanh \frac{W}{4k_B T_c} - \int_0^{W/4k_B T_c} \frac{\ln x}{\cosh^2 x} dx \end{aligned} \quad (2.15)$$

La solution de cette équation n'est pas simple : elle implique une somme infinie sur les nombres de Bernoulli. Cependant, nous allons considérer la limite faible couplage, où $k_B \ll W$. Dans ce cas, $\frac{W}{4k_B T_c} \approx 1$ et l'intégrale de la dernière ligne de l'équation précédente

donne $-\ln(4/\pi) + \gamma_E$, où γ_E est le nombre d'Euler. Ceci nous permet d'en déduire que :

$$T_N \approx \frac{W e^{\gamma_E}}{k_B \pi} e^{-W/U} \quad (2.16)$$

où γ_E est la constante d'Euler et W est la largeur de bande.

Ce qui nous intéresse aussi est de déterminer le comportement de m près de la température critique. Dans ce cas, nous avons $Um \ll W$ et $T_N \ll T_N - T$. Nous pouvons faire un développement en $U^2 m^2$ de la relation (2.14), en gardant le premier ordre, pour obtenir ainsi que

$$\ln \frac{T}{T_N} = \ln \left(1 - \frac{T_N - T}{T_N} \right) \approx \frac{T_N - T}{T_N} = -Am^2 \quad (2.17)$$

où A est une constante. Nous obtenons ainsi que l'exposant critique du paramètre d'ordre m est de $\frac{1}{2}$, ce qui est caractéristique des solutions de type champ moyen.

2.1.2 Limite fort couplage

La description de la section précédente devient incorrecte dans la limite de fort couplage. Dans cette limite, nous nous attendons plutôt à une localisation des électrons sur les sites et nous ne pouvons plus négliger le terme $\langle \delta n_{i\uparrow} \delta n_{i\downarrow} \rangle$. Dans ce cas, nous pouvons plutôt appliquer un simple traitement perturbatif en puissance de t/U . Nous avons vu à la section 1.2.1 comment le traitement perturbatif appliqué au modèle de Hubbard à demi-rempli conduit au modèle de Heisenberg.

À partir du modèle de Heisenberg, on peut évaluer le comportement de la température critique dans cas fort couplage. en particulier dans le cas demi-rempli. En effet, étant donné que la seule échelle d'énergie à fort couplage est $J = 4t^2/U$, nous avons nécessairement un comportement de la température critique en $T_N \propto 1/U$.

Le graphique de la figure 2.1.2 présente la température de Néel dans les deux limites : à fort et à faible couplage. La courbe à faible couplage a été déterminée en champ moyen. À fort couplage, nous avons tracé T_N en fonction de $1/U$ (Heisenberg). Nous avons aussi tracé la courbe intitulée «solution hypothétique», où nous avons tenté de combiner de façon arbitraire les deux courbes ensemble afin de faire l'approximation d'une solution possible si nous avons une méthode pour trouver T_N pour toutes les valeurs de U , considérant les solutions trouvées à fort et faible couplages comme étant réalistes.

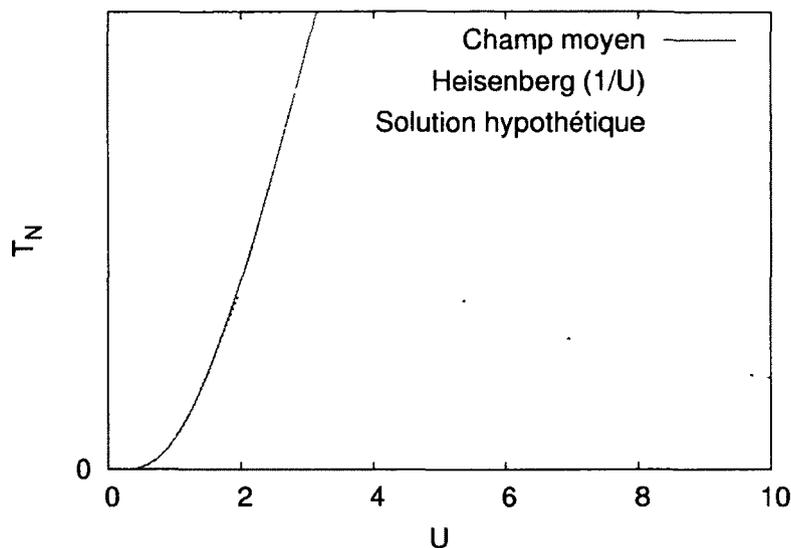


FIGURE 2.1 – Comportement attendu de la température de Néel à faible couplage (champ moyen) en rouge et fort couplage (Heisenberg) en vert. Valeur hypothétique de T_N lorsqu'on rassemble les deux solutions en bleu.

2.2 Introduction aux fonctions de Green

Dans l'étude des systèmes à N -corps, la fonction de Green s'avère être un outil essentiel. Elle nous sera utile plus tard et nous allons donc l'introduire ici. Commençons d'abord par définir la fonction de Green retardée, aussi appelé propagateur, sur un réseau :

$$G^R(t, t'; i, j) = -i \left\langle \left\{ c_i(t), c_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle \theta(t - t') \quad (2.18)$$

où $\langle \dots \rangle$ représente la moyenne thermodynamique, $\theta(t - t')$ est la fonction de Heaviside et $c_i(t) = e^{-iHt} c_i e^{iHt}$. Cette fonction nous donne différentes informations sur le système. Elle permet entre autres de calculer l'énergie du système ainsi que les quantités à un corps comme les grandeurs thermodynamiques, le poids spectral et les paramètres d'ordre (voir section 2.5.6).

Lorsque exprimée en fonction de la fréquence, la fonction de Green peut nous fournir des informations intéressantes sur le système. Pour déterminer la fonction de Green en fonction de la fréquence ω , nous avons besoin d'ajouter un facteur de convergence pour

permettre à la transformée de Fourier de converger. L'ajout de ce facteur de convergence correspondra à ajouter $i\eta$ à la fréquence, avec $\eta \rightarrow 0^+$. Ainsi, considérant que la fonction de Green ne dépend que de $t - t'$, nous avons que

$$G^R(\omega + i0^+; i, j) = \int_0^\infty d(t - t') e^{i(\omega + i0^+)(t-t')} G(t, t'; i, j) \quad (2.19)$$

Il sera parfois plus pratique d'exprimer la fonction de Green dans le formalisme de Matsubara. Dans ce formalisme, la fonction de Green de Matsubara \mathcal{G} est écrite en fonction du temps imaginaire τ (qui correspond à it) :

$$\mathcal{G}(i, j; \tau - \tau') = -\langle T_\tau c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') \rangle \quad (2.20)$$

où T_τ est l'opérateur plaçant les opérateurs dans l'ordre chronologique des temps imaginaires, défini de la façon suivante :

$$T_\tau c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') = c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') \theta(\tau - \tau') - c_j^\dagger(\tau') c_i(\tau) \theta(\tau' - \tau) \quad (2.21)$$

Dans ce cas ci, $c_i(\tau) = e^{\tau(H - \mu N)} c_i e^{\tau(H - \mu N)}$. Le temps imaginaire est défini entre $-\beta$ et β , ce qui permet d'écrire sa transformée de Fourier en terme d'une somme sur des fréquences de Matsubara $i\omega_n$:

$$\mathcal{G}(i, j; i\omega_n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n(\tau - \tau')} \mathcal{G}(i, j; \tau - \tau') \quad (2.22)$$

Pour un système fermionique, les fréquences de Matsubara seront données par $i\omega_n = i\pi(2n + 1)/\beta$. Cette définition de la fonction de Green de Matsubara nous permet de lier cette dernière à la fonction de Green retardé à partir d'un prolongement analytique :

$$G_R(w; i, j) = \lim_{i\omega_n \rightarrow w + i0^+} \mathcal{G}(i\omega_n; i, j) \quad (2.23)$$

Une des caractéristiques de la fonction de Green est son comportement asymptotique qui est de $1/\omega$. À un ordre plus élevée dans le développement asymptotique, pour une fréquence z complexe quelconque, nous avons

$$G(\mathbf{k}, z) = \sum_{a=1}^{\infty} \frac{M_a(\mathbf{k})}{z^a} \quad (2.24)$$

Pour le modèle de Hubbard, les premiers moments $M_a(\mathbf{k})$ sont donnés par [24]

$$M_1(\mathbf{k}) = 1 \quad (2.25)$$

$$M_2(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + \frac{1}{2}Un \quad (2.26)$$

$$M_3(\mathbf{k}) = (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + Un(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) + \frac{1}{2}U^2n \quad (2.27)$$

où n est le remplissage du réseau (nombre d'électrons moyens par site).

Pour un système composé d'un nombre très grand d'électrons, la fonction de Green peut s'avérer être difficile à calculer. Cependant, il est possible d'utiliser différentes méthodes afin d'en avoir une approximation. Ainsi, dans ce document, nous utiliserons des méthodes d'évaluation de la fonction de Green afin d'étudier le modèle de Hubbard sur un réseau infini. Débutons d'abord par voir comment calculer la fonction de Green sur un amas de taille finie.

2.3 Résolution d'un amas de taille finie

Afin de comparer avec des matériaux tels que les cuprates, nous voudrions idéalement résoudre le modèle de Hubbard dans la limite thermodynamique. Il est possible d'étudier ce cas en passant par la résolution d'un amas de taille finie. Différentes approches permettent d'utiliser les données obtenues à partir d'un amas afin d'en déduire de façon approximative les quantités désirées pour le réseau infini. Par exemple, il est possible de procéder à une analyse en taille finie, en utilisant les quantités calculées sur différentes tailles d'amas et en extrapoler ensuite les informations pour un amas infini. D'autres approches insèrent l'amas dans un réseau et simulent l'environnement dudit amas. Ces méthodes sont par exemple la CPT, la VCA, la CDMFT et la DCA. Les approches qui nous intéresseront utiliseront la fonction de Green de l'amas.

Avant de considérer l'amas comme faisant parti d'un réseau, nous allons étudier dans cette section comment on peut résoudre le modèle de Hubbard sur un amas. Nous voulons calculer des quantités tel que l'énergie, la fonction de partition et la fonction de Green de l'amas. De façon général, nous voulons pouvoir évaluer la moyenne thermodynamique d'une observable \mathcal{O} :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H} \mathcal{O}]}{\text{tr} [e^{-\beta H}]} \quad (2.28)$$

Nous nous concentrerons particulièrement sur des approches basées sur la méthode de Lanczos. Différentes approches utilisant cette méthode seront présentées ici. Commençons d'abord par un bref aperçu d'une approche très simple : la diagonalisation complète.

2.3.1 Diagonalisation complète

La méthode la plus simple conceptuellement de calculer $\langle \mathcal{O} \rangle$ (voir équation (2.28)) est de procéder à une diagonalisation complète du hamiltonien. Cette approche consiste à déterminer toutes les énergies et états propres du hamiltonien H . Cette diagonalisation permet d'évaluer e^H , l'élément qui complexifie le calcul de l'équation (2.28). Cette méthode est exacte dans les limites de la précision numérique utilisée mais n'est possible en pratique que pour des petits amas sur lesquels la dimension de l'espace de Hilbert n'excède pas quelques milliers.

Différentes méthodes existent afin de réaliser une diagonalisation. La première étape pour diagonaliser le hamiltonien est de définir une base dans laquelle on peut écrire la matrice correspondant au hamiltonien. Par exemple, dans le cas du modèle de Hubbard, on peut utiliser la base des états localisés. Dans le cas d'une matrice symétrique, on peut utiliser la transformation de Householder pour mettre le hamiltonien sous une forme tridiagonale et d'utiliser ensuite l'algorithme QL pour diagonaliser cette matrice. Une description détaillée de ces méthodes est disponibles dans *Numerical Recipes* [25].

Le nombre d'opérations nécessaires pour diagonaliser complètement le hamiltonien avec cette approche est d'ordre D^3 , où D est la dimension de l'espace de Hilbert considéré. Ainsi, le temps de calcul croît de façon très importante en fonction de D . Or, la dimension de l'espace de Hilbert croît de façon exponentielle en fonction du nombre de sites, ce qui limite énormément les tailles des systèmes pouvant être étudiées dans une approche par diagonalisation complète. Pour observer cette tendance, on présente au tableau 2.1 la dimension de l'espace d'Hilbert pour différents espaces considérés selon l'ensemble thermodynamique considéré.

Puisque H commute avec les opérateurs S_z et N ⁴, il est possible d'écrire le hamiltonien sous une forme diagonale par bloc afin de réduire la taille des matrices à diagonaliser. En effet, on peut ainsi diagonaliser chacun des secteurs à N ou S_z fixés. On peut aussi utiliser les différentes symétries de l'amas pour simplifier le problème. Mais ceci ne change pas la croissance très importante des ressources informatiques nécessaires à la diagonalisation

4. Dans le cas où nous avons un champ de Weiss associé à la supraconductivité, H ne commute plus avec N , le nombre de particules n'étant plus conservé.

Nombre de sites	Ensemble canonique	Ensemble grand-canonique
2	4	16
4	36	256
6	400	4 096
8	4 900	65 536
10	63 504	1 048 576
12	853 776	16 777 216

TABLEAU 2.1 – Dimension de l'espace d'Hilbert en fonction de la sélection des états : ensemble canonique à demi-rempli, ensemble grand-canonique (tous).

complète. Lorsque le système étudié aura plus de 6 sites, nous devons utiliser d'autres méthodes d'approximation pour évaluer les quantités physiques recherchées.

Pour étudier un amas, on peut calculer les quantités désirées sans nécessairement diagonaliser l'amas, comme dans le cas des méthodes de Monte-Carlo quantique (QMC⁵). Ces méthodes ont connu un très grand succès pour l'étude d'amas aussi grands que 256 sites. Ceci a entre autres permis de faire des analyses de taille finie afin d'extrapoler les résultats pour un réseau infini. Cependant, les méthodes de type QMC posent un problème important. En effet, le problème de signe fait en sorte qu'on peut seulement étudier le modèle de Hubbard dans des cas particuliers (près du demi-remplissage et faible frustration du réseau). Le Monte-Carlo quantique nécessite de faire une moyenne sur différentes configurations, chaque configuration étant associée à un terme référant à une probabilité. L'échange de fermions mène à une alternance de signe dans les configurations, ce qui fait en sorte que l'écart type sur les observables devient grand et la convergence devient difficile.

Avant de s'attarder au cas à température finie, qui est plus général, nous allons voir comment calculer l'énergie du fondamental et la fonction de Green à température nulle. Dans ce cas, il est possible d'utiliser la méthode de Lanczos afin d'obtenir l'état fondamental du système. C'est cette approche que nous décrirons dans la section suivante. Nous verrons ensuite à la section 2.3.3 comment utiliser la méthode de Lanczos pour obtenir des résultats à température finie.

5. Quantum Monte Carlo

2.3.2 Méthodes de Lanczos à température nulle

La méthode de Lanczos nous permet de déterminer l'état fondamental sans devoir diagonaliser complètement le hamiltonien. Côté ressource, elle exige simplement de pouvoir effectuer le produit du hamiltonien par un vecteur quelconque. L'idée derrière la méthode de Lanczos est de projeter le hamiltonien de dimension D sur un sous-espace de dimension $L \ll D$ dans lequel on peut déterminer l'état fondamental avec une très grande précision.

Le sous-espace sur lequel nous projeterons le hamiltonien est le sous-espace de Krylov de dimension M que l'on construit à partir d'un vecteur quelconque $|\psi\rangle$. Ce sous-espace est construit en appliquant successivement le hamiltonien sur le vecteur $|\psi\rangle$. Il est donc défini par :

$$\text{span} \{ |\psi\rangle, H|\psi\rangle, H^2|\psi\rangle, \dots, H^{M-1}|\psi\rangle \}. \quad (2.29)$$

M est ici la dimension du sous-espace de Krylov et $\text{span}\{\}$ représente l'espace vectoriel généré par les vecteurs énumérés. Ainsi, ce sous-espace est déterminé par la grandeur de M et par le vecteur initial choisi.

On définit $|\phi_0\rangle = |\psi\rangle$. Le vecteur $|\phi_n\rangle$ est alors défini par l'orthogonalisation du vecteur $H^n|\psi\rangle$ par rapport aux vecteurs $\{|\phi_0\rangle, \dots, |\phi_{n-2}\rangle, |\phi_{n-1}\rangle\}$. On obtient ainsi la relation de récurrence suivante :

$$|\phi_{n+1}\rangle = H|\phi_n\rangle - a_n|\phi_n\rangle - b_n^2|\phi_{n-1}\rangle \quad (2.30)$$

où

$$a_n = \frac{\langle \phi_n | H | \phi_n \rangle}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle} \quad (2.31)$$

$$b_n^2 = \frac{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}{\langle \phi_{n-1} | \phi_{n-1} \rangle} \quad (2.32)$$

Les vecteurs ainsi créés forment une nouvelle base orthogonale. On peut les normaliser pour obtenir une base orthonormale :

$$|n\rangle = \frac{|\phi_n\rangle}{\sqrt{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}} \quad (2.33)$$

Lorsque projeté dans le sous-espace de Krylov, le hamiltonien prend une forme tri-diagonale dans la base des vecteurs $|n\rangle$:

$$\begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_M \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

Écrite sous cette forme, la matrice devient facilement diagonalisable. D'abord parce qu'il existe des méthodes pour diagonaliser efficacement les matrices tridiagonales. Ensuite parce que pour déterminer le fondamental, nous pourrions utiliser un sous-espace de Krylov de dimension $M \ll D$. En effet, avec la méthode de Lanczos, les états propres extrêmes du hamiltonien projeté (ceux dont les valeurs propres sont les plus grandes et les plus petites) convergent rapidement vers ceux du hamiltonien original en fonction de M . Le fondamental converge de façon exponentielle en fonction de M , à condition que le premier état excité ait une séparation nette avec le fondamental. Sinon la convergence est plus lente. Ainsi, nous pouvons obtenir avec quelques itérations ($M \sim 50$ à 200) l'énergie fondamentale avec la précision désirée, et du même coup l'état fondamental, et ce même pour des espaces de très grande dimension, même de l'ordre du million⁶.

Cependant, la méthode de Lanczos ne permet pas d'obtenir des états dégénérés. En fait, dans le cas où plusieurs états propres correspondent à une même valeur propre, la méthode de Lanczos permettra d'obtenir seulement la projection de l'état initial sur le sous-espace défini par ces vecteurs propres.

Calcul de la fonction de Green à température nulle

À la section précédente, nous avons utilisé la méthode de Lanczos afin de réécrire la matrice dans une forme plus facilement diagonalisable (projection dans l'espace de Krylov et forme tridiagonale) pour déterminer le fondamental. Nous pouvons aussi utiliser la méthode de Lanczos pour évaluer une expression de la forme $f(H)|\psi\rangle$, à condition que $f(H)$ puisse s'écrire selon un développement de Taylor. En effet, le développement de Taylor permet d'écrire $f(H)|\psi\rangle$ en fonction des éléments du sous-espace de Krylov, ce qui permet de croire que la méthode de Lanczos peut être utile pour évaluer ce terme.

6. La dimension requise pour obtenir une convergence suffisante du fondamental n'est pas proportionnelle à la taille du hamiltonien. En fait, la dimension requise augmente très faiblement en fonction de la dimension de l'espace initial.

Nous allons voir dans cette section comment calculer la fonction de Green à partir de la méthode de Lanczos.

L'expression que nous voulons évaluer ici est la fonction de Green à température nulle pour un amas :

$$G'_{ab}(z) = G'_{ab,e}(z) + G'_{ab,h}(z) \quad (2.35)$$

où

$$G'_{ab,e}(z) = \langle \Omega | c_a \frac{1}{z - H + E_0} c_b^\dagger | \Omega \rangle \quad (2.36)$$

$$G'_{ab,h}(z) = \langle \Omega | c_b^\dagger \frac{1}{z + H - E_0} c_a | \Omega \rangle \quad (2.37)$$

où a, b sont les indices de site et z la fréquence complexe considérée. Inverser directement le hamiltonien nécessiterait beaucoup de ressources. Pour simplifier les calculs, nous utiliserons la méthode de Lanczos pour évaluer l'expression. Nous montrerons comment calculer la partie *électron* ($G'_{ab,e}(z)$), mais le raisonnement reste identique pour la partie *trou* ($G'_{ab,h}(z)$).

Commençons par considérer le cas $a = b$, pour ainsi calculer $G'_{bb,e}(z)$. À partir de $|\varphi_b\rangle = c_b^\dagger |\Omega\rangle / b_0$, où $b_0^2 = \langle \Omega | c_b c_b^\dagger | \Omega \rangle$, nous démarrons une procédure de Lanczos, ce qui génère les éléments a_n et b_n (voir équations (2.31) et (2.32)). Nous avons ainsi la représentation tridiagonale du hamiltonien de l'équation (2.34), que nous noterons par T_H . Le calcul de $G'_{bb,e}(z)$ devient alors simple : il correspond à l'élément $G'_{bb}(z) = b_0 [(z - T_H + E_0)^{-1}]_{00}$. Il a été montré que cet élément peut s'écrire sous la forme [4] :

$$G'_{bb,e}(z) = \frac{b_0^2}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - a_2 - \dots}}} \quad (2.38)$$

Il devient donc simple de calculer la fonction de Green $G'_{bb,e}(z)$ de l'amas à partir des $\{a_n\}$ et $\{b_n\}$ générés par la méthode de Lanczos.

Cette approche par fraction continue est possible parce que nous avons considérés $a = b$ dans la fonction de Green. Dans ce cas les états sont identiques de chaque côté de la matrice inversée ($\langle \Omega | c_b$ et $c_b^\dagger | \Omega \rangle$). Lorsque $a \neq b$, la méthode proposée ne s'applique plus directement, ce qui rend un peu plus compliqué les calculs car il faudrait inverser complètement T_H . la représentation tridiagonale du hamiltonien.

Pour contourner cette complication, nous allons utiliser une approche qui pourra prendre avantage des fractions continues. Nous définissons d'abord

$$G_{ab,e}^+(z) = \langle \Omega | (c_a + c_b) \frac{1}{z - H + E_0} (c_a + c_b)^\dagger | \Omega \rangle \quad (2.39)$$

Nous avons alors que $G_{ab,e}^+(z)$ peut se calculer par la méthode des fractions continues. Ceci peut nous permettre de calculer aussi $G'_{ab,e}(z)$ en utilisant les fractions continues. Pour ce faire, nous devons utiliser la symétrie $G'_{ab,e}(z) = G'_{ba,e}(z)$. Cette dernière relation se démontre simplement. D'abord, on voit facilement que

$$(G'_{ab,e}(z))^* = G'_{ab,e}(z^*) \quad (2.40)$$

puisque H (et T_H) est réel. Dans ce cas, seulement z a une composante imaginaire. Nous pouvons aussi calculer $(G'_{ab,e}(z))^*$ à partir de l'équation (2.36), où nous devons ainsi appliquer le complexe conjugué de l'expression dont on fait la moyenne dans le fondamental. Cette opération fera en sorte d'interchanger les indices a et b , tout en remplaçant z par z^* . Ceci qui nous permet d'écrire que

$$(G'_{ab,e}(z))^* = G'_{ba,e}(z^*) \quad (2.41)$$

En combinant les équations (2.40) et (2.41), nous obtenons, tel que nous voulions démontrer, que

$$G'_{ab,e}(z) = G'_{ba,e}(z) \quad (2.42)$$

Ce dernier résultat, combiné avec l'équation (2.39), nous permet d'écrire

$$G'_{ab,e}(z) = \frac{1}{2} \left(G_{ab,e}^+(z) - G'_{aa,e}(z) - G'_{bb,e}(z) \right) \quad (2.43)$$

Cette dernière relation nous permet alors de calculer $G'_{ab,e}(z)$ à partir de fractions continues, même lorsque $a \neq b$.

2.3.3 Méthode de Lanczos à température finie

Tel que vu à la section précédente, la diagonalisation par la méthode de Lanczos permet de déterminer les états propres extrêmes du hamiltonien. En se restreignant à l'espace de Krylov, nous n'obtenons pas un bon échantillonnage de tout l'espace : nous ne pouvons pas utiliser les états propres du hamiltonien projeté pour réaliser une moyenne

thermodynamique.

Le but ici est de calculer des quantités thermodynamiques qui s'écrivent sous la forme :

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H} \mathcal{O}]}{\text{Tr} [e^{-\beta H}]} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} \mathcal{O} | n \rangle\end{aligned}\quad (2.44)$$

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle \quad (2.45)$$

où \mathcal{O} est l'opérateur associé à la quantité que l'on veut calculer, $\{|n\rangle\}$ est une base orthogonale complète, $\beta = 1/T$ et Z est la fonction de partition.

La partie qui peut poser problème à calculer ici est :

$$e^{-\beta H} |n\rangle = \sum_k \frac{(-\beta)^k}{k!} H^k |n\rangle \quad (2.46)$$

Les termes de cette dernière somme peuvent se calculer exactement à partir de la méthode de Lanczos lorsque $k < M$. En effet, dans ce cas, nous avons

$$H^k |n\rangle = \sum_i \epsilon_{ni}^k |\phi_{ni}\rangle \langle \phi_{ni} | n \rangle \quad (2.47)$$

où $|\phi_{ni}\rangle$ sont les états propres trouvés par la méthode de Lanczos à partir du vecteur de départ $|n\rangle$ et ϵ_{ni} sont les valeurs propres correspondantes.

La démonstration de cette dernière relation se fait simplement. Intuitivement, ceci a du sens étant donné que les termes $H^k |n\rangle$ sont les éléments du sous-espace de Krylov, sous-espace dans lequel est projeté le hamiltonien.

En définissant P_M comme étant le projecteur dans le sous-espace de Krylov de dimension M généré à partir du vecteur $|n\rangle$, nous avons que

$$P_M H P_M = \sum_{i=1}^M \epsilon_{ni}^m |\phi_{ni}\rangle \langle \phi_{ni} | \quad (2.48)$$

Lorsque le projecteur est appliqué sur un état faisant parti de l'espace de Krylov, il

laisse cet état inchangé :

$$P_M H^m |n\rangle = H^m |n\rangle \quad (\text{si } 0 \leq m < M) \quad (2.49)$$

Considérant que $PP = P$, P étant un projecteur quelconque, et utilisant la relation précédente, nous pouvons déduire que

$$(P_M H P_M)^m |n\rangle = H^m |n\rangle \quad (\text{si } 0 \leq m < M) \quad (2.50)$$

En effet, dans ce cas le projecteur est toujours appliqué sur un état du sous-espace de Krylov. Ainsi, en combinant cette dernière relation à l'équation (2.48), on peut en déduire :

$$\begin{aligned} H^m |n\rangle &= (P_M H P_M)^m |n\rangle \\ &= \left(\sum_i \epsilon_{ni} |\phi_{ni}\rangle \langle \phi_{ni}| \right)^m |n\rangle \\ &= \sum_i \epsilon_{ni}^m |\phi_{ni}\rangle \langle \phi_{ni}|n\rangle \end{aligned} \quad (2.51)$$

C'est bien l'équation que nous voulions démontrer.

Pour $m \geq M$, cette relation devient approximative. Ainsi, avec une précision de l'ordre de $(-\beta H)^M$ en température dans le développement de l'exponentielle, nous avons que :

$$e^{-\beta H} |n\rangle \approx \sum_i e^{-\beta \epsilon_{ni}} |\phi_{ni}\rangle \langle \phi_{ni}|n\rangle \quad (2.52)$$

Cette dernière relation est au coeur de la méthode de Lanczos à température finie (FTLM⁷), développée par Jaklič et Prelovšek [26].

Moyenne thermodynamique et états aléatoires

Pour obtenir le résultat exact, nous devons sommer l'équation (2.44) sur une base orthonormée (les $|n\rangle$) ce qui devient problématique si l'espace est très grand. Afin de réduire le temps de calcul, nous verrons qu'il est possible de calculer approximativement la trace sur un ensemble fini de R états aléatoires $|\tau\rangle$, avec $R \ll D$. Ces vecteurs sont

7. Finite Temperature Lanczos Method

définis par

$$|r\rangle = \sum_i \xi_{ri} |i\rangle \quad (2.53)$$

où les $|i\rangle$ forment une base orthonormée quelconque et les $\xi_{ri} = \langle i|r\rangle$ sont sélectionnés de façon aléatoire, de sorte à obtenir

$$\langle\langle \xi_{ri} \rangle\rangle = 0 \quad (2.54)$$

$$\langle\langle \xi_{ri} \xi_{sj} \rangle\rangle = \delta_{ij} \delta_{rs} \quad (2.55)$$

Dans les équations précédentes, l'opération $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ définit la moyenne statistique. Nous avons posé que $\xi_{ri} \in \mathbb{R}$ plutôt que de généraliser les expressions aux complexes. En effet, tous nos calculs peuvent se faire à partir des réels, ce qui est plus efficace côté rapidité de calcul. Si nous travaillions dans les complexes, l'équation (2.55) s'écrirait plutôt sous la forme $\langle\langle \xi_{ri} \xi_{sj} \rangle\rangle = 0$, $\langle\langle \xi_{ri}^* \xi_{sj}^* \rangle\rangle = 0$ et $\langle\langle \xi_{ri}^* \xi_{sj} \rangle\rangle = \delta_{ij} \delta_{rs}$.

À partir des relations précédentes, nous pouvons déduire qu'en moyenne, la trace partielle d'un opérateur quelconque \mathcal{O} sur un ensemble fini de vecteurs aléatoires donnera en moyenne :

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle \frac{1}{R} \sum_r \langle r|\mathcal{O}|r\rangle \right\rangle\right\rangle &= \sum_{ij} \sum_r \langle\langle \xi_{ri} \xi_{rj} \rangle\rangle \langle i|\mathcal{O}|j\rangle \\ &= \sum_i \sum_r \langle\langle \xi_{ri} \xi_{ri} \rangle\rangle \langle i|\mathcal{O}|i\rangle + \sum_{i \neq j} \sum_r \langle\langle \xi_{ri} \xi_{rj} \rangle\rangle \langle i|\mathcal{O}|j\rangle \\ &= \sum_i \langle i|\mathcal{O}|i\rangle \\ &= \text{Tr}[\mathcal{O}] \end{aligned} \quad (2.56)$$

Ce dernier résultat n'est vrai qu'en moyenne. Les différentes solutions trouvées vont fluctuer autour de cette valeur. Tel que présenté dans l'article de Iitaka et Ebisuzaki [27], l'ordre de grandeur des fluctuations, si l'on travaille avec les réels, est donné par

$$|\delta\mathcal{O}|^2 = \frac{1}{R} \left\{ (\langle\langle |\xi_i|^4 \rangle\rangle - 1) \sum_i |\mathcal{O}_{ii}|^2 + 2 \sum_{i \neq j} |\mathcal{O}_{ij}|^2 \right\} \quad (\xi_i \in \mathbb{R}) \quad (2.57)$$

Dans le cas où l'on travaillerait dans l'ensemble des complexes, le résultat serait presque identique, avec le facteur 2 du dernier terme en moins :

$$|\delta\mathcal{O}|^2 = \frac{1}{R} \left\{ (\langle\langle |\xi_i|^4 \rangle\rangle - 1) \sum_i |\mathcal{O}_{ii}|^2 + \sum_{i \neq j} |\mathcal{O}_{ij}|^2 \right\} \quad (\xi_i \in \mathbb{C}) \quad (2.58)$$

Ces résultats sont obtenus en supposant que tous les nombres aléatoires sont générés de la même façon. Ainsi, en fonction de R , l'erreur sera de l'ordre de $1/\sqrt{R}$. Nous remarquons aussi que l'erreur est influencée par les termes diagonaux et hors-diagonaux de la matrice étudiée. Cependant, pour le cas qui nous intéresse, avec le calcul de la fonction de Green, nous pouvons difficilement estimer la valeur de ceux-ci pour déterminer comment est influencée l'erreur sur la moyenne.

L'erreur dépendra aussi de la façon de générer les vecteurs aléatoires. Iitaka et Ebisuzaki [27] proposent différentes façons de générer les ξ_i . Dans l'ensemble des complexes, ils proposent d'utiliser les vecteurs à phase aléatoire, où $\xi_i = e^{i\theta}$, ce qui minimise l'erreur puisque $|\xi_i| = 1$, ce qui annule le premier terme de l'équation (2.58). L'équivalent de cette approche pour les réels est l'utilisation de vecteurs à signes aléatoires, avec $\xi_i = \pm 1$. Ceci minimise aussi l'erreur dans l'équation (2.57). En effet, ce qui nous assure que l'erreur est minimisée est l'inégalité

$$\langle\langle |\xi_i|^4 \rangle\rangle \geq (\langle\langle |\xi_i|^2 \rangle\rangle)^2 = 1. \quad (2.59)$$

Génération de vecteurs aléatoires distribués uniformément

Une autre façon de procéder est de générer des vecteurs dont la direction est totalement aléatoire dans l'espace. En générant les nombres aléatoires ξ_i avec une distribution uniforme, nous n'obtenons pas des vecteurs dont la direction est aléatoire dans l'espace. Ce problème peut être évité de façon simple en utilisant une distribution gaussienne pour générer les nombres aléatoires, tel que proposé entre autres par Muller [28]. La valeur de chaque composante du vecteur $\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_D)$ créé sera déterminée en fonction d'une densité de probabilité proportionnelle à $P(x) = e^{-x^2}$. La densité de probabilité totale qu'un vecteur soit à la position \mathbf{r} sera alors proportionnelle au produit des probabilités pour chacune des coordonnées, soit $P(x_1)P(x_2)\dots P(x_D) = e^{-\mathbf{a}\mathbf{r}^2}$. Cette densité dépend seulement de la grandeur de \mathbf{r} , mais pas de sa direction. Nous avons donc une densité de probabilité qui est uniforme en fonction de la direction du vecteur.

Pour générer des nombres selon une densité de probabilité $P(x)$, dans notre cas une densité de probabilité gaussienne, à partir d'une distribution de probabilité uniforme, nous allons simplement utiliser la méthode de rejet. Cette méthode consiste à générer

un couple de point (x, y) , selon la densité uniforme. Si $P(x) < y$, on conserve x , sinon on le rejette. Les nombres conservés seront ainsi distribués selon la densité de probabilité $P(x)$.

Étant donné notre échantillonnage limité comparé à la taille du système, le problème d'échantillonnage non-uniforme ne risque pas de poser problème. Mais puisque ceci ne prend pas significativement plus de ressource, il peut être ajouté au code par précaution.

Notons que cette approche où on sélectionne aléatoirement la direction des vecteurs est en théorie moins efficace que celle où on sélectionne $\xi_i = \pm 1$. En effet, étant donné l'inégalité (2.59), l'amplitude de l'erreur sur la moyenne augmentera dans l'équation (2.57).

Moyenne thermodynamique et présence de la fonction de partition

Dans le cas qui nous intéresse, nous avons plutôt à calculer le rapport de deux moyennes. En utilisant les mêmes vecteurs, la moyenne statistique de la solution ne peut plus être calculée de la même façon à cause de la présence de termes non linéaires. Le numérateur et le dénominateur sont corrélés, faisant en sorte que :

$$\left\langle\left\langle \frac{\sum_r \langle r | e^{-\beta H} \mathcal{O} | r \rangle}{\sum_r \langle r | e^{-\beta H} | r \rangle} \right\rangle\right\rangle \neq \frac{\left\langle\left\langle \sum_r \langle r | e^{-\beta H} \mathcal{O} | r \rangle \right\rangle\right\rangle}{\left\langle\left\langle \sum_r \langle r | e^{-\beta H} | r \rangle \right\rangle\right\rangle} \quad (2.60)$$

Sachant tout de même que le numérateur et le dénominateur convergent vers la solution attendue en fonction de R , nous pouvons en déduire que le rapport va aussi converger lorsque R augmente.

Le fait que le numérateur et le dénominateur soient corrélés permettent de mieux faire converger la solution. Bien que ceci ne soit pas à l'étude dans ce document (le calcul de $|\delta O|$ est beaucoup plus complexe), des méthodes telle que celle du Jackknife permettent de comprendre pourquoi ce rapport fluctue moins que chacun des termes qui le compose [29].

Effet de la dimension et dimension effective

La dimension de l'espace de Hilbert du système considéré joue un rôle dans la convergence des solutions. D'abord, les termes hors diagonaux présents à la deuxième ligne de l'équation (2.56) ne sont pas nuls dans le cas d'un calcul concret. Ces termes oscilleront aléatoirement autour de 0. Ainsi, plus il y aura de termes sommés, plus le terme hors-

diagonal tendra en moyenne vers 0. Le nombre de termes sommés sera $RD(D-1)$. Ainsi, en augmentant la dimension, nous aurons en théorie une meilleure précision.

D'un autre côté, une augmentation de la dimension fait en sorte, dans les cas comme le nôtre, d'augmenter la densité du spectre des états propres. Plus ceux-ci sont rapprochés, plus ils se confondent dans leur contribution à la moyenne thermodynamique. Ainsi, pour une région donnée dans le spectre, il y a davantage de nombres aléatoires qui sont sommés, ce qui permet une convergence plus rapide.

À faible température, certains secteurs de l'espace de Hilbert ont une contribution négligeable en raison de la petitesse du poids de Boltzmann. Pour comprendre ceci, posons d'abord

$$\Theta(E_c - H) = \sum_i \theta(E_c - E_i) |i\rangle\langle i|, \quad (2.61)$$

$\theta(x)$ étant la fonction de Heaviside et E_c une énergie de coupure. Dans le cas précédent, les $|i\rangle$ représentent les états propres du hamiltonien H et E_i les énergies propres correspondantes. En fixant correctement l'énergie de coupure, nous aurons

$$\langle r|\Theta^\dagger(E_c - H) e^{-\beta H} \mathcal{O} e^{-\beta H} \Theta(E_c - H)|r\rangle \approx \langle r|e^{-\beta H} \mathcal{O} e^{-\beta H}|r\rangle \quad (2.62)$$

Nous pouvons fixer l'énergie de coupure en fonction de la précision désirée. Ceci entraîne qu'une partie de l'espace d'Hilbert ne contribue pas de façon significative aux calculs thermodynamiques. En fait, nous définirons ici une *dimension effective* D_{eff} qui correspond au nombre d'états propres du hamiltonien contribuant significativement au calcul. Une façon d'estimer cette dimension effective D_{eff} , est de calculer

$$D_{\text{eff}} \sim D \frac{\sum_r \langle r|\Theta(E_c - H)|r\rangle}{\sum_r \langle r|r\rangle} \quad (2.63)$$

Cette façon de faire le calcul peut être utile lorsqu'on ne diagonalise pas complètement le hamiltonien, par exemple avec la méthode de Lanczos.

La FTLM en résumé

Ainsi, en combinant l'approximation de l'évaluation du poids de Boltzmann de l'équation (2.52) avec l'approximation de la trace par un ensemble de vecteurs aléatoires, nous

pouvons écrire la moyenne d'un opérateur sous la forme

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{1}{Z} \sum_r^R \sum_i^M e^{\beta \epsilon_{ri}} \langle r | \phi_{ri} \rangle \langle \phi_{ri} | \mathcal{O} | r \rangle \quad (2.64)$$

$$Z = \sum_r^R \sum_i^M e^{\beta \epsilon_{ri}} |\langle r | \phi_{ri} \rangle|^2 \quad (2.65)$$

Ceci nous permet de réduire considérablement les ressources requises pour ce genre de calcul. Nous n'avons plus besoin de diagonaliser complètement le hamiltonien et la moyenne thermodynamique est réduite à un sous-ensemble restreint.

Limites de la FTLM à basse température

La FTLM est davantage problématique à basse température, où les fluctuations risquent de devenir importantes. En effet, lorsque $T = 0$, la formule (2.64) devient

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{\sum_{r=1}^R \langle \phi_0 | r \rangle \langle r | \mathcal{O} | \phi_0 \rangle}{\sum_{r=1}^R \langle \phi_0 | r \rangle \langle r | \phi_0 \rangle} \quad (2.66)$$

où $|\phi_0\rangle$ est l'état fondamental, facilement déterminé par la méthode de Lanczos. Cette dernière équation nous fait remarquer qu'à température nulle, il existe des fluctuations dans la solution trouvée par la FTLM alors que le fondamental est pourtant connu. Pour calculer la valeur moyenne de l'opérateur, nous aurons besoin de plusieurs états aléatoires $|r\rangle$ pour que la somme converge, tel que démontré dans l'article de Aichhorn et al [30].

La FTLM est en fait plus efficace à haute température. Nous verrons à la prochaine section comment on peut modifier la FTLM afin d'obtenir un résultat qui converge vers la valeur recherchée à $T \rightarrow 0$, ce qui nous permettra d'obtenir une meilleur convergence à faible température.

2.3.4 Méthode de Lanczos à basse température et RVLM

Tel que discuté précédemment, les moyennes thermodynamiques ne convergent pas correctement à $T \rightarrow 0$, sauf si l'on utilise beaucoup d'états aléatoires. Ceci peut sembler paradoxal puisque le fondamental est pourtant trouvé facilement avec la méthode de

Lanczos. Il est possible de modifier la FTLM afin d'obtenir à $T \rightarrow 0$ le comportement attendu, et ainsi rendre la méthode efficace autant à basse qu'à haute température.

L'invariance cyclique de la trace nous permet d'écrire que

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\frac{1}{2}\beta H} \mathcal{O} e^{-\frac{1}{2}\beta H} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right]} \quad (2.67)$$

Lorsque nous effectuons assez d'itérations dans l'algorithme de Lanczos (quelques dizaines), nous savons que le fondamental fera partie des états propres trouvés. Ceci fait en sorte qu'en utilisant la méthode de Lanczos pour calculer le produit de $e^{-\beta H}/Z$ par un vecteur aléatoire $|r\rangle$ à $\beta \rightarrow \infty$, on obtiendra le fondamental. En effet, $e^{-\beta H}/Z \rightarrow |\phi_0\rangle\langle\phi_0|$ lorsque $\beta \rightarrow 0$. C'est ce qu'on devrait aussi obtenir si le calcul était exact :

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta H}}{Z^{1/2}} |r\rangle = |\phi_0\rangle \quad (2.68)$$

Ainsi, en partant de la formulation (2.67) plutôt que (2.44), nous obtenons qu'à l'aide de la méthode de Lanczos, en utilisant un seul état aléatoire

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} \langle \mathcal{O} \rangle &\approx \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\langle r | e^{-\frac{1}{2}\beta H} \mathcal{O} e^{-\frac{1}{2}\beta H} | r \rangle}{\langle r | e^{-\beta H} | r \rangle} \\ &= \frac{\langle \phi_0 | \mathcal{O} | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | \phi_0 \rangle} \end{aligned} \quad (2.69)$$

En séparant le poids de Boltzmann en deux parties, nous obtenons ainsi une plus grande précision que la FTLM lorsque la température tend vers 0.

L'approche proposée ici consistera à faire la moyenne thermodynamique sur R vecteurs aléatoires en utilisant la forme 2.67 et en utilisant la méthode de Lanczos pour calculer explicitement les termes $e^{-\frac{1}{2}\beta H}|r\rangle$. Pour la distinguer des autres méthodes, nous allons la nommer RVLM (Random Vectors Lanczos Method).

L'approche décrite dans cette section, la RVLM, est très peu différente de la Méthode de Lanczos à basse température (LTLM⁸) développée par Aichhorn et al. [26]. La subtilité qui diffère entre cette approche et celle présentée dans ce travail est que nous calculons directement la valeur de $e^{-\frac{1}{2}\beta H}|r\rangle$ avec la méthode de Lanczos. Dans l'approche proposée originalement, on laisse ce terme sous une forme développée :

8. Low Temperature Lanczos Method

$$e^{-\frac{1}{2}\beta H}|r\rangle \rightarrow \sum_i e^{\beta\epsilon_{ri}}|\phi_{ri}\rangle\langle\phi_{ri}|r\rangle \quad (2.70)$$

Ainsi, dans la version originale de la LTML, pour calculer la moyenne thermodynamique de l'observable \mathcal{O} , on garde en mémoire les termes $\langle\phi_{ri}|\mathcal{O}|\phi_{rj}\rangle$, $\langle\phi_{ri}|r\rangle$ et ϵ_{ri} pour les différents états aléatoires $|r\rangle$. Avec notre méthode, nous n'avons pas besoin de garder autant d'information en mémoire, rendant le calcul plus court tout en économisant de l'espace mémoire. Afin de limiter les ressources nécessaires pour les calculs, Aichhorn et al. ont introduit une énergie de coupure E_c à partir de laquelle on élimine les états propres dans le calcul thermodynamique. La LTML est alors utilisée seulement lorsque la température est petite. À plus haute température, la FTLM est suffisante.

Malgré que la LTML requière davantage de ressources, elle a tout de même un avantage. Elle peut être utile dans certains calculs, comme ceux des fonctions de corrélation, lorsque nous avons plusieurs moyennes thermodynamiques à calculer à différentes températures et différents potentiels chimiques pour un même hamiltonien. Ceci deviendra plus évident lorsqu'on présentera comment calculer des fonctions de Green à la section suivante.

Pour une configuration donnée du système (avec la température et le potentiel chimique fixés), notre approche ne requiert pas davantage de ressources que la FTLM, ce qui fait en sorte qu'il n'y a pas nécessairement un avantage à utiliser la FTLM. Notre approche sera utile à combiner avec des méthodes tel que la VCA, méthode variationnelle qui requiert de calculer plusieurs fonctions de Green à partir de configurations différentes pour chaque température. La VCA est présentée à la section 2.5.

2.3.5 Calculs des fonctions de Green à température finie

Dans cette section, nous nous intéresserons au calcul de fonctions de Green, éléments essentiels pour les calculs de la VCA ou de la CPT. Nous avons déjà vu comment calculer la fonction de Green à température nulle à la section 2.3.2 et nous verrons ici comment on procède pour faire ce même type de calcul à température finie.

La quantité que l'on veut calculer est la fonction de Green retardée qui peut s'écrire sous la forme

$$G_{ab}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} G_{ab}(t) \quad (2.71)$$

où

$$\begin{aligned} G_{ab}(t) &= -i \left\langle \left\{ c_a(t), c_b^\dagger(0) \right\} \right\rangle \theta(t) \\ &= G_{ab,h}(t) + G_{ab,e}(t) \end{aligned} \quad (2.72)$$

Dans cette dernière expression, nous avons divisé $G_{ab}(t)$ en deux contributions : celle des trous ($G_{ab,h}(t)$) et celle des électrons ($G_{ab,e}(t)$). Ces contributions sont données par

$$G_{ab,e}(t) = -i \left\langle \Psi_a(t) \Psi_b^\dagger(0) \right\rangle \theta(t) \quad (2.73)$$

$$G_{ab,h}(t) = -i \left\langle \Psi_b^\dagger(0) \Psi_a(t) \right\rangle \theta(t) \quad (2.74)$$

Attardons-nous maintenant au calcul de $G_{ab,e}(\omega)$ pour montrer comment la méthode de Lanczos est appliquée à ce problème. On pourra calculer $G_{ab,h}(\omega)$ de la même façon. Nous commencerons par voir comment calculer la fonction de Green à l'aide de la FTLM et ensuite à partir de RVLM.

Fonction de Green à partir de la FTLM

Afin de simplifier les calculs thermodynamiques, nous commençons d'abord par remplacer la trace par une somme sur M états aléatoires. Ainsi en explicitant la moyenne thermodynamique dans l'ensemble canonique, nous obtenons

$$G_{ab,e}(t) \approx -\frac{i}{Z} \sum_r^R \langle r | e^{-\beta H} e^{itH} c_a e^{-itH} c_b^\dagger | r \rangle \theta(t) \quad (2.75)$$

avec

$$Z = \sum_r^R \langle r | e^{-\beta H} | r \rangle \quad (2.76)$$

Notons que Z ne réfère pas directement à la fonction de partition de l'ensemble canonique, mais plutôt à celle correspondant au choix des vecteurs aléatoires utilisés.

Pour réécrire les exponentielles de façon à pouvoir calculer numériquement cette dernière expression, nous allons utiliser la méthode de Lanczos. Nous allons devoir appliquer une procédure de Lanczos à deux endroits différents dans l'équation : une à partir de chaque vecteur aléatoire $|r\rangle$ (R procédures de Lanczos) et une autre à partir de chaque vecteur $c_b^\dagger |r\rangle$ ($R \times L$ procédures de Lanczos). Dans le premier cas, les vecteurs et énergies propres déterminés par la méthode de Lanczos sont notés par $|\psi_{ni}\rangle$ et ϵ_{ni} respectivement,

alors que dans le deuxième cas ils sont notés par $|\phi_{nbj}\rangle$ et λ_{nbj} . Nous obtenons alors que

$$\begin{aligned} G_{ab,e}(t) &= -\frac{i}{Z} \sum_r \sum_{ij} \langle r|\psi_{ri}\rangle \langle \psi_{ri}|e^{-\beta H} e^{itH} c_a e^{-itH} |\phi_{rbj}\rangle \langle \phi_{rbj}|c_b^\dagger|r\rangle \theta(t) \\ &= -\frac{i}{Z} \sum_r \sum_{ik} e^{-\beta \epsilon_{ri}} e^{i(\epsilon_{ri} - \lambda_{rbj})t} \langle r|\psi_{ri}\rangle \langle \psi_{ri}|c_a|\phi_{rbj}\rangle \langle \phi_{rbj}|c_b^\dagger|r\rangle \theta(t) \end{aligned} \quad (2.77)$$

Afin d'alléger la notation, nous allons utiliser

$$u_{rij}^{ab} = \langle r|\psi_{ri}\rangle \langle \psi_{ri}|c_a|\phi_{rbj}\rangle \langle \phi_{rbj}|c_b^\dagger|r\rangle \quad (2.78)$$

$$v_{rij}^b = \epsilon_{ri} - \lambda_{rbj} \quad (2.79)$$

pour ainsi obtenir que

$$G_{ab,e}(t) = -\frac{i}{Z} \sum_r \sum_{ij} e^{-\beta \epsilon_{ri}} e^{itv_{rij}^b} u_{rij}^{ab} \theta(t) \quad (2.80)$$

La transformée de Fourier sur le temps de cette dernière fonction n'est pas définie si la fréquence est purement réelle. En ajoutant un élément imaginaire infinitésimal $i\eta$ à la fréquence, l'intégrale converge et on obtient la fonction de Green retardée : $\lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\omega + i\eta)$. De façon plus générale, nous pouvons simplement calculer la fonction de Green pour une fréquence complexe z quelconque, en supposant toujours que z a une partie imaginaire positive non-nulle. Ainsi,

$$\begin{aligned} G_{ab,e}(z) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{izt} G_{ab,e}(t) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_r \sum_{ij} \frac{e^{-\beta \epsilon_{ri}} u_{rij}^{ab}}{z + v_{rij}^b} \end{aligned} \quad (2.81)$$

De la même façon, pour $G_{ab,h}(z)$, en notant cette fois-ci les états et énergies propres générés à partir du vecteur de départ $c_b|r\rangle$ par $|\tilde{\phi}_{rbk}\rangle$ et $\tilde{\lambda}_{rbk}$ respectivement, on obtient

$$G_{ab,h}(z) = \frac{1}{Z} \sum_r \sum_{ik} \frac{e^{-\beta \epsilon_{ri}} u_{rik}^{ab}}{z + v_{rik}^b} \quad (2.82)$$

avec

$$u_{rik}^{ab} = \langle r | c_b^\dagger | \tilde{\phi}_{rbk} \rangle \langle \tilde{\phi}_{rbk} | c_a | \psi_{ri} \rangle \langle \psi_{ri} | r \rangle \quad (2.83)$$

$$v_{rik}^b = -\epsilon_{ri} + \tilde{\lambda}_{rbk} \quad (2.84)$$

Pour le calcul de la fonction de partition Z , on obtient

$$Z = \sum_r \sum_i e^{-\beta \epsilon_{ri}} |\langle r | \psi_{ri} \rangle|^2 \quad (2.85)$$

Fonction de Green à partir de la RVLM

La fonction de Green peut aussi se calculer avec la RVLM. Les étapes sont similaires à celles de la section précédente, à l'exception qu'une des procédures de Lanczos sert directement à calculer le terme suivant :

$$|r(\beta)\rangle = e^{-\beta H/2} |r\rangle. \quad (2.86)$$

Ainsi, avec la RVLM, la fonction de Green sera donnée par

$$G_{ab}(z) = G_{ab,e}(z) + G_{ab,h}(z)$$

$$G_{ab,e}(z) = \frac{1}{Z} \sum_r \sum_{ij} \frac{u_{rij}^{ab}}{z + i\eta + v_{rik}^b}$$

$$G_{ab,h}(z) = \frac{1}{Z} \sum_r \sum_{ik} \frac{u_{rik}^{ab}}{z + i\eta + v_{rik}^b}$$

$$Z = \sum_r |\langle r(\beta) | r(\beta) \rangle|^2 \quad (2.87)$$

$$u_{rij}^{ab} = \langle r(\beta) | \psi_{ri} \rangle \langle \psi_{ri} | c_a | \phi_{rbj} \rangle \langle \phi_{rbj} | c_b^\dagger | r(\beta) \rangle$$

$$v_{rmk}^b = \epsilon_{ri} - \lambda_{rbj}$$

$$u_{rik}^{ab} = \langle r(\beta) | c_b^\dagger | \tilde{\phi}_{rbk} \rangle \langle \tilde{\phi}_{rbk} | c_a | \psi_{ri} \rangle \langle \psi_{ri} | r(\beta) \rangle$$

$$v_{rik}^b = -\epsilon_{ri} + \tilde{\lambda}_{rbk}$$

Dans ces dernières formules, les états propres $|\phi_{rbj}\rangle$ (d'énergie λ_{rbj}) et $|\tilde{\phi}_{rbj}\rangle$ (d'énergie $\tilde{\lambda}_{rbj}$) sont déterminés par la méthode de Lanczos en utilisant les vecteurs de départ $c_b|r(\beta)\rangle$ et $c_b^\dagger|r(\beta)\rangle$ respectivement.

Si nous avons utilisé la version originale de la LTLM, nous aurions eu une somme supplémentaire puisque nous aurions écrit explicitement $|r(\beta)\rangle$. De plus, nous aurions eu à appliquer une procédure de Lanczos pour chacun des états $c_b|\psi_{ri}\rangle$, ce qui aurait exigé plus de temps de calcul si on devait trouver la fonction de Green à une température donnée, par opposition à un balayage en température.

Tout comme pour la FTLM, pour garder en mémoire les informations permettant de calculer la fonction de Green, nous avons besoin d'emmagasiner $(L+3)LM^2R$ nombres en mémoire⁹, soit ceux correspondant aux termes u_{rij}^{ab} , v_{rmk}^b , $u_{rij}'^{ab}$ et v_{rmk}^b . Ainsi, la mémoire utilisée par la RVLN ne dépend pas de la dimension de l'espace de Hilbert, sauf pendant les procédures de Lanczos, ce qui fait en sorte que l'espace mémoire requis n'augmente pas très rapidement en fonction de la taille de l'amas. Une façon de réduire l'espace mémoire nécessaire est de fixer les fréquences de Matsubara qui seront utilisées pour les différents calculs et ainsi calculer la contribution de chaque vecteur aléatoire au calcul de $G_{ab}(z)$ directement¹⁰. Si les calculs nécessitent d'utiliser N_M fréquences de Matsubara, nous devons alors enregistrer $L(L+1)N_M$ termes en mémoire.

Il faut aussi considérer que dans tous les cas, pendant le temps que les différents éléments sont calculés (soient les u et v , ou sinon les contributions à G), il faut emmagasiner MD vecteurs de Lanczos. Ceci peut prendre beaucoup de mémoire lorsque la taille du système augmente. Cependant, nous verrons que nous pourrons utiliser des amas jusqu'à 12 sites.

2.3.6 États de Lanczos comme vecteurs de base

Comme nous avons vu plus haut, les états extrêmes sont ceux qui convergent le plus rapidement. Ainsi, à basse température, certains ont suggéré de garder, après plusieurs itérations dans Lanczos, les états de plus basse énergie afin de réaliser la moyenne thermodynamique. D'abord, Plouffe présente dans son mémoire [31] une approche utilisant l'ensemble des vecteurs propres de Lanczos dans les calculs thermodynamiques des fonctions de Green servant au calcul à partir de la théorie des perturbations inter-amas. Plus

9. En utilisant le fait que $G_{ab}(z) = G_{ba}(z)$, nous devons considérer seulement $L(L+1)/2$ couples a, b .

10. En fait, nous devons calculer séparément la fonction de partition Z et la somme dans l'évaluation de $G_{ab,e}(z)$

récemment, Capone et al. ont appliqué cette approche, en gardant les états de plus basse énergie, à la théorie du champ moyen dynamique [32] .

De façon simple, l'approche consiste à approximer la moyenne thermodynamique par

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{\sum_i e^{-\beta \epsilon_i} \langle \phi_i | \mathcal{O} | \phi_i \rangle}{\sum_i e^{-\beta \epsilon_i} \langle \phi_i | \phi_i \rangle} \quad (2.88)$$

où $|\phi_i\rangle$ et ϵ_i et sont respectivement les vecteurs et valeurs propres obtenus par la méthode de Lanczos. Nous ne faisons plus référence ici au choix du vecteur aléatoire. En effet, nous devrions faire suffisamment d'itérations dans la méthode de Lanczos pour que le résultat ne dépende pas du vecteur aléatoire initial. Dans ce document, nous utiliserons l'acronyme LVM (*Lanczos Vectors Method*) pour décrire cette méthode.

Dans le cas qui nous intéresse, la fonction de Green sera ainsi calculée selon

$$G_{ab,e}(z) = \frac{1}{Z} \sum_{ij} \frac{e^{-\beta \epsilon_i} \langle \psi_i | c_a | \phi_{bij} \rangle \langle \phi_{bij} | c_b^\dagger | \psi_i \rangle}{z + i\eta + \epsilon_i - \lambda_{bij}} \quad (2.89)$$

$$G_{ab,h}(z) = \frac{1}{Z} \sum_{ik} \frac{e^{-\beta \epsilon_i} \langle \psi_i | c_b^\dagger | \tilde{\phi}_{bik} \rangle \langle \tilde{\phi}_{bik} | c_a | \psi_i \rangle}{z + i\eta - \epsilon_i + \tilde{\lambda}_{bik}} \quad (2.90)$$

$$Z = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i} \quad (2.91)$$

Énergie de coupure

Dans la sélection des états utilisés dans la moyenne thermodynamique, nous pouvons imposer une coupure. soit sur l'énergie ou sur le nombre d'états gardés dans la moyenne. Cette coupure peut être fixée en fonction de la convergence des états : on augmente le nombre d'itérations jusqu'à ce que le nombre d'états gardés aient convergé. Le problème à imposer une telle coupure indépendamment de la température est qu'à partir d'une certaine température, les calculs ne deviennent systématiquement plus valides lorsque $E_c - E_0 \sim T$.

Une façon dynamique de fixer une coupure dans les calculs thermodynamiques est de se baser sur la contribution des états à la fonction de partition. Nous fixerons la coupure E_c selon

$$\epsilon_c = e^{-\beta(E_c - E_0)} / D \quad (2.92)$$

La valeur de ϵ_c est fixée en fonction de la précision désirée. Cette coupure est la même

que celle proposée par Aichhorn et al. [30], à l'exception de la dimension. Nous avons voulu ici avoir une formule qui soit plus indépendante du système étudié.

2.4 Théorie des perturbations inter-amas

L'approche du champ moyen permet une première analyse simple du modèle de Hubbard. Cependant, celle que nous avons décrite à la section 2.1.1 se limite au cas à faible couplage, là où les fluctuations sont petites¹¹. Dans le cas du couplage intermédiaire ou fort, nous avons besoin d'utiliser d'autres méthodes. L'une des approches les plus simples qu'on puisse appliquer au cas fortement couplé est un simple traitement perturbatif dans le hamiltonien des termes de saut t/U . Tel que discuté au chapitre précédent, au deuxième ordre en t/U , dans le cas demi-rempli, nous obtenons le modèle de Heisenberg.

Une autre approche perturbative fut proposée par Sénéchal [33] [34]. Plutôt que d'appliquer un traitement perturbatif sur tous les termes de saut, on décompose le réseau en un super-réseau d'amas identiques, on traite de façon exacte les amas et on applique ensuite le traitement perturbatif sur les termes de sauts entre les amas. C'est la théorie des perturbations inter-amas (CPT¹²). Nous allons décrire cette méthode dans la section suivante pour ensuite présenter une généralisation variationnelle de la CPT à la section 2.5 afin d'étudier entre autres les transitions de phase : l'approximation de l'amas variationnel (VCA¹³).

2.4.1 Décomposition du réseau

La CPT s'applique à une catégorie particulière de hamiltonien : celui-ci doit être défini sur un réseau de Bravais et l'interaction doit être locale. Ainsi elle pourra être utilisée pour résoudre le modèle de Hubbard, mais ne s'applique pas par exemple à des systèmes tel que le modèle de Heisenberg ou le gaz d'électrons avec interaction de Coulomb.

La CPT requiert d'abord qu'on décompose le réseau de Bravais original γ en un super-réseau Γ d'amas identiques de L sites. Ceci est représenté à la figure 2.2 pour différentes décompositions à partir de différentes formes d'amas. Ainsi à chaque site d'indice i du réseau γ on peut faire correspondre un indice d'amas m du super-réseau Γ et un indice de

11. Elle est aussi seulement valide en dimension supérieure à 4, mais elle peut être utile pour tenter de comprendre le système bidimensionnel.

12. Cluster perturbation theory

13. Variational cluster approach

site a à l'intérieur de l'amas. Cette correspondance est unique. Pour que la CPT puisse être appliquée, le hamiltonien doit alors pouvoir s'écrire sous la forme :

$$H = H' + V \quad (2.93)$$

où

$$H' = \sum_m H'_m \quad (2.94)$$

$$V = \sum_{\substack{m,n \\ a,b}} V_{a,b}^{m,n} c_{ma}^\dagger c_{nb} \quad (2.95)$$

Le terme H'_m représente le hamiltonien de l'amas m et $V_{a,b}^{m,n}$ est le couplage entre le site a de l'amas m avec le site b de l'amas n . Ainsi, les termes à plus de un corps doivent être restreints à l'intérieur des amas (interaction locale), c'est-à-dire qu'il ne peut y avoir de termes à plus de un corps qui contiennent des indices d'amas différents.

2.4.2 Traitement perturbatif du terme inter-amas

En appliquant à la fonction de Green du réseau un traitement perturbatif, en utilisant les termes de saut inter-amas comme perturbation (V), il a été démontré que nous obtenons au plus bas ordre non-trivial la relation [34]

$$G^{-1}(\omega) = G'^{-1}(\omega) - V \quad (2.96)$$

où G' est la fonction de Green de l'amas, G la fonction de Green du réseau et V est la matrice contenant les termes de saut inter-amas. Les termes de cette dernière équation sont sous forme matricielle dans la base des indices de site i . En fonction des indices d'amas m , G' est diagonal alors que V contient principalement des termes hors-diagonaux en m .

Cette dernière relation s'obtient aussi en remplaçant la self-energie du réseau Σ par celle de l'amas Σ' . Mathématiquement, nous voulons démontrer que la fonction de Green CPT peut aussi s'écrire sous la forme :

$$G^{-1}(\omega) = G_0^{-1}(\omega) - \Sigma' \quad (2.97)$$

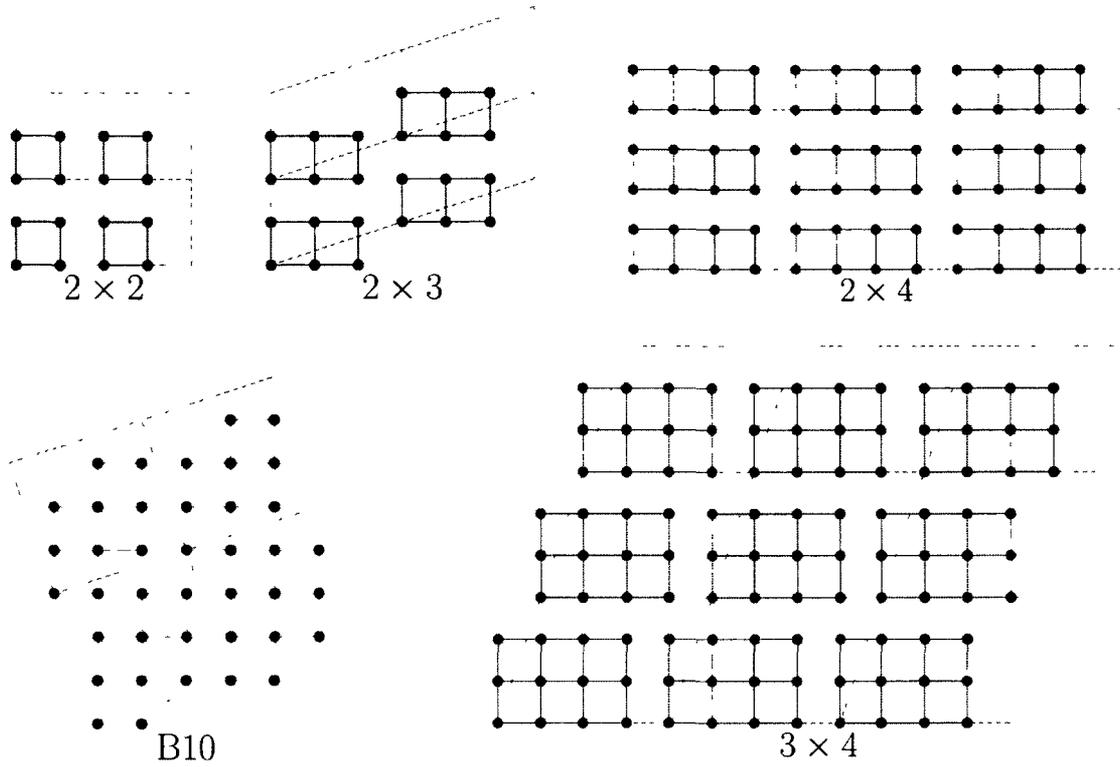


FIGURE 2.2 – Les amas utilisés pour les calculs de la CPT et VCA. La ligne pointillée orangée définit le super-réseau.

Pour démontrer ceci, partons de l'équation de Dyson :

$$G^{-1}(\omega) = G_0^{-1}(\omega) - \Sigma \quad (2.98)$$

Σ est la self-energie du réseau et G_0 est la fonction de Green sans interaction du réseau. Cette dernière fonction est donnée par

$$G_0^{-1}(\omega) = \omega - t = \omega - t' - V \quad (2.99)$$

On a ici décomposé le terme de saut t (écrit sous forme matricielle) en deux termes : les sauts dans l'amas (t') et les sauts inter-amas (V). Ceci nous permet d'écrire que

$$G^{-1}(\omega) = \omega - t' - V - \Sigma \quad (2.100)$$

Pour pouvoir trouver une approximation à la fonction de Green du réseau, nous

remplaçons la self-énergie du réseau par celle d'un seul amas. À partir de l'équation de Dyson de l'amas, $G'^{-1}(\omega) = G_0'^{-1}(\omega) - \Sigma' = \omega - \mathbf{t}'$, on peut déduire, après avoir remplacé la self-énergie de l'amas par celle du réseau dans l'équation (2.100), que

$$G^{-1}(\omega) = \omega - \mathbf{t}' - \Sigma' - \mathbf{V} = G'^{-1}(\omega) - \mathbf{V} \quad (2.101)$$

On obtient ainsi le même résultat que celui présenté plus haut à l'équation (2.96).

Numériquement, la CPT requiert de pouvoir calculer la fonction de Green de l'amas G' . Ainsi, la taille des amas considérés sera limitée par la méthode utilisée pour déterminer cette fonction de Green. À température nulle, nous pourrions utiliser la méthode de Lanczos (limite d'environ 16 sites) alors qu'à température finie, nous pourrions utiliser des approches de Lanczos à température finie (limite d'environ 12 sites).

Avant de poursuivre avec le traitement de G' , on remarque ici que cette approche traite de façon exacte les corrélations dans l'amas : la matrice G' est calculée exactement. Plus les longueurs de corrélation du système étudié sont petites, plus cette approche devient précise. De façon plus générale, la CPT permettra de voir l'effet des courtes longueurs de corrélation sur les différentes propriétés du modèle de Hubbard. Ceci sera discuté davantage en détail dans les chapitres suivantes.

La relation (2.96) est invariante sous translation des indices d'amas m puisque tous les amas sont identiques, ce qui nous permet d'y appliquer une transformée de Fourier partielle $m \rightarrow \tilde{\mathbf{k}}$, avec $\tilde{\mathbf{k}} \in \Gamma^*$, où Γ^* représente la réciproque du super-réseau :

$$G^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = G'^{-1}(\omega) - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (2.102)$$

Les matrices de cette dernière équation sont maintenant écrites dans la base des indices de site. Ce sont alors des matrices de taille $L \times L$, L correspondant au nombre de sites dans l'amas. Ainsi, les contributions en fréquence ω et en vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ proviennent respectivement des termes $G'(\omega)$ et $\mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})$. Précisons ici que le vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ est dans la zone de Brillouin réduite, définie par le super-réseau.

Utilisant plutôt la forme de l'équation (2.97), nous pouvons aussi écrire la dernière relation sous la forme

$$G^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = G_0'^{-1}(\omega, \tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma'(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (2.103)$$

2.4.3 Périodisation

La forme dans laquelle nous avons écrit la fonction de Green l'équation (2.103) ne préserve pas la symétrie de translation du réseau original γ . Elle dépend du vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ compris dans la première zone de Brillouin du super-réseau réciproque et des indices de site de l'amas. Une transformée de Fourier sur les indices de site nous donne une fonction de Green $G_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ qui ne serait plus diagonale en vecteurs d'onde. Nous allons voir dans cette section comment périodiser la fonction de Green afin de restaurer la symétrie originale du réseau.

Dans cette section, nous utiliserons les définitions de l'annexe A. Ainsi, la transformée de Fourier sur les indices de site de $G_{ab}(\mathbf{k}, \omega)$ est

$$G_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \frac{1}{L} \sum_{ab} e^{-i(\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_a - \mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}_b)} G_{ab}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \quad (2.104)$$

L'expression précédente ne dépend pas directement d'un vecteur d'onde défini dans la première zone de Brillouin du réseau réciproque. En effet, bien que $\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}$ soit défini dans la première zone de Brillouin du réseau réciproque (voir annexe A), nous avons que $G_{\mathbf{K},\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \neq G(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{K}' + \tilde{\mathbf{k}}, \omega)$. Afin d'obtenir la fonction de Green $G(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{K}' + \tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ nous devons appliquer la transformation unitaire Λ sur la fonction de Green $G_{\mathbf{K},\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$, tel que définie à l'équation (A.10). Nous avons ainsi que

$$\begin{aligned} G(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}', \omega) &= \sum_{\mathbf{K}_1 \mathbf{K}'_1} \Lambda_{\mathbf{K}\mathbf{K}_1}(\tilde{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{K}_1\mathbf{K}'_1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \Lambda_{\mathbf{K}'\mathbf{K}'_1}^*(\tilde{\mathbf{k}}) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{ab} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K})\cdot\mathbf{r}_a} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}')\cdot\mathbf{r}_b} G_{ab}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \end{aligned} \quad (2.105)$$

Nous pouvons utiliser $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$ et $\mathbf{k}' = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}'$. De plus, nous avons que $G_{ab}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = G_{ab}(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, \omega) = G_{ab}(\mathbf{k}, \omega)$, puisque la dépendance en $\tilde{\mathbf{k}}$ de $G_{ab}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ provient uniquement de $V(\tilde{\mathbf{k}})$, ce dernier étant invariant selon une translation par un vecteur du super-réseau réciproque Γ^* . Nous avons bien sûr que $\mathbf{K} \in \Gamma^*$.

Nous obtenons ainsi que

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \frac{1}{L} \sum_{ab} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_b} G_{ab}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.106)$$

En posant $\mathbf{K} = \mathbf{K}'$, ou en d'autres mots en prenant seulement les termes diagonaux de l'expression précédente, nous obtenons une forme simple de la fonction de Green :

$$G_{\text{CPT}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{L} \sum_{ab} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} G_{ab}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.107)$$

où

$$G_{a,b}(\mathbf{k}, \omega) = \left(\frac{G(\omega)}{1 - \mathbf{V}(\mathbf{k})G(\omega)} \right)_{a,b} \quad (2.108)$$

Cette forme dernière restaure la symétrie de translation du réseau initial γ .

2.4.4 Quelques caractéristiques de la CPT

Voici quelques caractéristiques de la CPT :

1. Elle est relativement simple. Elle n'exige pas d'ajustement arbitraires, autre que de fixer l'amas, contrairement à des méthodes où il faut fixer certains paramètres internes ou démarrer avec une solution de départ.
2. Elle est exacte dans les deux cas limites de $U = 0$ et $t = 0$. Dans le cas $t = 0$, ceci peut se comprendre étant donné que la méthode provient d'un développement à fort U . Pour le cas $U = 0$, étant donné que la self-énergie est nulle, nous retrouvons le résultat exact.
3. Elle permet d'avoir une continuité sur les valeurs de vecteur d'onde \mathbf{k} accessible. Cependant, les fréquences accessibles sont limitées à des pôles à des fréquences bien précises. Afin de simuler un système infini, nous allons remplacer les pôles par une fonction lorentzienne de largeur finie, tel que nous verrons plus loin.
4. Elle devient exacte lorsqu'on utilise un amas de taille infinie. Ceci nous permet d'en déduire que lorsque nous augmentons la taille de l'amas, nous devrions théoriquement nous approcher de la solution réelle.
5. Elle est stable pour toutes les valeurs de U , de terme cinétique t_{ij} et de remplissage.
6. Elle ne permet pas d'obtenir de solutions où la symétrie est brisée.

Le dernier point sera au coeur de la méthode proposée à la section suivante.

2.5 Approximation d'amas variationnel

La CPT est utile pour étudier différentes propriétés à un corps du modèle de Hubbard. Cependant, tel qu'expliqué à la section suivante, elle souffre d'une importante lacune : elle ne permet pas les solutions à symétrie brisée. Ainsi, les phases telles que l'antiferromagnétisme et la supraconductivité ne peuvent être étudiées à partir de la CPT. L'approche du champ moyen décrite à la section 2.1.1 permet d'étudier ces symétries brisées, mais l'absence des fluctuations dans la méthode rend les résultats peu crédibles, surtout à fort couplage. Nous décrirons dans cette section une approche par amas permettant de préserver les corrélations à courtes portées tout en permettant les brisures de symétrie. Cette approche est l'*approximation d'amas variationnel* (VCA¹⁴).

L'idée derrière la VCA est relativement simple. Dans la CPT, nous calculons d'abord la fonction de Green de l'amas (et ainsi la self-energie) et à partir de celle-ci, nous pouvons calculer la fonction de Green du réseau. Cependant, rien nous indique à priori que l'on doit utiliser les mêmes paramètres à un corps t sur l'amas et le réseau pour obtenir une solution optimale¹⁵. La VCA permet de déterminer de façon variationnelle la configuration de l'amas (plus précisément, les termes à un corps t) qui donne une fonction de Green du réseau plus proche de la solution exacte.

2.5.1 Détails de la VCA

La VCA a été proposée par Potthoff en 2003 [35]. Elle est un cas particulier d'une approche plus générale proposée par le même auteur : *l'approche par la fonctionnelle de la self-energie* (SFA¹⁶). Pour comprendre celle-ci, commençons d'abord par définir la fonctionnelle $\Omega_t[G]$:

$$\Omega_t[G] = \Phi[G] - \text{Tr}((G_0^{-1} - G^{-1})G) + \text{Tr} \ln(-G) \quad (2.109)$$

Dans cette dernière expression, la trace (Tr) représente à la fois la somme sur les indices de site, le spin, les bandes ainsi que sur les fréquences si on travaille dans le formalisme de Matsubara. La fonctionnelle $\Phi[G]$ est la *fonctionnelle de Luttinger Ward*. Ainsi, pour une fonction de Green donnée en fonction des indices de site et de la fré-

14. Variational Cluster Approximation

15. Optimale au sens où elle s'approche le plus de celle qu'on obtiendrait si on pouvait solutionner le système de façon exacte

16. Self-energy functional approach

quence, nous pouvons calculer la fonctionnelle $\Omega_t[\mathbf{G}]$. Ce qui rend utile cette fonctionnelle est sa propriété d'être stationnaire à la solution physique du système. À cette solution, la fonctionnelle nous donne le grand potentiel du système.

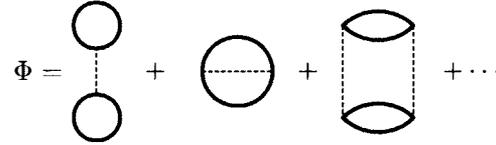


FIGURE 2.3 – Représentation diagrammatique de la fonctionnelle de Luttinger-Ward.

La fonctionnelle de Luttinger-Ward $\Phi[\mathbf{G}]$ est représentée diagrammatiquement par les graphes irréductibles à 2 particules présentés à la figure 2.3. Deux de ses propriétés seront utiles pour justifier la VCA. D'abord, sa dérivée fonctionnelle par rapport à \mathbf{G} donne la self-energie Σ :

$$\frac{\delta\Phi[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} = \Sigma \quad (2.110)$$

Ensuite, $\Phi[\mathbf{G}]$ est universelle : elle dépend seulement du terme d'interaction U et bien sûr de \mathbf{G} . Ainsi, elle ne dépend pas explicitement de \mathbf{t} . En d'autres mots, deux systèmes différents qui partagent le même terme d'interaction U , mais avec des termes à un corps \mathbf{t} différents, ont des fonctionnelles $\Phi[\mathbf{G}]$ identiques, c'est-à-dire qu'ils ont la même dépendance en \mathbf{G} . Ainsi, la dépendance en \mathbf{t} de $\Omega_t[\mathbf{G}]$ provient uniquement de la fonction de Green sans interaction $\mathbf{G}_0^{-1} = \omega - \mathbf{t}$.

Tel que mentionné plus haut, la fonctionnelle $\Phi[\mathbf{G}]$ est stationnaire à la solution physique de \mathbf{G} . Pour démontrer ceci, calculons la dérivée fonctionnelle de $\Omega_t[\mathbf{G}]$:

$$\frac{\delta\Omega_t[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} = \Sigma - \mathbf{G}_0^{-1} + \mathbf{G}^{-1} \quad (2.111)$$

Or lorsque la dernière équation est nulle, nous retrouvons l'équation de Dyson qui relie la fonction de Green à la self-energie : $\Sigma = \mathbf{G}_0^{-1} + \mathbf{G}^{-1}$. La dérivée nulle de la fonctionnelle de Potthoff nous permet alors de trouver une solution physique du système puisque dans ce cas, l'équation de Dyson est respectée :

$$\left. \frac{\delta\Omega_t[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} \right|_{\text{sol. phys.}} = 0 \quad (2.112)$$

À la solution physique, $\Omega_t[\mathbf{G}]$ correspond au grand potentiel du système.

Nous avons donc une approche variationnelle, ce qui nous permet en théorie d'obtenir des solutions où la symétrie du réseau est brisée. Cependant, puisque nous ne pouvons en général calculer exactement la fonctionnelle de Luttinger Ward $\Phi[\mathbf{G}]$ pour toutes valeurs de \mathbf{G} , nous avons besoin d'utiliser des stratégies d'approximation pour déterminer la solution du système. Potthoff a identifié trois catégories d'approximation [36] :

Type I Dans ce type d'approximation, nous dérivons l'équation d'Euler $\frac{\delta\Omega_t[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} = 0$ et nous la simplifions par la suite à l'aide d'arguments physiques. Ce type d'approximation est considéré, selon Potthoff, comme la plus simple mais la plus inefficace des méthodes d'approximation.

Type II Nous pouvons aussi évaluer approximativement $\Phi[\mathbf{G}]$ en sommant sur un ensemble limité de graphes. C'est le même type d'approche que ce qui est utilisée en Hartree-Fock ou en FLEX (*Fluctuation exchange approximation*) [37].

Type III Un autre type d'approche consiste à garder la forme exacte de $\Phi[\mathbf{G}]$ tout en restreignant le domaine variationnel de la fonction de Green. Ainsi, plutôt que de trouver le point stationnaire de $\Omega_t[\mathbf{G}]$ dans tout l'espace des possibilités de \mathbf{G} , ce qui est numériquement irréalisable, on choisit un sous-espace restreint des possibilités qui sera accessible numériquement tout en étant pertinent à ce qui est calculé.

C'est dans cette dernière optique, selon les approximations de type III, que Potthoff a développé la SFA. Cependant, plutôt que de développer son approche à partir d'un formalisme basé sur la fonction de Green, il a plutôt utilisé la self-énergie. Ceci est possible si on peut inverser localement l'équation (2.110). Nous pouvons ainsi réécrire la fonctionnelle $\Omega_t[\mathbf{G}]$ en fonction de Σ , considérant que $\mathbf{G} = \mathbf{G}[\Sigma]$, ce qui donne

$$\Omega_t[\Sigma] = F[\Sigma] - \text{Tr} \ln(-\mathbf{G}_{0t}^{-1} + \Sigma) \quad (2.113)$$

La fonctionnelle $F[\Sigma]$ est ici la transformée de Legendre de la fonctionnelle de Luttinger Ward :

$$F[\Sigma] = \Phi[\mathbf{G}[\Sigma]] - \text{Tr}(\Sigma\mathbf{G}[\Sigma]) \quad (2.114)$$

On montre facilement que :

$$\frac{\delta F[\Sigma]}{\delta \Sigma} = \frac{\delta \Phi[\mathbf{G}]}{\delta \mathbf{G}} \frac{\delta \mathbf{G}[\Sigma]}{\delta \Sigma} - \Sigma \frac{\delta \mathbf{G}[\Sigma]}{\delta \Sigma} - \mathbf{G} = -\mathbf{G} \quad (2.115)$$

Tout comme $\Phi[\mathbf{G}]$, la fonctionnelle $F[\Sigma]$ est universelle. On vérifie ainsi que $\Omega_t[\Sigma]$ est

stationnaire lorsque l'équation de Dyson est respectée :

$$\frac{\delta\Omega_t[\Sigma]}{\delta\Sigma} = -G + (G_{0t}^{-1} - \Sigma)^{-1} \quad (2.116)$$

L'équation (2.113) ne nous donne pas d'information supplémentaire. Cependant elle servira de point de départ à l'approximation utilisée afin de définir la VCA. C'est ce que nous voyons à la section suivante.

2.5.2 Restriction de l'espace variationnel

Considérons maintenant deux systèmes décrits par les hamiltoniens H et H' qui diffèrent seulement par leurs termes à un corps (t et t' respectivement). Ces deux systèmes partagent la même fonctionnelle $F[G]$, ce qui permet de réécrire $\Omega_t[\Sigma]$ sous la forme

$$\Omega_t[\Sigma] = \Omega' + \text{Tr}(-G_{0t'}^{-1} + \Sigma) - \text{Tr}(-G_{0t}^{-1} + \Sigma) \quad (2.117)$$

où nous avons défini $\Omega' = \Omega_{t'}[\Sigma]$.

Jusqu'à présent, nous n'avons fait aucune approximation mais nous ne pouvons toujours pas solutionner le système. L'approximation proposée par Potthoff pour résoudre l'équation précédente consiste entre autres à utiliser un amas (ou plutôt un super-réseau d'amas identiques et déconnectés) comme système de référence (H') et à restreindre le domaine des possibilités de Σ aux solutions possibles du système de référence. Ceci est possible en utilisant un amas de petite taille qui se résout exactement. On peut dans ce cas calculer Ω' dans ce sous-espace restreint, qui sera simplement le grand potentiel de l'amas. Puisque les self-energies possibles solutionnent toujours l'amas, l'équation de Dyson pour l'amas sera respectée en tout temps dans le sous-espace choisi : $G_{0t'}^{-1} - \Sigma = G'$. Ceci nous permet d'écrire

$$\Omega_t[\Sigma] = \Omega' + \text{Tr} \ln(-G') + \text{Tr} \ln(G_{0t}^{-1} - \Sigma) \quad (2.118)$$

Le terme entre parenthèses $G_{0t}^{-1} - \Sigma$ est la fonction de Green de la CPT, tel que présenté à l'équation (2.97). En utilisant la relation (2.96), nous pouvons simplifier cette

dernière équation pour obtenir

$$\begin{aligned}\Omega_t[\Sigma] &= \Omega' - \text{Tr} \ln(1 - \mathbf{V}\mathbf{G}') \\ &= \Omega' - T \sum_{\omega} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \ln \det \left[1 - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})\mathbf{G}'(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \right]\end{aligned}\quad (2.119)$$

Les indices impliqués dans le déterminant sont associés au spin, aux indices d'amas et à la bande. Dans ce cas $\mathbf{V} = \mathbf{t} - \mathbf{t}'$, ce qui ne correspond pas seulement aux termes de saut inter-amas puisque qu'à l'intérieur de l'amas, les paramètres utilisés peuvent différer de ceux de l'amas.

Nous pouvons numériquement évaluer l'équation (2.119) si nous pouvons évaluer la fonction de Green pour un amas, en utilisant par exemple la méthode présentée à la section 2.3.5. Pour explorer le sous-espace variationnel du système de référence H' , nous allons varier les termes à 1 corps de l'amas \mathbf{t}' . Nous pourrions alors obtenir $\Sigma[\mathbf{t}']$ et $\Omega_t[\Sigma]$ pour chacun de ces termes \mathbf{t}' et évaluer la solution où la dérivée $\delta\Omega_t[\Sigma]/\delta\Sigma$ est stationnaire. Pour simplifier les calculs, nous allons en fait plutôt évaluer la dérivée

$$\frac{\delta\Omega_t[\Sigma[\mathbf{t}']]}{\delta\mathbf{t}'} = 0 \quad (2.120)$$

Celle-ci sera plus simple à calculer, particulièrement lorsque nous ne laissons varier qu'un nombre limité de paramètres.

2.5.3 Lien entre la CPT et la VCA

La VCA et la CPT construisent de la même façon la fonction de Green du réseau en utilisant la fonction de Green de l'amas et la relation $\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{G}'^{-1} - \mathbf{V}$. La différence entre les deux méthodes réside dans le choix des paramètres de l'amas. Avec la CPT, on choisit habituellement les termes à un corps de l'amas de façon à les faire correspondre à ceux du réseau (termes de saut inter-amas en moins) alors qu'avec la VCA certains de ces termes à un corps sont déterminés de façon variationnelle. De cette façon, on peut dire que la CPT est un cas particulier de la VCA lorsqu'il n'y a aucun paramètre variationnel.

En fait, dans la CPT, rien ne nous dicte que le choix optimal des paramètres de l'amas est lorsqu'ils sont les mêmes que ceux du réseau. Cependant c'est ce qui est dicté par la théorie des perturbations. C'est cet aspect que la VCA apporte : une procédure rigoureuse afin de fixer les paramètres de l'amas et ainsi se rapprocher de la solution

optimale.

La VCA permet aussi d'introduire des paramètres qui brisent la symétrie. C'est ce que nous voyons en détail à la section suivante.

2.5.4 Champ de Weiss

Le choix du sous-espace exploré dépend de ce que l'on veut étudier. Lorsqu'on s'intéresse à des phases à symétrie brisée, nous allons ajouter un champ de Weiss à l'amas. Par exemple, pour l'étude de l'antiferromagnétisme sur un réseau carré (ou un hypercube de dimension quelconque), nous allons ajouter au hamiltonien un champ de Néel :

$$H'_M = M \sum_a e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_a} (n_{a\uparrow} - n_{a\downarrow}) \quad (2.121)$$

où $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots, \pi)$ est le vecteur d'onde antiferromagnétique et M le paramètre de Weiss antiferromagnétique. Ce terme produit un champ favorisant les spins à s'aligner selon une configuration antiferromagnétique. En incluant seulement ce champ pour notre étude variationnelle, nous aurions à résoudre

$$\frac{d\Omega(M)}{dM} = 0 \quad (2.122)$$

Nous avons écrit ici $\Omega_t[\Sigma]$ en fonction du seul élément étant varié, c'est-à-dire M .

Dans le cas où nous voulons étudier la phase supraconductrice, nous ajouterons plutôt au hamiltonien ce terme :

$$H'_{SC} = \sum_{a,b} \Delta_{ab} (c_{a\uparrow} c_{b\downarrow} + c_{b\downarrow}^\dagger c_{a\uparrow}^\dagger) \quad (2.123)$$

Dans cette dernière équation, Δ_{ab} est déterminé par le type de supraconductivité qu'on veut étudier. Dans le cas d'un appariement de type s , nous aurons que $\Delta_{ab} = \Delta \delta_{ab}$. Si nous avons plutôt affaire à un appariement de type d , nous aurons plutôt

$$\Delta_{ab} = \begin{cases} +D & \text{si } \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b = \pm \hat{x} \\ -D & \text{si } \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b = \pm \hat{y} \end{cases} \quad (2.124)$$

Nous avons bien sûr considéré ici que la distance entre les sites est de 1. Ainsi, nous utiliserons dans ce cas-ci D comme paramètre variationnelle afin de trouver la solution

stationnaire de la fonctionnelle de Potthoff.

D'autres termes à un corps peuvent être ajoutés à l'amas afin d'augmenter l'espace variationnel. Par exemple, on peut utiliser le terme de saut t comme paramètre variationnel. Cependant, pour des considérations numériques, nous allons limiter le nombre de paramètres variationnels. En effet, nous allons devoir chercher numériquement la solution stationnaire et plus la dimension du sous-espace dans lequel nous cherchons cette solution est grande, plus les ressources numériques nécessaires seront grandes. En général, les calculs seront réalisés avec seulement un, deux ou trois paramètres variationnels.

Notons ici que le champ de Weiss n'est pas ajouté directement au hamiltonien défini sur le réseau. On l'ajoute dans la fonction de Green du réseau pour ensuite le retrancher à travers V . La contribution finale du champ de Weiss est nulle, mais il en résulte tout de même un paramètre d'ordre non-nul dans le réseau. Nous verrons comment le calculer à la section 2.5.6.

2.5.5 Potentiel chimique et cohérence thermodynamique

Le potentiel chimique de l'amas peut aussi servir de paramètre variationnel. On pourra ainsi ajouter un terme variationnel à l'amas qui sera sous la forme :

$$H'_\mu = \mu' \sum_a n_a \quad (2.125)$$

Cet élément sera important si on veut assurer la cohérence thermodynamique dans le calcul de la densité d'électrons sur l'amas. En effet, la densité électronique peut se calculer de deux façons. D'abord, on peut la déterminer par la trace fonctionnelle de la fonction de Green du réseau G :

$$n = \text{Tr } G \quad (2.126)$$

On peut aussi la calculer à partir du grand potentiel thermodynamique Ω , donné dans notre cas par la solution de la VCA :

$$n = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \quad (2.127)$$

Si ces deux façons de calculer donnent le même résultat, nous avons *cohérence thermodynamique* dans le calcul de la densité électronique. En incluant le potentiel chimique de l'amas comme paramètre variationnel, on s'assure de la cohérence thermodynamique,

tel que démontré par Aichhorn et al [38].

Lorsque nous n'utiliserons pas le potentiel chimique comme paramètre variationnel, nous allons utiliser la fonction de Green du réseau pour calculer la densité d'électrons. Cette méthode est beaucoup plus simple puisqu'elle nécessite seulement d'obtenir une fonction de Green, contrairement à l'autre méthode où nous avons besoin de faire une dérivée numérique de Ω par rapport à μ .

2.5.6 Calcul des paramètres d'ordre et des quantités à un corps

Le champ de Weiss permet au système d'adopter une configuration où il y a brisure de symétrie. Cependant, il n'y a pas de relation directe entre le champ de Weiss et le paramètre d'ordre dans la VCA. Il faut donc calculer le paramètre d'ordre séparément. Le paramètre d'ordre associé à l'opérateur $\mathcal{O} = \sum_{\alpha\beta} \mathcal{O}_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$ est ainsi

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{\alpha\beta} \mathcal{O}_{\alpha\beta} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle \quad (2.128)$$

Les indices α et β sont généraux : ils peuvent référer à des indices de site ou de vecteur d'onde. Considérant la fonction de Green de Matsubara $G_{\alpha\beta}(i\omega_n)$, nous avons que

$$\langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle = \lim_{\eta \rightarrow 0^-} T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n \eta} G_{\beta\alpha}(i\omega_n) \quad (2.129)$$

où $\omega_n = \pi(2n+1)T$ sont les fréquences de Matsubara pour les fermions. Pour simplifier la notation, nous allons remplacer $\lim_{\eta \rightarrow 0^-} e^{-i\omega_n \eta}$ par $e^{-i\omega_n 0^-}$. Ainsi, nous obtenons à partir des deux dernières équations que

$$\langle \mathcal{O} \rangle = T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \text{tr} [\mathcal{O} G(i\omega_n)] \quad (2.130)$$

Dans cette dernière équation, nous avons utilisé tr pour désigner la trace sur les indices de site, de spin et de bande, en excluant la somme sur les fréquences de Matsubara (contrairement à la trace utilisée dans les équations précédentes).

Nous pouvons calculer toutes les quantités à un corps sur le réseau à partir de cette dernière équation.

2.6 Considérations numériques

2.6.1 Convergence des sommes

Une somme exprimée sous la forme de l'équation (2.130) ne peut être réalisée numériquement à cause de la limite sur η . Cette limite permet à la somme de converger : nous ne pouvons pas simplement poser $e^{-i\omega_n 0^-} = 1$. Cependant, il est possible de modifier les sommations afin d'obtenir une forme qui puisse se calculer sans limite formelle.

Ce qui rend nécessaire la présence du terme de convergence dans la somme, c'est la partie en $1/i\omega_n$ de la fonction de Green (voir développement asymptotique à l'équation (2.24)), qui est le comportement à haute fréquence de celle-ci. Les moments d'ordre supérieur, en $1/(i\omega_n)^m$, où $m > 1$, convergent sans nécessiter la présence du terme de convergence. En séparant la partie qui converge sans facteur de convergence du reste, nous avons

$$\langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle = T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(G_{\beta\alpha}(i\omega_n) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{i\omega_n} \right) + \delta_{\alpha\beta} T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^-}}{i\omega_n} \quad (2.131)$$

En utilisant le théorème de Cauchy, nous pouvons calculer facilement la deuxième somme sur les fréquences de Matsubara. La fonction $-1/[T(1 + e^{z/T})]$ ayant ses pôles aux fréquences de Matsubara $i\omega_n$, avec un résidu de 1, on peut remplacer la somme par une intégrale sur une boucle fermée \mathcal{C} dans le plan complexe. Cette boucle doit être parcourue dans le sens horaire et comprendre toutes les fréquences de Matsubara tout en excluant tout autre pôle. Ainsi

$$T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^-}}{i\omega_n} = -\frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{1 + e^{z/T}} \frac{e^{z 0^+}}{z} dz \quad (2.132)$$

La fonction intégrée a un autre pôle à $z = 0$. Il est possible de déformer le contour \mathcal{C} pour qu'il contienne seulement le pôle à $z = 0$ pour ainsi obtenir¹⁷ :

$$T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^-}}{i\omega_n} = \frac{1}{1 + e^{0/T}} = \frac{1}{2} \quad (2.133)$$

En posant

$$\tilde{G}_{\beta\alpha}(i\omega_n) = G_{\beta\alpha}(i\omega_n) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{i\omega_n} \quad (2.134)$$

17. Le contour doit être parcouru en sens anti-horaire, ce qui amène un signe négatif supplémentaire

on obtient

$$\langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle = T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \tilde{G}_{\beta\alpha}(i\omega_n) + \frac{\delta_{\alpha\beta}}{2} \quad (2.135)$$

Ainsi, la moyenne de l'opérateur \mathcal{O} peut s'écrire sous la forme

$$\langle \mathcal{O} \rangle = T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \text{tr} \left[\mathcal{O} \tilde{G}(i\omega_n) \right] + \frac{1}{2} \text{tr} \mathcal{O} \quad (2.136)$$

Pour chaque fréquence $i\omega_n$ dans la somme, nous avons aussi dans cette somme son conjugué $-i\omega_n$. Ainsi, sachant que $G(\mathbf{k}, -i\omega_n) = G^*(\mathbf{k}, i\omega_n)$ et combinant les termes $i\omega_n$ dans la somme aux termes $-i\omega_n$, nous pouvons écrire

$$\langle \mathcal{O} \rangle = 2T \sum_{\alpha\beta} \mathcal{O}_{\alpha\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \text{Re}\{G_{\beta\alpha}(i\omega_n)\} + \frac{1}{2} \text{tr} \mathcal{O} \quad (2.137)$$

Dans la dernière équation, nous aurions aussi pu utiliser $\tilde{G}_{\beta\alpha}(i\omega_n)$ à la place de $G_{\beta\alpha}(i\omega_n)$. En effet, la partie réelle de ces deux fonctions est identique.

2.6.2 Calcul de l'énergie

La densité d'énergie (énergie par site) peut se calculer à partir de la fonction de Green. Dans le cas bidimensionnel, la densité d'énergie est donnée par [39] :

$$E = I_1 + I_2 + \mu \frac{N}{2} \quad (2.138)$$

où

$$I_1 = \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_n 0^+} \varepsilon(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (2.139)$$

$$I_2 = \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_n 0^+} i\omega_n G(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (2.140)$$

$$N = 2 \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n 0^+} G(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (2.141)$$

Ici N est le remplissage du réseau. Nous pouvons aussi calculer séparément l'énergie cinétique E_{cin} (associée à t) et l'énergie potentielle E_{pot} (associée à U) du système en

utilisant :

$$E_{cin} = 2I_1 \quad (2.142)$$

$$E_{pot} = -I_1 + I_2 + \mu \frac{N}{2} \quad (2.143)$$

Les sommes servant au calcul de I_1 , I_2 et N contiennent un terme de convergence, tout comme les sommes calculées à la section précédente. Les sommes pour déterminer I_1 et N se calculent avec la même approche qu'à la section précédente. Nous avons ainsi, après avoir séparé la partie qui nécessite le terme de convergence du reste, que

$$I_1 = \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \varepsilon(\mathbf{k}) \left[G(\mathbf{k}, i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n} \right] + \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{2} \quad (2.144)$$

Or, le deuxième terme de l'équation précédente est nul puisque le terme de saut a seulement des éléments non-nuls qui sont hors diagonaux (nous avons séparé la contribution du potentiel chimique). En effet, en posant $t_{ii} = 0$ et en utilisant la relation (1.2), nous obtenons que l'intégrale sur la relation de dispersion est nulle. Ainsi, nous obtenons simplement

$$I_1 = \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \varepsilon(\mathbf{k}) \tilde{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (2.145)$$

En répétant les mêmes étapes pour le calcul de N , nous obtenons

$$N = 1 + \frac{2T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (2.146)$$

Pour le calcul de I_2 , la présence du terme $i\omega_n$ fait en sorte qu'en plus du moment d'ordre 1, nous avons aussi besoin de considérer celui d'ordre 2. soit $M_2(\mathbf{k})$. Ainsi nous avons que

$$\begin{aligned} I_2 = & \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i\omega_n \left[G(\mathbf{k}, i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n} - \frac{M_2(\mathbf{k})}{(i\omega_n)^2} \right] \\ & + \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_n 0^+} \left[1 + \frac{M_2(\mathbf{k})}{i\omega_n} \right] \end{aligned} \quad (2.147)$$

Le terme de convergence fait disparaître les termes constants :

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_n 0^+} = 0 \quad (2.148)$$

De plus, en utilisant une fois de plus l'équation (2.133) et le fait que l'intégrale sur \mathbf{k} de $\varepsilon(\mathbf{k})$ est nul, nous obtenons que

$$\frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_n 0^+} \frac{M_2(\mathbf{k})}{i\omega_n} = -\frac{\mu}{2} + \frac{UN}{4} \quad (2.149)$$

Nous avons bien sûr utilisé dans cette dernière équation l'expression de $M_2(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + \frac{1}{2}UN$, que l'on retrouve à l'équation (2.26). Nous obtenons finalement que

$$I_2 = -\frac{\mu}{2} + \frac{UN}{4} + \frac{T}{(2\pi)^2} \int d^2k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i\omega_n \left[G(\mathbf{k}, i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n} - \frac{M_2(\mathbf{k})}{(i\omega_n)^2} \right] \quad (2.150)$$

En procédant de la même façon que pour le calcul de la moyenne thermodynamique des observables, en combinant les termes $i\omega_n$ avec les termes en $-i\omega_n$, nous obtenons

$$I_1 = 2T \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \varepsilon(\mathbf{k}) \operatorname{Re}[G(\mathbf{k}, i\omega_n)] \quad (2.151)$$

$$I_2 = -\frac{\mu}{2} + \frac{UN}{4} + 2T \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (-\omega_n \operatorname{Im}[G(\mathbf{k}, i\omega_n)] - 1) \quad (2.152)$$

$$N = 1 + 4T \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \operatorname{Re}[G(\mathbf{k}, i\omega_n)] \quad (2.153)$$

2.6.3 Sommation infinie

Les sommes des équations (2.151), (2.152) et (2.153) ne convergent pas nécessairement rapidement. Ceci peut faire en sorte que l'on doive sommer beaucoup de termes pour obtenir une certaine précision. Pour éviter de devoir faire beaucoup d'évaluations de la fonction de Green, nous n'allons réaliser les sommes que sur les quelques premiers termes et utiliser la formule de sommation d'Euler-Maclaurin pour faire une approximation de la sommation restante. Cette formule permet de remplacer une somme par une intégrale afin d'approcher la valeur de la somme. Soit une fonction quelconque $f(x)$ que l'on somme

sur $M + 1$ termes espacés de h , en commençant par x_0 . Nous avons que

$$\sum_{n=0}^M f(x_0 + nh) \approx \frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_0+Mh} f(y) dy + \frac{1}{2} [f(x_0 + Mh) + f(x_0)] \quad (2.154)$$

En fait, dans cette équation, nous n'avons gardé que le premier terme de correction de la formule d'Euler-Maclaurin, qui nous suffira pour notre étude.

Dans le cas qui nous intéresse nous obtiendrions une intégrale infinie, ce qui amène les mêmes difficultés que la somme infinie. Cependant, nous pouvons changer la variable d'intégration en utilisant $u = 1/y$

$$\int_{x_0}^{\infty} f(y) dy = \int_0^{1/x_0} \frac{f(1/u)}{u^2} du \quad (2.155)$$

avec $u_0 = 1/x_0$. Cette intégrale peut facilement être réalisée de façon numérique à l'aide d'une méthode telle que celle de Romberg [40].

Numériquement, nous devons éviter d'évaluer l'intégrale de l'équation (2.155) à $u = 0$ (ou à $y \leftarrow \infty$). En effet, les erreurs numériques peuvent faire en sorte de faire diverger les intégrales tout près de $u = 0$.

Typiquement, nous pouvons sommer sur quelques dizaines de termes et ensuite utiliser la formulation d'Euler-Maclaurin pour faire l'approximation du reste de la somme

2.7 Aperçu des prochains chapitres

Dans ce chapitre, nous nous sommes attardés à décrire différentes méthodes de calcul nous permettant d'étudier le modèle de Hubbard à température finie. Dans le reste de ce document, nous allons mettre à l'épreuve ces méthodes dans différents contextes. Nous allons débiter, au chapitre 3, par étudier l'antiferromagnétisme du modèle de Hubbard sur un réseau carré à température finie à l'aide de la VCA en utilisant un amas que l'on peut diagonaliser exactement (4 et 6 sites). Ceci nous permettra de vérifier comment la VCA se comporte lorsque la température est variée, tout en s'assurant que la fonction de Green de l'amas est calculée exactement (dans les limites numériques). Nous répéterons ensuite le même genre de calcul au chapitre 4 mais cette fois-ci pour la supraconductivité de type d . Nous en profiterons du même coup pour comparer le diagramme de phase obtenu à partir de notre approche avec celui des supraconducteurs à haute température

critique. Enfin, au chapitre 5, nous allons appliquer la CPT à des matrices plus grandes (8, 10 et 12 sites). Ceci nous permettra de mettre à l'épreuve la RVLM et la LVM, et de vérifier ainsi s'il est possible de les appliquer aussi à la VCA pour obtenir des résultats crédibles.

Chapitre 3

Antiferromagnétisme

Ce chapitre sera consacré à une application de la VCA à température finie. Nous verrons entre autres comment la température affecte la fonctionnelle de Potthoff et nous présenterons des résultats sur la température critique en fonction de différents paramètres tel que le potentiel U et le remplissage. Nous verrons ainsi que l'étude en température de la VCA donne des résultats intéressants lorsqu'appliquée à l'étude du modèle de Hubbard même si les tailles d'amas utilisées sont petites (2×2 et 2×3).

3.1 Cas simple : étude du réseau avec $t = 1$

Nous débutons notre étude de l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard avec un cas simple, c'est-à-dire en se limitant au demi-remplissage avec un terme de saut t_{ij} limité aux premiers voisins. Ce terme de saut sera fixé à $t = 1$. Nous pourrions comparer nos résultats entre autres à l'approximation en champ moyen (ACM) pour les ondes de densité de spin.

Pour ce chapitre, ainsi que les chapitres suivants, les quantités présentées telles que la température, les champs de Weiss et les paramètres d'ordre sont données en fonction de t , que nous fixerons toujours à 1. Ceci simplifiera les unités de mesure.

3.1.1 Paramètre d'ordre et changement de phase

Pour déterminer la valeur du paramètre d'ordre antiferromagnétique, nous devons trouver la solution stationnaire de la fonctionnelle de Potthoff $\Omega(M')$. Cette fonctionnelle aura pour l'instant seulement le champ de Weiss M' comme paramètre variationnel. Pour

illustrer comment on solutionne le système avec la VCA, nous retrouvons à la figure 3.1 la fonctionnelle de Potthoff pour différentes températures. Un amas 2×2 fut utilisé pour ce calcul en fixant $U = 8$ et à demi-remplissage. Nous y indiquons par des flèches la solution de $\partial\Omega(M')/\partial M' = 0$, ce qui correspond à la solution recherchée. Lorsque la température augmente, la solution trouvée du champ de Weiss M^* pour laquelle la fonctionnelle de Potthoff est stationnaire diminue jusqu'à atteindre une valeur de 0, ce qui indique qu'il y a eu changement de phase entre $T = 0.33$ et $T = 0.35$.

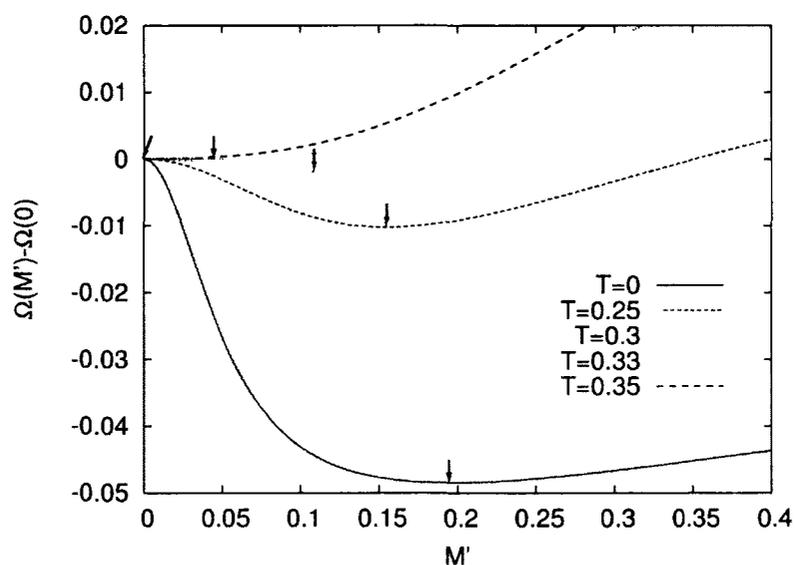


FIGURE 3.1 – Fonctionnelle de Potthoff (décalée selon sa valeur à $M'=0$) en fonction du champ de Weiss M' pour différentes températures à $U = 8$ pour un amas 2×2 à demi-rempli.

Tel qu'expliqué dans la section 2.5.4, le champ de Weiss déterminé ici ne correspond pas à une quantité physique, contrairement à d'autres approches comme l'approximation en champ moyen (ACM) où le champ de Weiss est proportionnel au paramètre d'ordre. Ici le champ de Weiss est une quantité interne à la méthode utilisée. La quantité physique qui nous intéresse est plutôt le paramètre d'ordre, qui est calculé après avoir trouvé la solution stationnaire de la fonctionnelle de Potthoff (voir section 2.5.6).

Pour étudier plus en détail le changement de phase, nous traçons cette fois-ci à la figure 3.2 le paramètre d'ordre antiferromagnétique M en fonction de la température avec les mêmes paramètres que pour la figure précédente. Nous y observons d'abord qu'il

s'agit d'une transition du deuxième ordre avec une température de Néel évaluée à environ $T_c = 0.3354$ pour l'amas 2×2 et $T_c = 0.3104$ pour l'amas 2×3 .

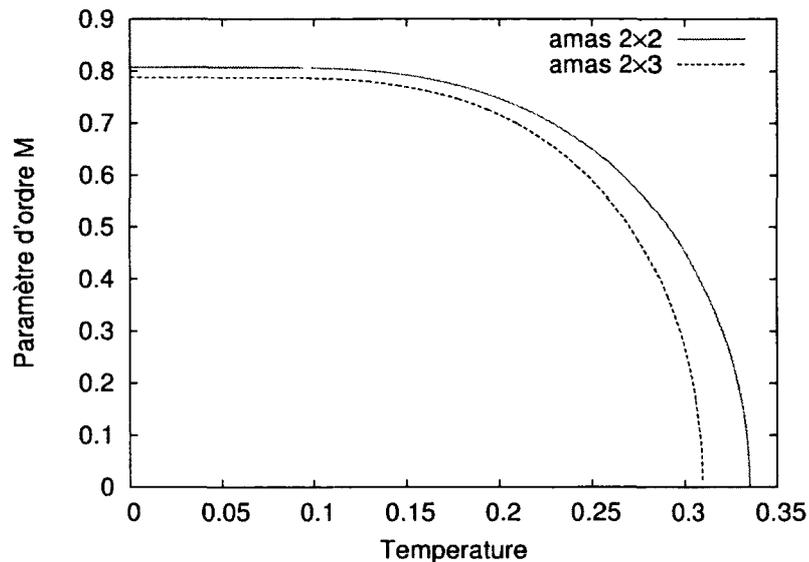


FIGURE 3.2 – Paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction de la température à $U = 8$

Il est intéressant de constater sur ce graphique que la température de Néel varie beaucoup plus rapidement en fonction de la taille d'amas (variation de 7.5%) que le paramètre d'ordre à $T = 0$ (variation de 2.3%). Bien qu'on ne puisse pas parler d'une tendance ici étant donné que nous n'avons que deux différentes tailles d'amas, ce résultat n'est pas surprenant. En effet, lorsque la taille du système devient infinie on s'attend à observer une valeur non-nulle du paramètre d'ordre à $T = 0$, alors que la température critique devrait être nulle puisque notre système est en deux dimensions.

Une estimation récente du paramètre d'ordre à $T = 0$ et $U = 8$ donne une valeur de $M = 0.77$ [41]. Ce résultat est obtenu à l'aide d'une fonction d'onde variationnelle adaptée aux valeurs intermédiaires de U . Une autre estimation du paramètre d'ordre est donnée par une méthode en Monte-Carlo quantique, soit $M = 0.42$ à $U = 8$ et $T = 0$ [42]. Nos résultats sont du même ordre que ces deux approches, bien qu'on ne puisse extrapoler à partir de seulement deux petits amas quelle devrait être la valeur réelle du paramètre d'ordre dans le réseau infini. Nos résultats sont plus élevés que ceux du Monte-Carlo quantique. Ceci n'est pas surprenant, étant donné que les fluctuations quantiques de

grande longueur d'onde ont tendance à faire diminuer la valeur du paramètre d'ordre et ces fluctuations sont ignorées dans notre approche avec de petits amas.

Une analyse du paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction de la taille de l'amas utilisé permet de tenter d'extrapoler la valeur de ce paramètre d'ordre pour le réseau infini. Peyman *et al.* ont obtenu un paramètre d'ordre antiferromagnétique à température nulle d'environ $M = 0.8$ [43]. Ceci est définitivement plus élevé que la valeur obtenue par Monte-Carlo quantique. Deux éléments peuvent expliquer cette différence. D'abord, le modèle d'extrapolation peut être erroné. Le paramètre d'ordre a été tracé en fonction du facteur de qualité $Q = 1 - 1/L$ (L étant le nombre de site) et l'extrapolation considérait que le paramètre d'ordre avait un comportement linéaire en fonction de Q , ce qui n'est pas nécessairement le cas pour des très grandes valeurs de L . Ensuite, utiliser qu'un seul paramètre variationnel n'est peut-être pas suffisant pour bien représenter ce qui se passe dans le réseau infini, ce qui peut expliquer la différence des résultats avec le Monte-Carlo quantique.

Une borne supérieure pour la valeur de M à $T = 0$ est donnée par le modèle de Heisenberg, qui est la limite où $U \rightarrow \infty$, tel que discuté à la section 1.2.1. Une étude utilisant une extrapolation à partir d'amas de taille finie pour le modèle de Heisenberg isotrope en 2 dimensions a déterminé une valeur de $M = 0.6140 \pm 0.0006$ [8]. Nous nous attendons alors à ce que la solution réelle du paramètre d'ordre antiferromagnétique à $T = 0$ soit plus petite que cette valeur, ce qui implique que le résultat en Monte Carlo quantique semble plus crédible.

3.1.2 Exposant critique

Un agrandissement du graphique de la figure 3.2 près de la température de Néel pour l'amas 2×2 est tracé à la figure 3.3. Ce graphique nous permet d'observer un comportement du paramètre d'ordre en $a(T_N - T)^\beta$, où a et β sont des constantes, tel qu'attendu pour un changement de phase du deuxième ordre. En effet, en posant la valeur de l'exposant critique à $\beta = 0.5$, celui obtenu en utilisant l'ACM, nous pouvons réaliser le lissage tracé à la figure 3.3. Ce résultat nous permet de déduire que la VCA n'offre pas d'avantage par rapport aux calculs en champ moyen pour déterminer les exposants critiques, du moins pour le cas étudié ici.

Or nous savons qu'expérimentalement l'exposant critique décrivant le comportement du paramètre d'ordre autour de la transition est plutôt de l'ordre de $\beta \approx 0.4$. La différence

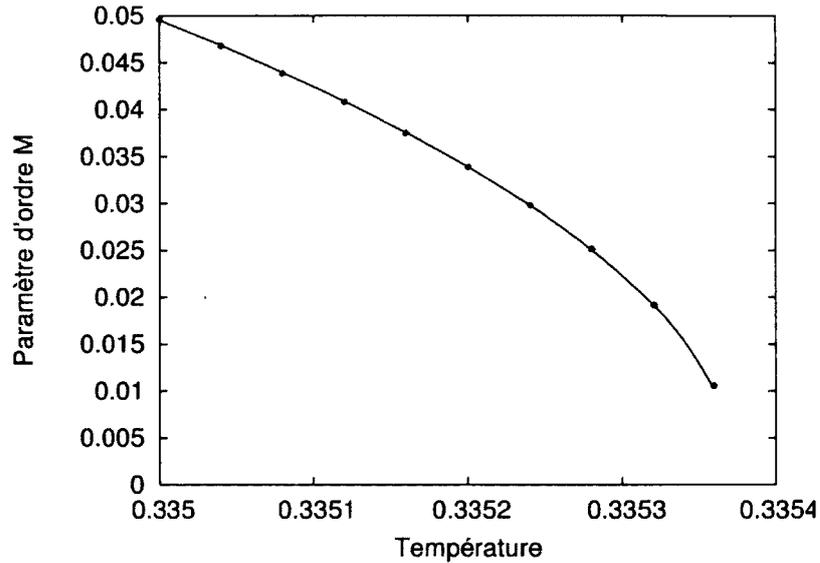


FIGURE 3.3 – Paramètre d’ordre antiferromagnétique en fonction de la température à $U = 8$ (points rouges). La courbe est un lissage de la fonction $a(T_N - T)^\beta$ après avoir fixé $\beta = 0.5$.

entre l’expérience et nos résultats n’est pas surprenante pour différentes raisons. D’abord, tel que mentionné plus haut, le modèle de Hubbard en deux dimensions ne devrait pas être antiferromagnétique à température finie en vertu du théorème de Mermin-Wagner [9]. Ainsi l’existence du changement de phase observé dans notre étude provient de la méthode utilisée, et non d’une réelle transition. Dans le cas expérimental, les cuprates sont en fait des systèmes quasi-bidimensionnels. La transition observée avec notre méthode a tout de même un sens. Nous en discuterons davantage un peu plus loin.

Ensuite, une autre raison expliquant pourquoi notre méthode ne peut déterminer théoriquement les exposants critiques mesurés expérimentalement est que celle-ci limite les longueurs de corrélation à la taille de l’amas. Or pour déterminer les exposants critiques théoriquement, on doit pouvoir considérer le comportement des longueurs de corrélation qui divergent près de la transition. Ainsi, pour calculer les exposants critiques, nous aurions besoin de considérer de très grandes longueurs de corrélation, ce qui n’est pas permis par notre méthode.

Ce qui limite les longueurs de corrélation à l’amas dans la VCA et la CPT, c’est que les excitations à deux particules ne peuvent être transmises entre les amas. Ce qui lie

les amas entre eux, c'est la fonction de Green sans interaction à une particule. Ainsi, les excitations tel que les ondes de spin, qui font disparaître l'ordre à longue portée, ne peuvent se développer dans le système sauf dans la limite des petites longueurs d'onde.

3.1.3 Température de Néel pour le cas demi-rempli

Bien que notre approche n'apporte aucune information supplémentaire par rapport à l'ACM pour le calcul d'exposants critiques, elle offre tout de même des avantages. C'est en étudiant le comportement de la température de Néel T_N en fonction de U qu'on peut remarquer une importante distinction entre la VCA et l'ACM. Le graphique à la figure 3.4 compare les deux méthodes, en utilisant deux amas différents pour la VCA.

Dans le cas de l'ACM, nous observons une augmentation exponentielle de la température de Néel en fonction de U . Du côté de la VCA, nous obtenons plutôt un maximum autour de $U = 5.6$. À faible U , nous observons avec la VCA un comportement linéaire pour l'amas 2×2 et exponentiel dans le cas de l'amas 2×3 .¹ Ce dernier amas donne un résultat plus crédible quand on compare avec l'ACM, cette dernière étant une approche adaptée au faible couplage, là où la double occupation est grande.

À fort U , la température de Néel continue de croître dans le cas de l'ACM alors que pour la VCA, nous obtenons plutôt une décroissance. Ce résultat de la VCA est plus réaliste : à fort U , nous sommes dans la limite du modèle de Heisenberg, donc la seule échelle d'énergie décrivant le système devient $J = 4t^2/U$. Un lissage des données à $U > 8$ nous confirme le comportement en J de la courbe. Le graphique de la figure 3.5 nous montre aussi le comportement en J de la température de Néel. On y observe qu'à fort couplage, T_N/J sature et semble tendre vers une constante.

Ces résultats offrent une indication de l'efficacité de la méthode utilisée. Malgré que l'amas 2×3 soit très petit, la VCA donne des résultats qui ont un sens à la fois à faible et à fort U : un comportement exponentiel à faible U ainsi qu'un comportement en J à fort couplage. Nous nous attendons alors qu'à couplage intermédiaire, nos résultats restent crédibles.

Le graphique de la figure 3.4 nous permet de définir les différents régimes du modèle de Hubbard en lien avec le comportement de la température de Néel. Le couplage faible est la

1. Le graphique peut donner l'impression que la température de Néel tombe à 0 à une valeur finie de U . Cependant, ceci est probablement dû à la précision du calcul. Plus le champ de Weiss est petit, plus les calculs requièrent de précision, ce qui implique que la difficulté numérique augmente pour déterminer les températures de transition.

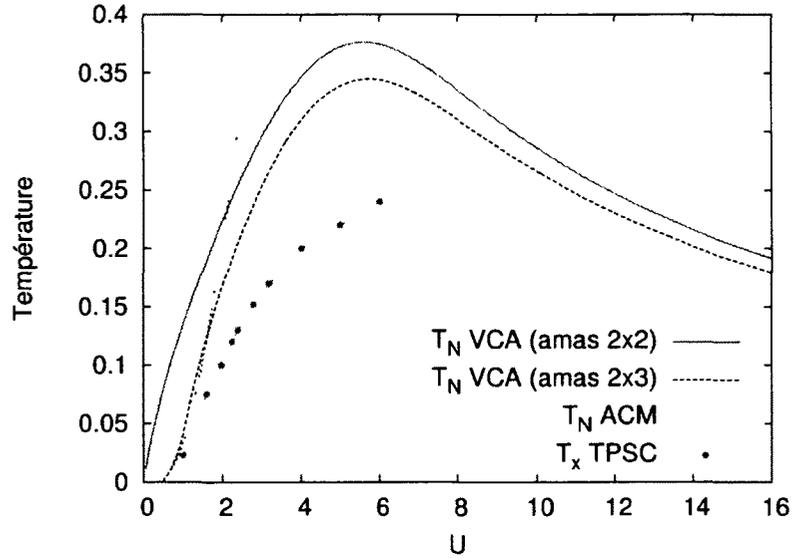


FIGURE 3.4 – Température de Néel et T_X en fonction du terme d'interaction U . Les données de la TPSC proviennent de la référence [44].

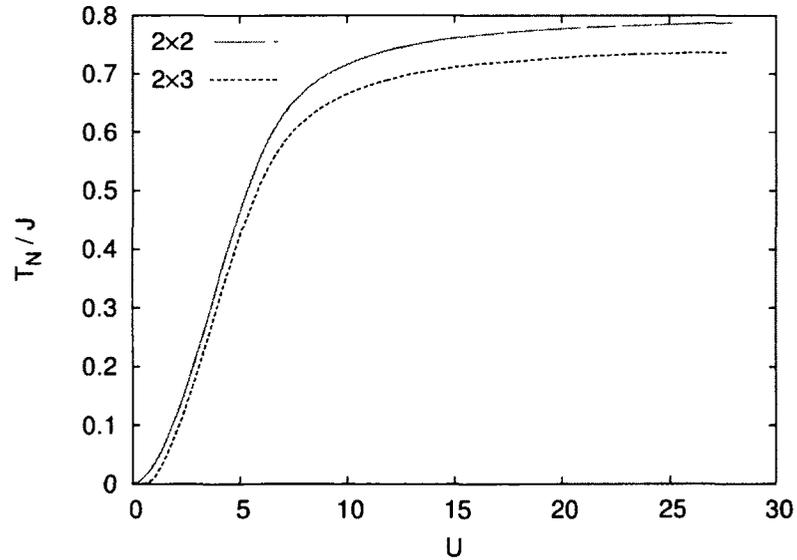


FIGURE 3.5 – Température de Néel divisée par J en fonction du terme d'interaction U .

région où T_N augmente de façon exponentielle, soit de $U=0$ à $U \sim 1$. Nous avons ensuite le couplage intermédiaire, où la température de Néel sature et atteint un maximum, entre $U \sim 1$ et $U \sim 10$. Ensuite, nous entrons dans la zone de couplage fort, à $U \gtrsim 10$, où le système se comporte comme le modèle de Heisenberg.

Ce qui distingue principalement la VCA et l'ACM et qui permet d'obtenir des résultats différents dans les deux cas, c'est le fait que pour la VCA les corrélations à courte portée sont traitées de façon exacte puisqu'un amas est diagonalisé exactement dans la méthode. Dans le cas de l'ACM, le terme à 2 corps est remplacé par le produit d'un champ moyen avec un terme à un corps. Ainsi, les corrélations à courte portée sont négligées.

3.1.4 Signification de l'ordre en 2D à température finie

Nous avons mentionné plus haut que la solution réelle du modèle de Hubbard à température finie en 2D ne devait comporter aucune brisure de symétrie, tel que démontré par le théorème de Mermin-Wagner. Cependant, nos résultats ont quand même un sens physique. Nous observons en fait l'effet des corrélations à courte portée sur le système en négligeant, lors du traitement par amas, les corrélations à longue portée.

À température très élevée, la longueur de corrélation antiferromagnétique devrait tendre vers 0 puisque l'augmentation de la température devrait induire du désordre. Lorsque la température diminue, cette longueur de corrélation augmente lentement, jusqu'à atteindre une température de «crossover» T_X à partir de laquelle la longueur de corrélation augmente de façon exponentielle, jusqu'à devenir infinie à $T=0$, là où le changement de phase se produit. Le système entre alors dans ce qu'on appelle le régime classique renormalisé [45]. Ce comportement a été mis en évidence par la TPSC, supporté par des données obtenues par une approche de Monte-Carlo quantique [16].

La TPSC est une approche analytique valide à couplage faible et intermédiaire et spécifique au modèle de Hubbard à 1 bande. Il s'agit d'une méthode auto-cohérente pour le calcul des fluctuations de spins et de charges. Elle respecte le théorème de Mermin-Wagner.

Cette température T_X obtenue par la TPSC a été ajoutée à notre graphique de la figure 3.4. Comme on observe, la température de Néel obtenue avec la VCA est plus élevée que la température de crossover déterminée par la TPSC. Pour expliquer cette différence, il faut comprendre que cette température T_X n'indique pas un changement de phase, mais plutôt un changement de comportement dans la courbe de la longueur de corrélation

antiferromagnétique. Le critère servant à déterminer le moment où le système passe d'une phase paramagnétique au régime classique renormalisé est en partie arbitraire : on ne peut définir très précisément à quel moment la courbe adopte un comportement exponentiel.

Nos résultats montrent tout de même la forte tendance à l'antiferromagnétisme du modèle de Hubbard en 2D à température finie. Cependant les fluctuations thermiques empêchent en réalité le système de s'ordonner. La VCA ne peut malheureusement pas tenir compte de ces fluctuations liées à des corrélations à longue portée. Ainsi, notre méthode mesure d'une certaine façon T_X , ou plutôt sa dépendance face à des paramètres tel que U ou le potentiel chimique. Dans la VCA, on peut supposer que lorsque la longueur de corrélation atteint une certaine grandeur de l'ordre de la taille de l'amas, notre système s'ordonne, ce qui donne une certaine estimation de T_X .

La TPSC est une méthode valide seulement à couplage faible et intermédiaire. Ceci explique pourquoi la température T_X déterminée par la TPSC semble vouloir continuer d'augmenter en fonction de U plutôt que de redescendre tel qu'on observe avec la VCA.

3.1.5 Comparaison avec le système à $T=0$

Dans cette section, nous nous intéresserons aux résultats à $T=0$ pour les comparer à ceux à température finie. Le graphique à la figure 3.6 nous permet de comparer différentes données obtenues à température nulle et à température finie en fonction de U : la température de Néel, l'énergie de condensation E_c et le champ de Weiss M' qui solutionne la fonctionnelle de Potthoff. L'énergie de condensation est la différence d'énergie entre l'état ordonné et l'état normal à température nulle : $E_c = \Omega(M^*) - \Omega(0)$.

L'énergie de condensation peut nous donner une indication sur la température de Néel, considérant que plus celle-ci est grande, plus on peut s'attendre à ce que la température de Néel soit grande aussi. Cependant, il n'existe pas de relation directe entre ces deux quantités. En effet, l'effet de la température sur le système est plus complexe qu'une simple mise à l'échelle de ce qui se produit à température nulle. Cependant, tout comme la température de Néel, l'énergie de condensation tend vers 0 dans les deux limites : $U = 0$ et $U \rightarrow \infty$.

En ce qui concerne le maximum de l'énergie de condensation, il est autour de $U = 3.5$, celui du champ de Weiss est environ $U = 4.6$ alors que le maximum de la température de Néel est à environ $U = 5.7$. On remarque ainsi qu'on ne peut se fier directement à l'énergie de condensation ou au champ de Weiss à température nulle pour déterminer

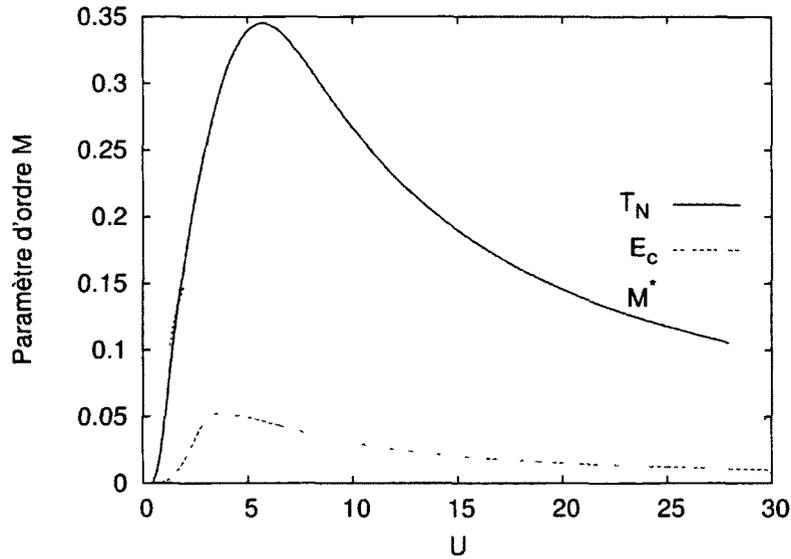


FIGURE 3.6 – Température de Néel T_N , énergie de condensation E_c et valeur du champ de Weiss M^* qui minimise la fonctionnelle de Potthoff en fonction de U , pour un amas 2×3 .

l'amplitude de la température de Néel. Ceci nous montre que la méthode à température finie n'est pas qu'une simple extrapolation du comportement du système à température nulle, ce qui justifie l'intérêt de cette étude.

D'un point de vue numérique, la figure 3.6 nous permet de constater que les calculs deviennent de plus en plus difficiles à réaliser lorsque $U < 0.5$. En effet, lorsque l'énergie de condensation devient petite, la fonctionnelle de Potthoff varie habituellement très peu en fonction du champ de Weiss, du moins entre le minimum et la solution non-ordonnée dans le cas d'une transition du deuxième ordre. La profondeur du minimum, qui est l'énergie de condensation, se rapproche rapidement de la précision du calcul.

En ce qui concerne le paramètre d'ordre à $T = 0$, nous l'avons tracé en fonction de U à la figure 3.7 pour deux amas. Tout comme pour le cas de la température de Néel, nous avons une fois de plus le comportement linéaire à faible U pour l'amas 2×2 , alors que le comportement est exponentiel pour l'amas 2×3 . À fort U , l'aimantation sature, tel que prévu puisque l'aimantation dans le modèle de Heisenberg ne dépend pas de J . L'aimantation du modèle de Heisenberg selon des calculs en Monte Carlo est indiquée sur le graphique par des pointillés[42]. C'est la solution qu'on devrait retrouver à $U \rightarrow \infty$

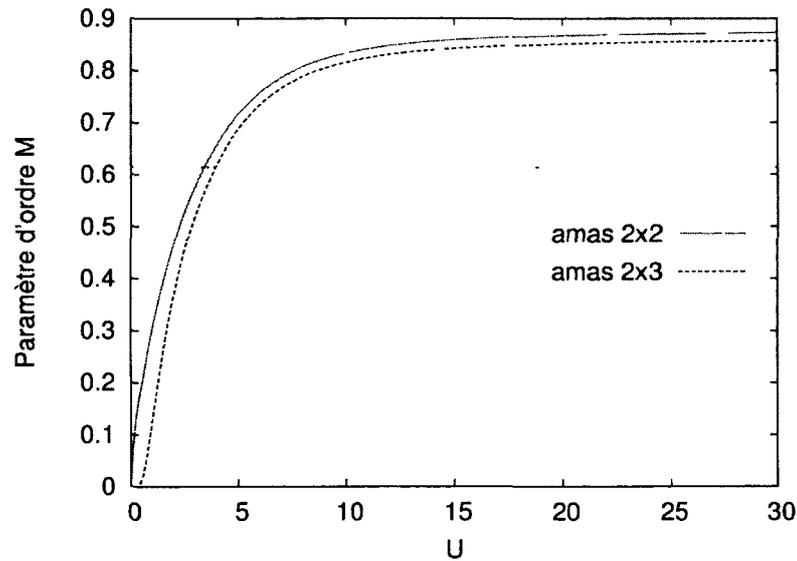


FIGURE 3.7 – Aimantation alternée en fonction de U à $T = 0$. La ligne pointillée indique l'aimantation pour le modèle de Heisenberg [8].

pour le réseau infini.

3.1.6 Remplissage et transition du 1^{er} ordre

Jusqu'à présent les transitions de phase étudiées étaient du 2^e ordre, le paramètre d'ordre antiferromagnétique M^* variait de façon continue jusqu'à atteindre une valeur de 0. Nous nous intéresserons ici à des cas où la transition est plutôt du 1^{er} ordre, c'est-à-dire où le paramètre d'ordre devient nul de façon discontinue à la transition. Nous observons ce type de transition entre autres en variant le remplissage.

Pour comprendre comment se manifeste une transition du 1^{er} ordre avec la VCA, nous avons tracé à la figure 3.8 la fonctionnelle de Potthoff $\Omega(M')$ en fonction du champ de Weiss antiferromagnétique M' . Pour les quatre plus petites températures, il existe deux minimums et un maximum. On peut éliminer le maximum des solutions possibles puisqu'il ne peut représenter, bien sûr, la solution recherchée, qui devrait être la plus basse valeur de $\Omega(M')$. On voit que la solution ordonnée $\Omega(M^*)$ est d'abord plus basse en énergie à faible température que la solution non-ordonnée $\Omega(0)$. Lorsque la température augmente, cette situation change : la solution ordonnée devient plus petite en énergie que la solution non-ordonnée.

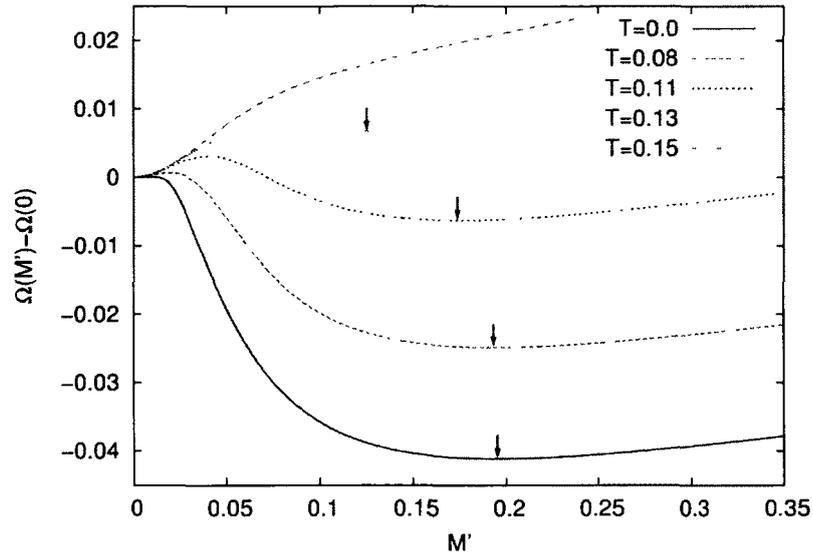


FIGURE 3.8 – Fonctionnelle de Potthoff (décalée selon sa valeur à $M'=0$) en fonction du champ de Weiss M' pour différentes températures à $U = 8$ pour un amas 2×2 à $\mu = 6.4$. Les solutions ordonnées sont indiquées par des flèches.

À la figure 3.9, nous avons tracé les solutions stationnaires de la fonctionnelle de Potthoff pour l'état ordonné (antiferromagnétique) et non-ordonné (paramagnétique) en fonction de la température. La véritable solution du système est celle associée à la plus petite valeur du grand potentiel. Sur le graphique, la ligne pointillée verticale indique où la solution réelle du système change de phase, soit à $T = 0.119$.

Dans ce même graphique, on voit que la solution antiferromagnétique s'arrête à une certaine valeur de température, vers $T = 0.13$. Ceci peut se comprendre à partir de la figure 3.8. En effet, lorsque la température augmente, le minimum associé à la phase antiferromagnétique disparaît. Ainsi la transition ne se produit pas à l'endroit où la solution ordonnée disparaît mais elle se produit plutôt lorsque le grand potentiel de la solution normale devient plus petit que celui de la solution antiferromagnétique.

Étant donné que nous travaillons dans l'ensemble grand canonique, nous fixons dans les calculs le potentiel chimique μ et la température T pour obtenir ensuite les quantités thermodynamiques désirées. Afin de donner un aperçu de la façon que le remplissage évolue en fonction de T , nous avons tracé le graphique 3.10. Le remplissage est calculé de deux façons différentes : en utilisant la fonction de Green du réseau et en utilisant

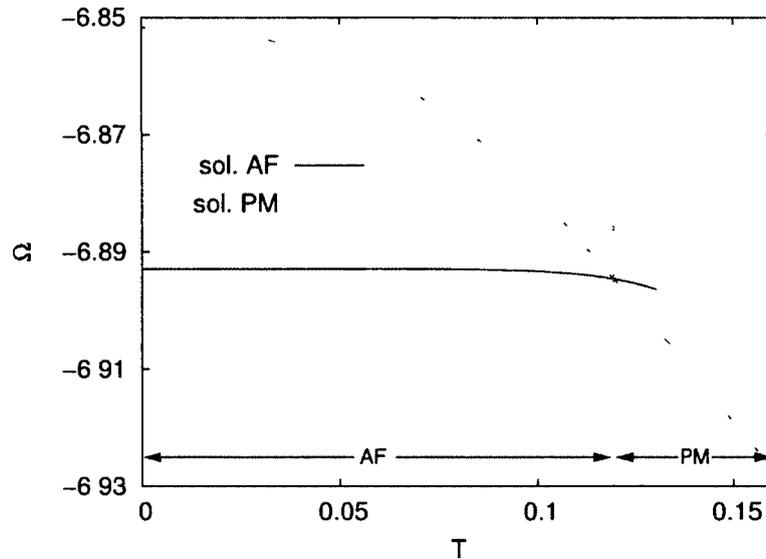


FIGURE 3.9 – Solutions antiferromagnétique (AF) et paramagnétique (PM) en fonction de la température avec $U = 8$ et $\mu = 6.4$ pour un amas 2×2 . La ligne pointillée indique le changement de phase entre l'ordre antiferromagnétique et l'état paramagnétique.

la dérivée par rapport au potentiel chimique du grand potentiel du réseau (voir section 2.5.5).

Sur cette dernière figure, on remarque d'abord une importante différence entre le remplissage calculé à partir de la fonction de Green et à partir du grand potentiel. Il n'y a ainsi pas de cohérence thermodynamique entre les deux façons de calculer le remplissage. Tel que discuté à la section 2.5.5, pour avoir cohérence thermodynamique dans le calcul du remplissage, il faut inclure le potentiel chimique de l'amas μ' comme paramètre variationnel.

Peu importe la façon utilisée pour calculer le remplissage, il existe un saut dans le remplissage à la transition. Lorsque le remplissage est calculé à partir de la fonction de Green, on passe d'un remplissage de 1.004 dans la phase antiferromagnétique à 1.080 dans la phase paramagnétique. Ceci peut signifier que nous sommes en présence d'une séparation de phase ou sinon il peut s'agir d'un artefact de la méthode utilisée.

Pour comparer ces derniers résultats à ceux obtenus avec un amas 2×3 , nous avons tracé le graphique à la figure 3.11. Nous observons la même situation que pour un amas 2×2 , soit une importante différence entre les deux façons de calculer le remplissage. En

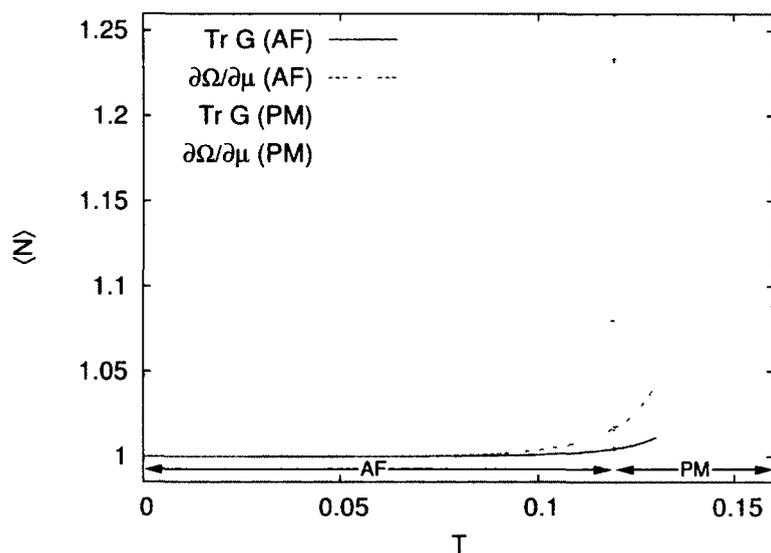


FIGURE 3.10 – Remplissage du réseau de la solution antiferromagnétique (AF) et paramagnétique (PM), calculé de deux façons : à partir de la trace de la fonction de Green ($\text{Tr } G$) et à partir de la dérivée du grand potentiel ($\partial\Omega/\partial\mu$). Amas 2×2 , $U = 8$ et $t = 1$.

fait, le remplissage a augmenté pour les mêmes valeurs de T .

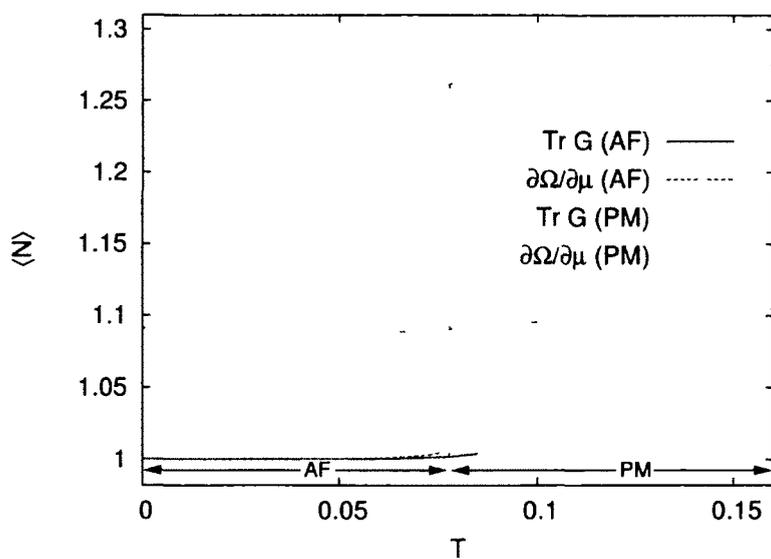


FIGURE 3.11 – Même conditions que la figure 3.10, mais pour un amas 2×3

3.1.7 Diagramme de phase antiferromagnétique

Nous pouvons réaliser le même type de calcul que ceux présentés à la section précédente pour diverses valeurs de potentiel chimique afin d'obtenir un diagramme de phase en fonction de la température et du remplissage. Nous obtenons ainsi le diagramme de phase présenté à la figure 3.12, où les résultats sont présentés pour un système 2×2 et 2×3 . Étant donné la symétrie électron-trou, le côté dopé aux trous sera une simple réflexion du côté dopé aux électrons.

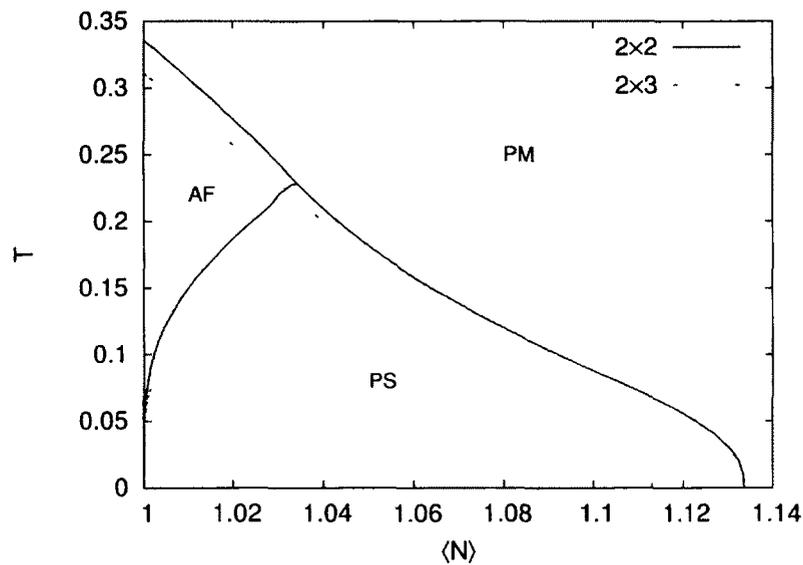


FIGURE 3.12 – Diagrammes de phase antiferromagnétique pour deux différents amas, avec $U = 8$ et $t = 1$. Les deux diagrammes sont séparés en trois régions : antiferromagnétique (AF), paramagnétique (PM) et séparation de phase (PS).

Trois phases sont présentes dans le diagramme de phase. D'abord, nous avons une phase antiferromagnétique (AF) à gauche du graphique et une phase paramagnétique (PM) à droite. Quant à la troisième région, identifiée par PS, la VCA n'y détermine pas de solution dans les conditions étudiées. En effet, à température constante, lorsque nous traversons une transition du 1^{er} ordre en variant le potentiel chimique, nous obtenons une discontinuité dans le remplissage (tel qu'observé à la section précédente). Il y a ainsi un gap dans le remplissage accessible par la méthode, ce qui explique l'existence de la région sans solution (PS).

Si les résultats étaient réels (et non un artefact), la région sans solution correspondrait

à une séparation de phase. Dans ce cas, les phases PM et AF se mélangent à potentiel chimique μ constant dans une proportion permettant d'obtenir le remplissage désiré. On peut obtenir les proportions de chacune par une simple construction de Maxwell, où la densité de chacune des phases change de façon linéaire en fonction du remplissage.

L'absence de solution peut avoir différentes explications. Voici quelques hypothèses :

1. Il est possible que ce soit un simple artefact de la méthode utilisée, sans signification réelle. Dans ce cas, elle devrait disparaître avec la taille de l'amas.
2. Il peut aussi s'agir d'une séparation de phase qui a lieu à température nulle dans la solution exacte et qui se répercute dans nos calculs à température finie.
3. L'absence de solution pourrait être induite par un phénomène physique lié au modèle de Hubbard, mais qui n'apparaît pas explicitement dans les calculs. Par exemple, un ordre non-consideré dans les calculs pourrait peut-être induire un tel comportement.

Bien que la première hypothèse semble la plus probable à première vue, nous allons vérifier comment se comporte le système à température nulle pour des amas plus grands, afin d'obtenir une solution.

Le tableau 3.1 présente les densités critiques où les transitions de phase se produisent pour différents amas à température nulle : N_{AF} représente la densité où se termine l'ordre antiferromagnétique et N_{PM} la densité où commence la phase paramagnétique (à partir du demi-remplissage). On y remarque d'abord qu'à température nulle, l'ordre antiferromagnétique existe seulement à demi-remplissage pour tous les amas. Ceci est une indication très probable que l'ordre antiferromagnétique existe seulement à demi-remplissage. Cependant, rien ne semble indiquer que $N_{PM} \rightarrow N_{AF}$ lorsque la taille de l'amas augmente. Ainsi, ceci rend moins probable la première hypothèse, puisque c'est un comportement systématique.

Il nous reste à vérifier la deuxième et la troisième hypothèse. Pour comprendre ce qui se passe, nous allons comparer nos résultats avec ceux obtenus par d'autres méthodes de calcul tel que le Monte Carlo Quantique.

3.1.8 Comparaison avec d'autres méthodes

Nous pouvons comparer ces solutions avec celles obtenues par d'autres méthodes. D'abord, en 1985, Hirsch [42] concluait en utilisant une méthode en Monte Carlo que l'ordre antiferromagnétique existait seulement à demi-remplissage à $T=0$, peu importe

Amas	N_{AF}	N_{PM}
2×2	1.000	1.134
2×3	1.000	1.113
2×4	1.000	1.099
B10	1.000	1.121
3×4	1.000	1.093

TABLEAU 3.1 – Densité d'électron critique à partir de laquelle l'ordre antiferromagnétique disparaît (N_{AF}) et la phase paramagnétique (N_{PM}) apparaît.

la valeur de U . En 1990, une autre étude à partir d'une approche en champ moyen (Hartree-Fock) par Schulz [46] concluait qu'à température nulle l'ordre antiferromagnétique *commensurable* n'existe qu'à demi-remplissage, alors qu'un ordre antiferromagnétique *incommensurable* existe en dehors du demi-remplissage, jusqu'à une valeur critique de la densité électronique. En fait, ces résultats par Schulz se limitaient au faible couplage, plus précisément à $U=2$.

Cette étude par Schulz comprenait aussi des résultats à température finie. La figure 3.13 présente le diagramme de phase obtenu par Schulz. On y observe les phases antiferromagnétiques commensurable (C) et incommensurable (IC). On y voit que la phase incommensurable présente à température nulle disparaît au profit d'un ordre commensurable à une certaine température, qui dépend du remplissage. Ainsi, un ordre antiferromagnétique commensurable n'est présent hors du demi-remplissage que lorsque la température est non-nulle.

La forme de ce graphique obtenu par Schulz ressemble beaucoup au graphique obtenu par notre approche. Ceci nous laisse croire que l'absence de solution dans notre cas pourrait être due au fait que le système aurait une préférence pour se placer dans une autre configuration, mais cette configuration ne peut pas être sondée par la VCA. Cette dernière ne permet pas d'obtenir un ordre incommensurable étant donné que l'ordre étudié doit pouvoir être périodique dans le super réseau.

En fait, la ressemblance entre les deux approches n'est pas très surprenante. En effet, dans les deux cas, les corrélations à longue portée sont éliminées des calculs et remplacées par un champ moyen. Une importante distinction entre les deux méthodes réside dans le fait que dans notre cas, nous gardons quand même les corrélations à courte portée. Pour savoir si l'ordre incommensurable est une simple conséquence du type d'approche utilisé ou s'il a un sens physique, nous allons comparer avec une autre méthode de calcul.

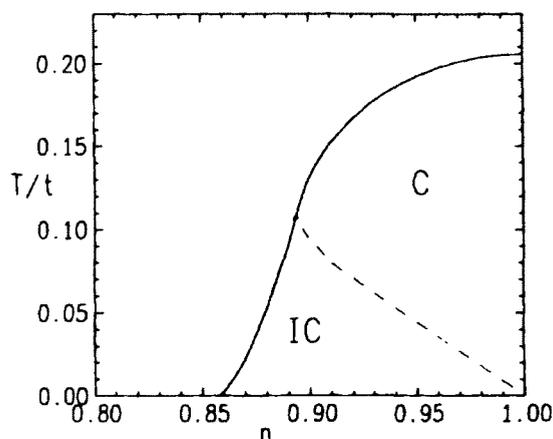


FIGURE 3.13 – Diagramme de phase obtenu par Hartree-Fock. Les phases observées sont les phases antiferromagnétiques commensurable (C) et incommensurable (IC). $U = 2$ et $t = 1$. Tiré de la référence [46].

Tel que discuté précédemment, les températures de *crossover* de la TPSC peuvent être comparées à nos températures de transition. Nous reproduisons à la figure 3.14 le graphique de la température de *crossover* en fonction du remplissage obtenu par Vilk *et al.* [44]. Tel qu'on l'observe sur ce graphique à partir d'une valeur critique de remplissage, la température de *crossover* devient associée à un vecteur d'onde incommensurable [44]. Ceci donne un sens au diagramme de phase obtenu par l'approche Hartree-Fock où on y observait aussi la tendance vers l'incommensurabilité. Cependant, le diagramme obtenu par TPSC ne contient pas d'information sur ce qui se passe à l'intérieur des frontières du diagramme de *crossover*, ce qui ne permet pas d'avoir les détails sur le comportement du système plus proche de $T=0$.

Afin de comparer directement les résultats de Vilk avec nos résultats, nous avons tracé le graphique de la figure 3.15. Bien que les courbes ne soient pas identiques, nous remarquons plusieurs similitudes. Dans les deux cas, la température critique augmente lorsque U est augmenté. Nous voyons aussi que le remplissage critique à $T=0$ augmente dans les deux situations.

Ainsi, ces résultats nous laissent croire que la tendance du système vers un ordre antiferromagnétique incommensurable aurait pour effet de laisser une région sans solution dans nos calculs avec la VCA. Bien que nous ne puissions pas expliquer comment ceci puisse se faire exactement, la comparaison avec les résultats en TPSC et en Hartree-Fock

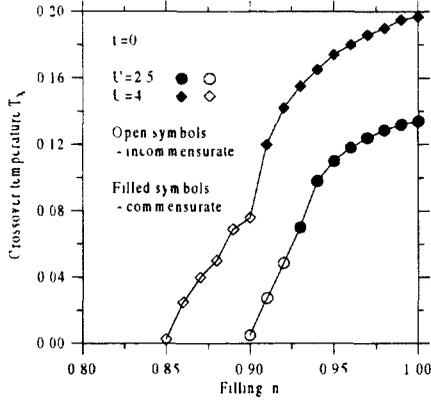


FIGURE 3.14 – Température de crossover en fonction du remplissage pour deux valeurs de U , obtenu par la TPSC. Tiré de la référence [44].

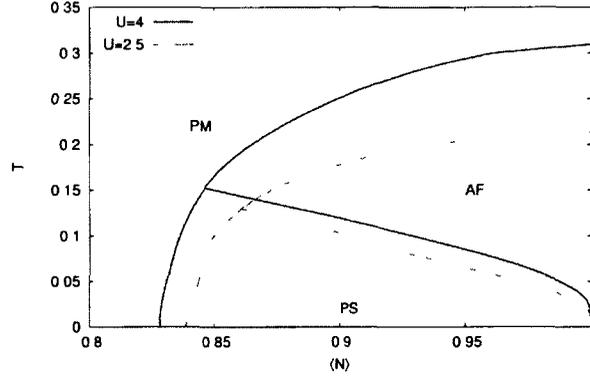


FIGURE 3.15 – Diagramme de phase antiferromagnétique pour différentes valeurs de U . Amas 2×3 , $t = 1$ et le potentiel chimique est utilisé comme paramètre variationnel.

semblent nous le suggérer fortement. Comme nous n'avons aucun indice qu'une séparation de phase existe dans ce système, nous sommes amenés à mettre de côté cette possibilité.

De façon plus générale, ces résultats suggèrent qu'un changement de phase du premier ordre en VCA ne reflète pas nécessairement une réelle existence de ce type de changement de phase et l'absence de solution ne signifie pas nécessairement que nous avons affaire à une séparation de phase. De tels comportements dans un système étudié par la VCA peuvent masquer plutôt l'existence d'une phase ne pouvant pas être sondée par la VCA.

3.2 Variation du potentiel chimique

Tel que discuté dans la section 2.5.5, la seule façon d'assurer la cohérence thermodynamique dans le calcul de la densité électronique est d'utiliser le potentiel chimique de l'amas comme paramètre variationnel. Dans ce cas, les remplissages calculés à partir du grand potentiel thermodynamique et à partir de la fonction de Green deviennent identiques. En plus de permettre d'assurer la cohérence thermodynamique, ajouter le potentiel chimique de l'amas permet d'élargir l'espace variationnel, ce qui permet en théorie d'obtenir une solution plus proche de la solution réelle.

À demi-remplissage, étant donné la symétrie particule-trou du système, le potentiel chimique du réseau et de l'amas est fixé à $U/2^2$. Les résultats à demi-rempli ne changeront

2. Cette valeur est déterminée mathématiquement par la symétrie particule-trou. La symétrie

alors pas si le potentiel chimique de l'amas est ajouté comme paramètre variationnel. Ainsi, nous ne nous attarderons ici qu'au cas dopé.

Vérifions d'abord qu'il y a cohérence thermodynamique dans le calcul du remplissage. La figure 3.16 présente le graphique du remplissage calculé à partir de la fonction de Green du réseau et du grand potentiel thermodynamique pour une configuration en particulier. Nous constatons qu'il y a cohérence thermodynamique tel qu'attendu.

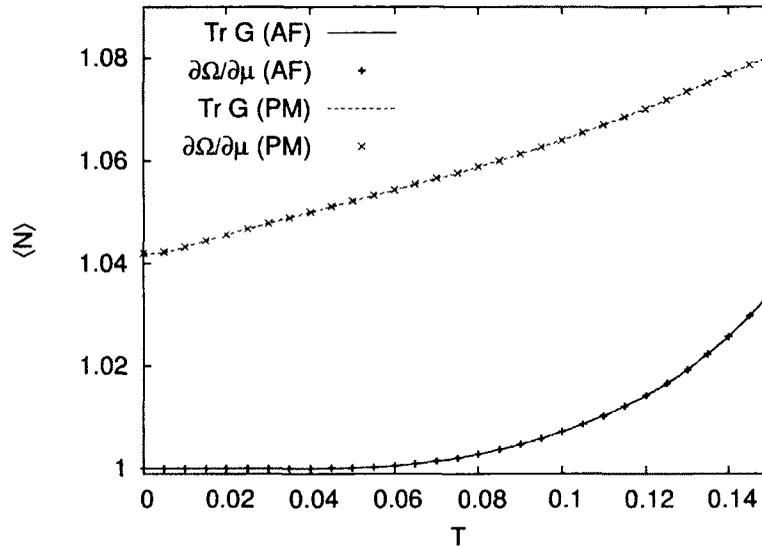


FIGURE 3.16 – Remplissage du réseau en fonction de la température calculée à partir de la fonction de Green et à partir du grand potentiel thermodynamique. Amas 2×3 , $\mu = 6.4$, $U = 8$, $t = 1$, avec variation du potentiel chimique de l'amas.

Quant au diagramme de phase antiferromagnétique, il a été tracé à la figure 3.17. Tout comme dans le cas étudié précédemment où le potentiel chimique de l'amas était fixe, nous distinguons les trois même régions. Cependant, deux principales différences apparaissent :

- L'ordre antiferromagnétique et la région sans solution s'étendent à des dopages plus élevés.
- La région sans solution diminue en superficie et ne rejoint pas le demi-remplissage à température nulle pour l'amas 2×2 .

particule-trou est déterminée par le fait que le modèle de Hubbard reste inchangé si on interchange les particules et les trous.

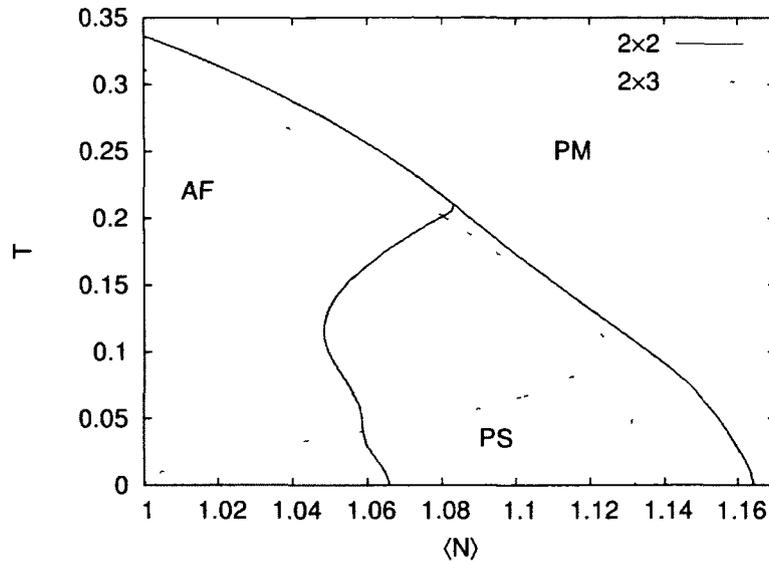


FIGURE 3.17 – Diagramme de phase antiferromagnétique pour deux amas différents. Le potentiel chimique de l'amas comme paramètre variationnel ($U = 8$, $t = 1$)

Pour savoir comment se comportent les frontières de la région sans solution (PS) en fonction de la taille de l'amas, nous avons déterminé N_{AF} et N_{PM} à $T=0$, tel que nous avons fait à la section précédente. Les résultats sont présentés au tableau 3.2.

Contrairement au cas où le potentiel chimique de l'amas μ' est fixé, nous ne voyons pas un comportement systématique de la région sans solution pour tous les amas. Trois des amas, soit les 2×3 , 2×4 et 3×4 , ont une région sans solution qui s'étend jusqu'au demi-remplissage. Dans le cas des amas B10 et 2×2 , nous avons plutôt une région sans solution qui ne va pas jusqu'au demi-remplissage. L'amas 2×2 étant très petit, il se comporte parfois différemment des autres amas, alors nous ne le jugerons pas comme représentatif. Quant à l'amas B10 (voir figure 2.2), il a une forme assez différente, ce qui peut expliquer son comportement différent.

La tendance du système vers l'antiferromagnétisme incommensurable identifiée dans les calculs Hartree-Fock et dans les calculs de TPSC semble aussi avoir un impact dans nos calculs quand le potentiel chimique est utilisé comme paramètre variationnel. Pour la plupart des amas, le comportement ressemble à celui observé dans le cas où on ne considèrerait pas le potentiel chimique. Ceci renforce davantage l'idée que la tendance à l'antiferromagnétisme incommensurable se répercute dans nos calculs par une absence

Amas	N_{AF}	N_{PM}
2×2	1.066	1.164
2×3	1.000	1.132
2×4	1.000	1.122
B10	1.121	1.111
3×4	1.000	1.103

TABLEAU 3.2 – Densité d'électron critique à partir de laquelle l'ordre antiferromagnétique disparaît (N_{AF}) et la phase paramagnétique (N_{PM}) apparaît. $U = 8$, $t = 1$ et le potentiel chimique de l'amas μ' est utilisé comme paramètre variationnel. La transition pour les amas B10 et 3×4 résulte de la disparition de la solution antiferromagnétique plutôt qu'un croisement avec la solution normale.

de solution.

3.3 Ajout des sauts aux premiers et deuxièmes voisins

Jusqu'à présent, nous nous sommes intéressés au cas où nous avons une symétrie particule-trou, c'est-à-dire lorsque le terme de saut t_{ij} est limité au premier voisin. Dans cette section, nous allons étudier l'effet de l'ajout d'autres termes de saut au modèle étudié. Nous allons commencer par étudier l'impact d'une perturbation sur le système en ajoutant une petite valeur de saut au deuxième voisin. Ensuite, nous verrons comment se comporte le système lorsque les termes de saut correspondent à la structure de bande des cuprates.

3.3.1 Perturbation de la symétrie particule-trou : saut au deuxième voisin

Dans cette partie, nous allons nous attarder à la situation où l'on fixe une faible valeur au terme de saut au deuxième voisin, soit $t' = -0.1$. Nous prendrons le cas 2×3 , avec variation du potentiel chimique. Nous avons tracé le graphique correspondant à cette situation à la figure 3.18.

Nous y voyons un changement très important de la superficie de la zone sans solution. Ceci nous laisse croire que la présence d'une région sans solution dans le diagramme de

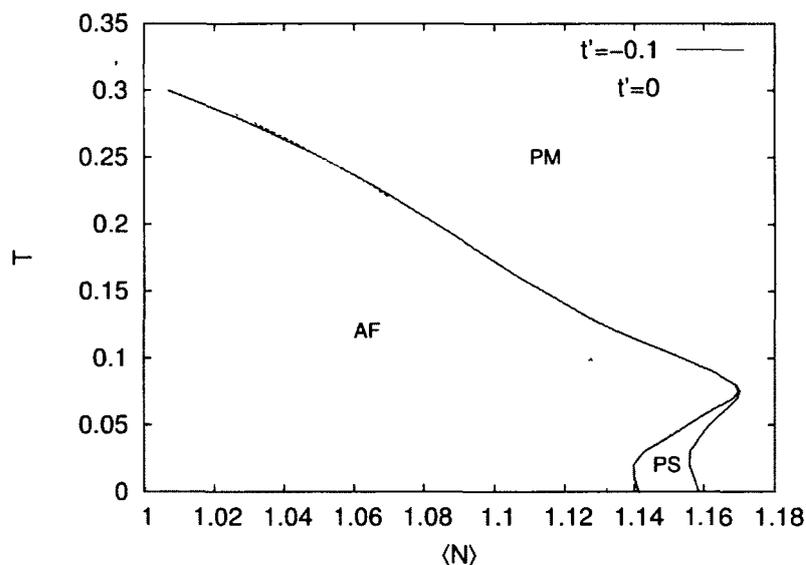


FIGURE 3 18 – Diagramme de phase antiferromagnétique avec l'ajout d'un saut au 2^e voisin (diagonal). Amas 2×3 , $U = 8$, $t = 1$, avec variation du potentiel chimique de l'amas.

phase antiferromagnétique du modèle de Hubbard est probablement liée plus particulièrement au cas où on a la symétrie particule-trou. Sur ce même graphique, on remarque aussi qu'à certains remplissages, soit autour de 1.16 électrons par site, on peut passer d'une phase paramagnétique à antiferromagnétique en augmentant la température. Ce n'est pas un résultat usuel, puisqu'une augmentation de la température devrait entraîner un plus grand désordre. Ceci est probablement causé par les limites de la méthode utilisée et à la taille de l'amas.

À partir de ce résultat, on peut s'attendre à ce que la tendance vers l'antiferromagnétisme incommensurable disparaisse aussi dans les calculs de TPSC et de Hartree-Fock lorsqu'on ajoute un terme de saut au 2^e voisin. En fait, les calculs en TPSC montrent que la région où on observe l'antiferromagnétisme incommensurable diminue rapidement en superficie avec l'augmentation de la grandeur du terme de saut aux deuxièmes plus proches voisins. Nos résultats sont similaires à ceux obtenus en TPSC par Roy [47]. Ceci rend encore plus crédible le fait que l'absence de solution serait liée à la tendance vers un ordre auquel la VCA ne peut pas avoir accès.

3.3.2 Antiferromagnétisme et cuprates

Afin de comparer nos résultats avec un modèle plus réaliste des cuprates, nous allons utiliser les paramètres de bande suggérés par Andersen et al. [48] pour l'YBaCuO. Ces paramètres sont $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$. Nous pourrions ainsi voir à quel point le diagramme de phase du modèle de Hubbard peut ressembler à celui des cuprates afin de mieux comprendre ces derniers.

Détermination de la transition

Jusqu'à présent, la fonctionnelle de Potthoff était continue et trouver les solutions stationnaires ne posait pas de problème. Dans le cas étudié dans cette section, nous y trouverons certaines situations où la fonctionnelle de Potthoff est discontinue et nous devons préciser comment nous considérons gérer cette situation. Pour illustrer la problématique, voici d'abord la fonctionnelle de Potthoff Ω en fonction du champ de Weiss antiferromagnétique M' à la figure 3.19.

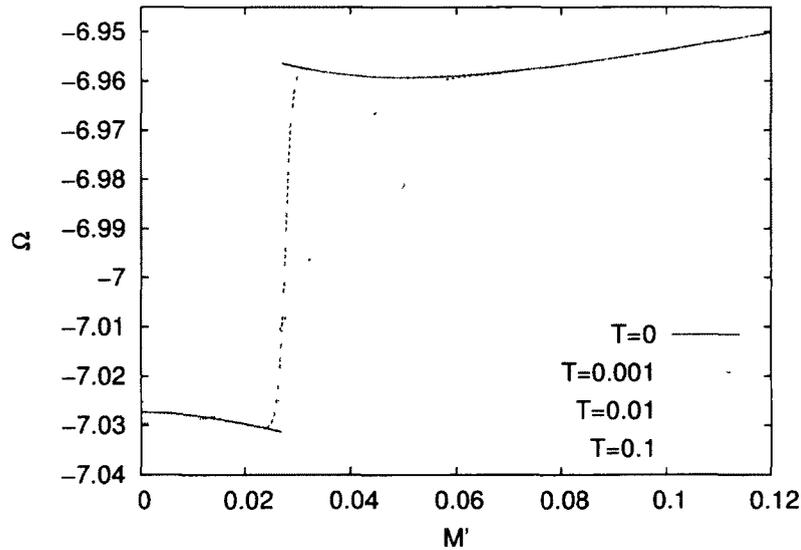


FIGURE 3.19 – Exemple de discontinuité dans la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss antiferromagnétique. Amas 2×3 , $U = 8$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$ et $\mu' = 6.35$

La discontinuité à $T = 0$ provient du fait que l'énergie du fondamental de l'amas passe

du secteur à 7 électrons à celui à 6 électrons³. Cette discontinuité apparaît à $M' = 0$ à partir d'une certaine valeur de μ et la valeur de M' à laquelle se produit la discontinuité augmente avec le dopage. Cette discontinuité disparaît aussitôt que la température est non nulle, étant donné que les états de plus basse énergie près de la discontinuité sont très rapprochés (les fondamentaux des secteurs à 6 et 7 électrons se croisent à la discontinuité), ce qui rend la courbe continue. Tel qu'observé sur le graphique 3.19, on voit à $T = 0.001$ un minimum apparaître juste avant la valeur de M' où il y avait la discontinuité à $T = 0$. Lorsque la température augmente encore, ce minimum disparaît.

À $T = 0$, nous pouvons simplement considérer les deux solutions présentes, soit celle à $M' = 0$, et l'autre autour de $M' = 0.05$. La valeur de $\Omega(M')$ à $M' = 0$ étant plus petite, nous devrions dans ce cas considérer que c'est la solution recherchée. Cependant, cette analyse pose problème aussitôt que la température apparaît, puisque la température fait apparaître une autre solution stationnaire où était la discontinuité. Cette solution est la plus petite des trois solutions possibles, alors en théorie, nous devrions la considérer comme étant la solution conservée.

Les résultats à $T = 0$ et à $T \rightarrow 0$ seraient différents selon cette analyse, avec l'apparition d'un ordre aussitôt que la température est augmentée. Ceci n'a pas de sens physiquement. Cependant, nous allons tout de même trouver les transitions sans se soucier de cet aspect. Dans ce cas, la transition à $T = 0$ apparaîtra lorsqu'à $M' = 0$ nous passerons d'un secteur de 6 à 7 électrons sur l'amas en variant le remplissage. Dans ce cas, le minimum est toujours situé à $M' = 0$. Ceci permet ensuite d'avoir une continuité avec les transitions à température finie. Cependant, il faut comprendre que les données près de la transition à $T = 0$ ne sont pas réalistes ou physiques.

La différence entre les transitions à $T = 0$ et $T \rightarrow 0$ ne surviendra pas avec l'approche proposée puisque nous allons rester dans la région en μ où la discontinuité n'apparaît pas. Du moins, nous ne dépassons pas la valeur du potentiel chimique à partir de laquelle, à $T = 0$, la contribution du secteur à 7 électrons apparaît dans la fonctionnelle de Potthoff.

Diagramme de phase antiferromagnétique : effet de la frustration du réseau

Nous présentons maintenant le diagramme de phase antiferromagnétique pour le réseau frustré, c'est-à-dire en ajoutant des termes de saut aux deuxièmes et troisièmes

3. Le secteur à 7 électrons a un fondamental dégénéré, un avec un spin \uparrow et l'autre avec un spin \downarrow . Voulant avoir un spin total nul, nous utilisons un mélange statistique de ces deux états afin d'obtenir un état avec un spin nul.

voisins · $t = 1$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$.

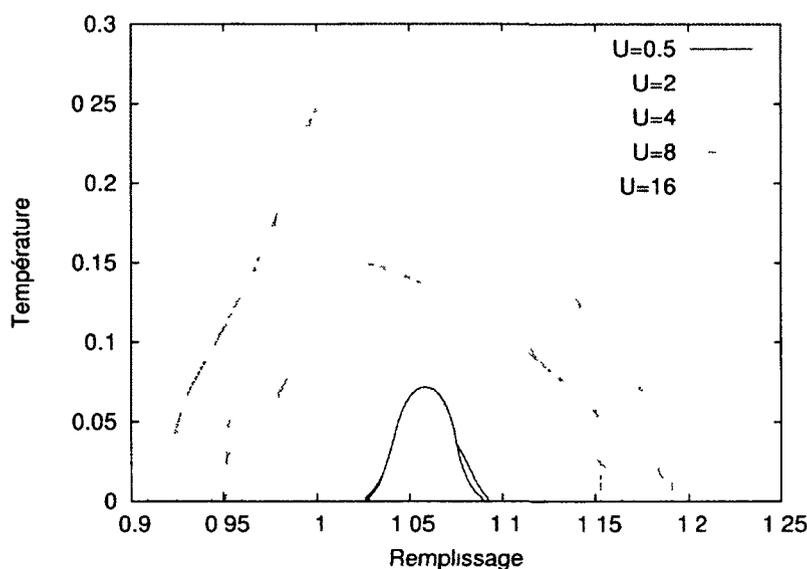


FIGURE 3.20 – Diagramme de phase antiferromagnétique pour différentes valeurs de U pour le réseau frustré. Amas 2×2 avec $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$

Nous y voyons d'abord à $U = 0.5$ un dôme antiferromagnétique centré autour d'un dopage d'environ 6%. Lorsque U est augmenté ce dôme augmente en terme de dopage et de température. À $U = 4$ le maximum du dôme se déplace légèrement vers le dopage aux trous. Par la suite, à partir de $U = 8$ sur notre graphique, le dôme antiferromagnétique commence à diminuer en taille (tant en largeur qu'en hauteur), tout en restant relativement centré autour du même point.

La variation de la hauteur du dôme antiferromagnétique en fonction de U semble se comporter de façon similaire au cas de l'amas demi-rempli non-frustré, avec une augmentation de la température de Néel à faible couplage, pour ensuite avoir une diminution à plus fort couplage. Pour voir si à fort couplage nous avons un comportement en J , tel qu'observé dans le cas non-frustré, nous avons tracé le graphique de la figure 3.21. Sur ce graphique, nous avons mis la température à l'échelle selon J en traçant le diagramme de phase en fonction T/J plutôt que simplement T , où $J = 4t^2/U = 4/U$ (nous considérons seulement le premier voisin pour J).

Nous voyons que la hauteur du dôme antiferromagnétique ne varie pas comme J , sinon la hauteur aurait convergé rapidement vers une hauteur donnée. Nous observons

plutôt que la hauteur du dôme de T_N/J augmente lorsque U augmente, ce qui veut dire qu'en terme de simple température de Néel, la hauteur du dôme diminue plus lentement que J .

Lorsque nous regardons plutôt comment se comporte ce dernier graphique autour du demi-remplissage, nous voyons cette fois-ci un comportement en J .⁴ Ceci n'est pas surprenant. En effet, la correspondance entre le modèle de Hubbard et le modèle de Heisenberg se fait à demi-remplissage seulement, ce dernier modèle comportant exactement un électron par site.

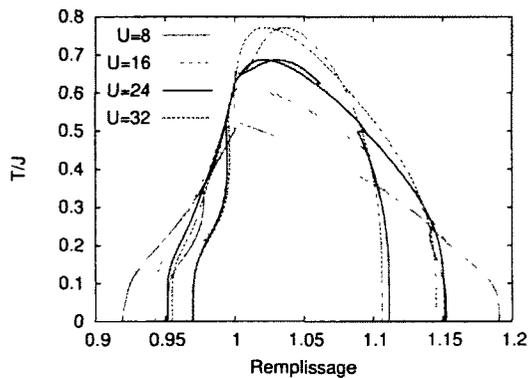


FIGURE 3.21 – Comparaison des diagrammes de phase antiferromagnétique à fort couplage (même conditions que la figure 3.23), mis à l'échelle selon J .

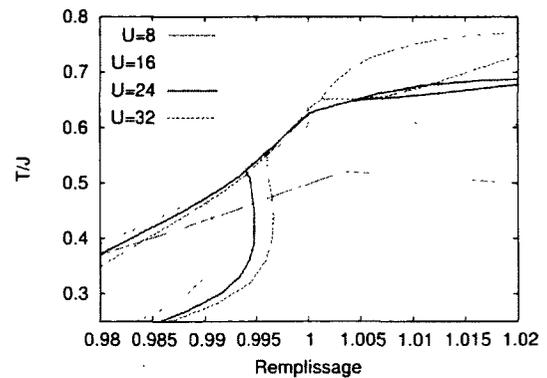


FIGURE 3.22 – Même graphique que la figure 3.21, avec un agrandissement autour du demi-remplissage.

Nous pouvons faire ces mêmes calculs pour un amas 2×3 . Nous avons tracé à la figure 3.23 le diagramme de phases pour cet amas. Tout comme le cas demi-rempli non-frustré, il y a probablement une augmentation exponentielle de la température de Néel à faible U . En effet, à $U \leq 2.5$, nous n'avons pas trouvé d'ordre antiferromagnétique en fonction du remplissage, et à $U = 2.7$, l'ordre est bien établi. Ainsi, l'ordre à $U \leq 2.5$ est soit trop faible pour être mesuré à partir des précisions numériques que nous avons, ou sinon il est simplement inexistant.

Contrairement au cas 2×2 , à faible U les dômes antiferromagnétiques sont davantage étendus du côté dopé aux trous, avec des maxima de la température de Néel autour du demi-remplissage. Lorsque U augmente à une valeur de 4, nous voyons que le dôme s'élargit et se déplace vers le dopage aux électrons, avec le maximum qui se déplace

4. En fait, ce sera plus précisément un comportement en $1/U$, puisque les autres termes de saut t' et t'' vont aussi induire des termes de couplage spin-spin, aussi en $1/U$.

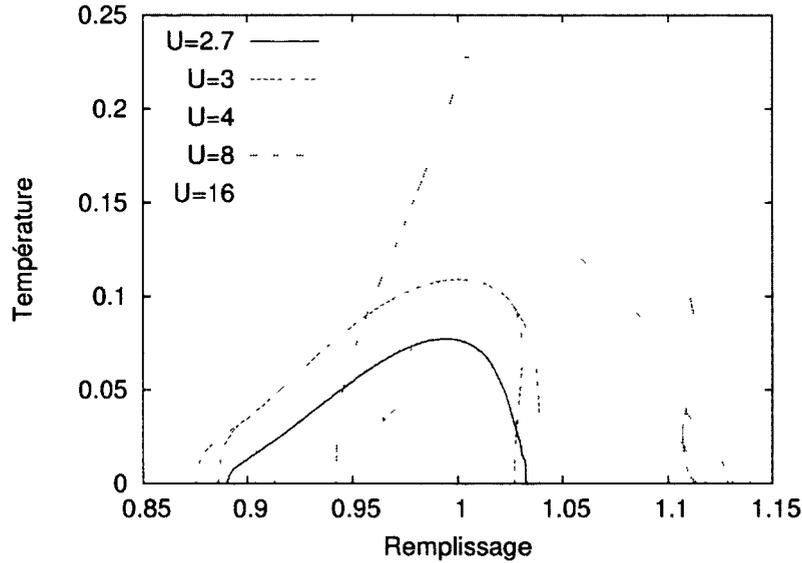


FIGURE 3.23 – Diagramme de phase antiferromagnétique pour différentes valeur de U pour le réseau frustré. Amas 2×3 avec $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$.

aussi dans la même direction. Ensuite, à plus fort couplage la région antiferromagnétique commence à se rétrécir en dopage et la température de Néel maximale diminue aussi.

Les régions sans solution sont beaucoup moins présentes que dans le cas 2×2 en terme de superficie. Ceci peut laisser croire qu'en augmentant encore la taille de l'amas, les régions sans solution pourraient disparaître. Ils seraient ainsi des artefacts de la méthode utilisée dans le cas où nous avons une frustration du réseau.

Pour voir comment se comporte le système à fort couplage, nous avons tracé le diagramme de phase en fonction de T/J , tel que nous avons fait dans la figure 3.21. Ce diagramme se trouve à la figure 3.24. Nous avons aussi fait un agrandissement de la région près du demi-remplissage, que nous retrouvons à la figure 3.25. Encore une fois, nous voyons que la hauteur du maximum du dôme antiferromagnétique ne se comporte pas comme J , mais c'est plutôt au demi-remplissage que nous observons un tel comportement.

3.3.3 Réseau frustré avec cohérence thermodynamique

Tel que discuté précédemment, l'évaluation du remplissage du réseau peut se faire de deux façons : à partir de la fonction de Green ou à partir de la dérivée du grand potentiel par rapport à μ . Afin que ces deux calculs soient équivalents, nous devons inclure le

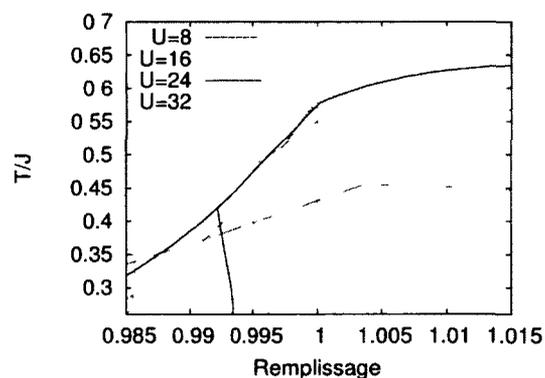
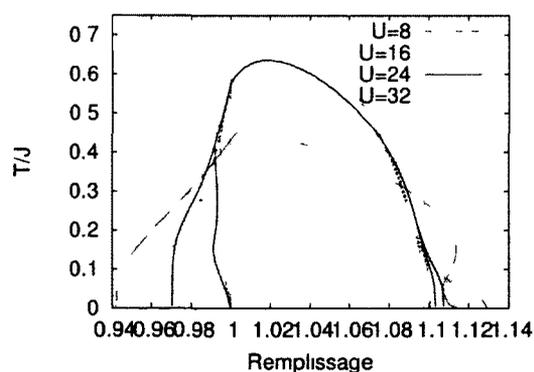


FIGURE 3.24 – Comparaison des diagrammes de phase antiferromagnétique à fort couplage (même conditions que la figure 3.23), mis à l'échelle selon J .

FIGURE 3.25 – Même graphique que la figure 3.24, avec une échelle ajustée autour du demi-remplissage.

potentiel chimique de l'amas comme paramètre variationnel. En procédant à l'évaluation de la température critique de la même façon que nous avons fait précédemment, nous obtenons le graphique de la figure 3.26.

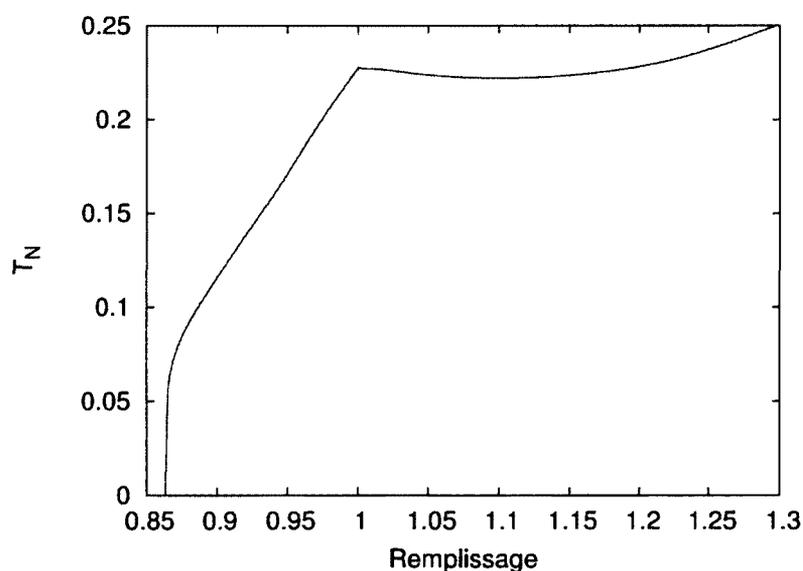


FIGURE 3.26 – Diagramme de phase antiferromagnétique pour le réseau frustré en ajoutant le potentiel chimique de l'amas μ' comme paramètre variationnel. Amas 2×3 avec $U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$.

Nous observons dans ce graphique que nous n'avons pas de régions sans solution tel que nous avons dans les autres résultats. De plus, du côté dopé aux électrons, nous observons qu'il n'y a pas de diminution de la température de Néel, au contraire. Lorsque le remplissage est autour de 1.12, nous voyons plutôt une augmentation de la température de Néel en fonction du remplissage, plutôt que d'obtenir une température de Néel qui tombe à 0.

Pour comprendre pourquoi la température de Néel se comporte très différemment des calculs précédents du côté dopé aux électrons, nous devons comprendre comment ont été faits les calculs. En fonction du potentiel chimique de l'amas μ' , la fonctionnelle de Potthoff présente une série de dômes inversés vers le bas, tel que présenté à la figure 3.27, pour trois valeurs du potentiel chimique du réseau μ . Les différents dômes représentent des remplissages d'amas différents.

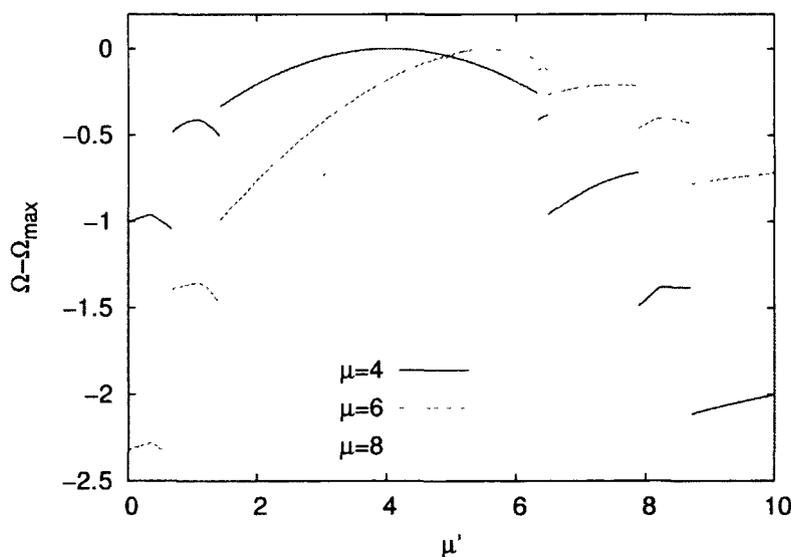


FIGURE 3.27 – Fonctionnelle de Potthoff en fonction du potentiel chimique de l'amas μ' à laquelle on a soustrait sa valeur maximale. Amas 2×3 avec $U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$.

Tel qu'on le voit sur ce graphique, en adoptant une approche où l'on sélectionne la solution ayant la valeur de Ω minimale, nous choisirions un secteur loin du demi-remplissage, ce qui n'a pas de sens. En fait, il semble qu'en fonction de μ' , les solutions qui ont un sens physique sont celles qui sont un maximum plutôt qu'un minimum, tel que nous avons vu précédemment. Par exemple, pour la courbe à $\mu = 4$ de la figure 3.27,

nous ne serions pas tentés de prendre la valeur de Ω correspondant à μ' près de 0 ou de 10. Dans ces cas extrêmes, le remplissage de l'amas n'aurait aucun sens par rapport au potentiel chimique fixé sur le réseau.

À $\mu = 4$, la solution semble claire, avec $\mu' \approx 3.9$. Le remplissage du réseau et de l'amas sont identiques (demi-remplissage) et les valeurs de μ et μ' sont similaires. De plus, nous sommes loin de discontinuités. Cependant, en augmentant μ , vers un dopage aux électrons plus grand, nous observons que déterminer la solution n'est plus aussi simple. Nous pourrions choisir différentes approches, tel que prendre la solution où la valeur de μ' la plus proche de μ ou prendre la solution ayant son remplissage la plus près de celle de l'amas .

Les calculs réalisés à partir de la VCA dans les dernières années ont été principalement réalisés à température nulle. Dans ce cas, on peut faire les calculs indépendamment à différents remplissages de l'amas, ce qui permet de ne pas avoir de discontinuités à gérer. En déterminant par exemple le paramètre d'ordre antiferromagnétique en considérant un seul secteur à la fois, on peut superposer les solutions et avoir une certaine idée du comportement du système. Cependant cette approche n'est pas possible à température finie, puisque nous travaillons dans l'ensemble grand canonique et voulons ainsi que les solutions à $T = 0$ soient les mêmes qu'à $T \rightarrow 0$.

Nous avons vu plus haut que les discontinuités causaient des problèmes d'analyse des résultats à température finie, entre autres à causes des solutions supplémentaires aux endroits où il y a discontinuité. Ceci devient encore plus important lorsqu'on permet à μ' de varier puisque les discontinuités deviennent présentes à toute valeur de μ . Nous pouvons tout de même solutionner le système dans certains cas, comme près du demi-remplissage, mais aussitôt qu'on s'approche trop des régions où il y a les discontinuités, nous ne pouvons plus se fier aux résultats.

Ainsi, ceci explique pourquoi notre graphique à la figure 3.26 n'est pas crédible lorsqu'on s'éloigne du demi-remplissage. Une façon de régler la situation serait de travailler dans les régions où il y a supraconductivité. En effet, dans ce cas, nous avons moins de discontinuités, étant donné que le champ de Weiss supraconducteur mélange les secteurs ensembles. Les discontinuités qui restent dans ce cas sont associées à un changement entre les secteurs où le spin total est 0 et $\frac{1}{2}$.⁵

5. Le hamiltonien ne conserve pas le nombre de particules, mais il conserve le spin S_z . Ses états propres peuvent ainsi s'écrire dans une base dans laquelle ils sont aussi des états propres de l'opérateur de spin. Ainsi le fondamental peut changer d'une valeur de S_z à une autre si on change le hamiltonien.

3.4 Limites de l'application de la VCA à l'antiferromagnétisme

La VCA donne des résultats significatifs à température finie, tel que l'ordre antiferromagnétique en fonction de U . Cependant, la méthode est limitée à étudier les ordres qui ont la même périodicité que le super-réseau. De plus, les limites numériques font en sorte qu'il devient difficile d'ajouter plusieurs paramètres variationnels, ce qui permettrait pourtant d'obtenir des résultats probablement plus crédibles.

Un des problèmes principaux de l'utilisation de la VCA est lié aux discontinuités qui apparaissent dans la fonctionnelle de Potthoff à $T = 0$, qui sont dues aux changements de secteur du fondamental. L'approche proposée par Potthoff ne permet pas de donner un sens à ces discontinuités. Elles sont évitées habituellement à température nulle en fixant un secteur et en considérant seulement le fondamental de ce secteur lorsque le potentiel chimique varie. Cependant, cette approche ne permet pas d'avoir une continuité entre les résultats à température nulle et à température finie. Ceci fait en sorte que nos résultats près de discontinuités ne sont possiblement pas les plus crédibles.

Un autre problème lié à l'utilisation de la VCA à température finie est dans le fait que du côté dopé aux électrons, lorsque le potentiel chimique de l'amas est utilisé comme paramètre variationnel, l'ordre antiferromagnétique ne disparaît pas lorsque le remplissage augmente. Or, nous avons besoin d'inclure le potentiel chimique pour s'assurer de la cohérence thermodynamique. Pourtant, avec les méthodes telles que CDMFT, avec un saut au deuxième voisin de $t'' = -0.3t$, l'ordre antiferromagnétique disparaît à une valeur finie du remplissage (vers $n = 1.14$ du côté dopé aux électrons) [49]. Du côté de la TPSC, la température de *crossover* atteint 0 à une valeur finie du remplissage pour $t' = -0.2$ et $U = 6$, autant du côté dopé aux trous qu'aux électrons.

Enfin, le problème des discontinuités devient encore plus important lorsque l'on permet la variation du potentiel chimique de l'amas. Pour contourner ces problèmes de discontinuité en général, il faut que la température soit plus grande que l'amplitude des discontinuités dans la fonctionnelle de Potthoff. En augmentant la taille de l'amas, nous risquons de faire apparaître davantage de discontinuités, mais l'amplitude des discontinuités risque de diminuer. Ceci nous laisse croire que l'augmentation de la taille des amas pourrait nous permettre d'obtenir des résultats plus crédibles, où la présence des discontinuités ne serait pas un problème aussi grand lorsque la température serait augmentée.

3.5 Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons pu étudier l'antiferromagnétisme à partir de la VCA, en utilisant un amas qui peut être diagonalisé complètement. Nous avons pu voir qu'il était possible d'obtenir une température de Néel à partir de la VCA pour différentes situations. Dans le cas demi-rempli, les résultats sont particulièrement intéressants, puisqu'ils permettent de faire apparaître le comportement à fort et faible couplage de la tendance à l'antiferromagnétisme du modèle de Hubbard. Cependant, ceci montre du même coup que la VCA ne respecte pas le théorème de Mermin-Wagner.

Le comportement de la température de Néel obtenue dans ce chapitre est comparable à celui la températures de *crossover* de la TPSC. Il intéressant de constater que l'absence de solution dans les diagrammes de phase du modèle de Hubbard obtenus semblent correspondre à une région où les longueurs de corrélations antiferromagnétiques incommensurables augmentent rapidement en TPSC. Cette région, qui correspond à une absence de solution dans notre cas, se comporte de façon similaire dans les cas de la VCA et de la TPSC avec l'ajout d'un terme de saut aux deuxièmes plus proches voisins t' .

Enfin, nous avons vu que l'antiferromagnétisme présente une asymétrie similaire aux cuprates lorsque l'on utilise les paramètres $U = 8$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$. Nous analyserons plus en détail le diagramme de phase obtenu par la VCA à la section 4.5 du chapitre suivant, en incluant la phase supraconductrice. Cette phase est à l'étude dans le chapitre suivant.

Chapitre 4

Supraconductivité

Ce chapitre se consacrera à l'étude de la supraconductivité du modèle de Hubbard. Nous nous concentrerons en particulier sur la supraconductivité dont la symétrie est de type d ($d_{x^2-y^2}$) puisqu'elle a été observée dans les supraconducteurs à haute température critique [50]. Le champ de Weiss que nous devons ajouter à nos amas pour inclure la possibilité d'observer cette brisure de symétrie est décrit par les équations 2.123 et 2.124.

Dans un premier temps, nous allons étudier la supraconductivité à température nulle. Plus précisément, nous allons étudier la présence de la supraconductivité à demi-remplissage. Nous allons aussi inclure l'ordre antiferromagnétique dans ce cas, afin de voir comment se comporte la coexistence de phase. Ensuite, nous allons varier la température et le dopage pour vérifier ce qui advient de la supraconductivité en fonction de ces paramètres. Afin d'avoir une comparaison avec des cuprates, nous allons frustrer le réseau pour voir comment le diagramme de phase se comporte dans ce cas. Enfin, nous allons comparer nos résultats avec les supraconducteurs à haute température critique.

4.1 Demi-remplissage à température nulle

Un ordre supraconducteur à demi-remplissage a déjà été observé à partir de la VCA par Nevidomskyy *et al.* avec des amas d'une taille jusqu'à 8 sites [51]. Ils ont observé que cet ordre coexistait avec la phase antiferromagnétique et qu'il était présent qu'à faible couplage, soit jusqu'à environ $U \approx 2.8$. Dans cette section, nous allons d'abord étudier cet ordre supraconducteur en allant à des tailles plus grandes pour ensuite étudier l'effet de la température sur des amas 2×2 et 2×3 . Nous allons définir pour cette section que D est le paramètre d'ordre supraconductrice et D' est la grandeur du champ de Weiss.

Nous avons tracé un premier graphique à la figure 4.1, où nous retrouvons le paramètre d'ordre supraconducteur D en fonction de U pour différentes tailles d'amas, sans considérer la coexistence avec l'ordre antiferromagnétique. Nous y voyons que la VCA donne un ordre supraconducteur à demi-remplissage lorsque nous sommes à faible couplage. Notons ici que la courbe pour l'amas 3×4 devrait continuer jusqu'à la valeur nulle du paramètre d'ordre, mais étant donné qu'il devient difficile d'obtenir des résultats dans cette région, la courbe n'est pas complète.

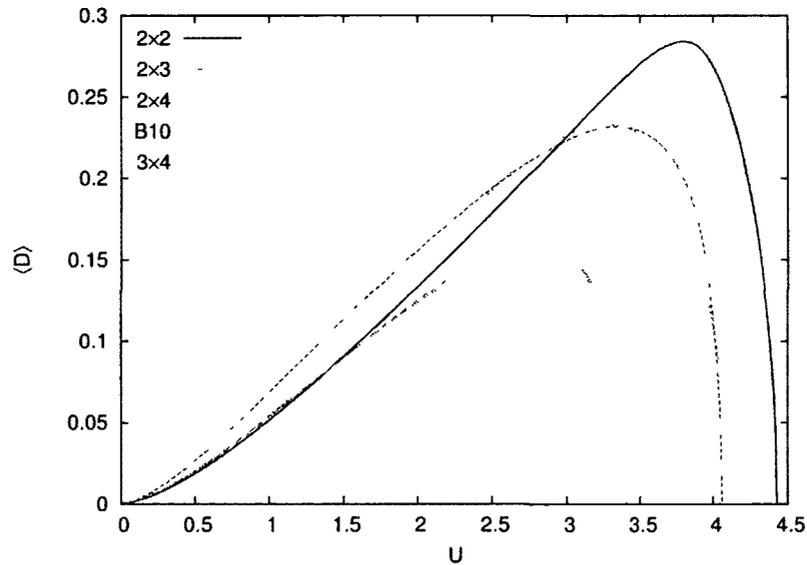


FIGURE 4.1 – Paramètre d'ordre supraconducteur D à température nulle en fonction du couplage U . $t = 1$, demi-rempli. Les amas sont tracés à la figure 2.2.

Bien que la VCA nous donne un ordre supraconducteur pour toutes les tailles d'amas, on peut se demander si la présence de cet ordre est un effet de la taille finie des amas. Ce qu'on observe, c'est que les courbes ne présentent pas une tendance claire vers une disparition de l'ordre supraconducteur en fonction de la taille de l'amas, même en utilisant des amas jusqu'à 12 sites. En fait, l'ordre supraconducteur à faible couplage dans le système demi-rempli a aussi été observé avec la CDMFT [49], du moins pour $U = 4$. Ceci nous permet de croire que nos résultats à faible couplage peuvent être crédibles quant à la supraconductivité. Du moins, la VCA n'est pas la seule approche à observer un ordre supraconducteur à faible couplage. Il a aussi été observé par une approche du groupe de renormalisation que le modèle de Hubbard a tendance à présenter une instabilité

supraconducteur de type d à faible couplage, lorsqu'il est placé à demi-remplissage [52].

Un ordre antiferromagnétique est aussi présent à faible couplage, tel que nous avons vu dans le chapitre précédent et tel qu'observé entre autres dans l'article de Nevidomskyy *et al.* [51]. Nous avons tracé le paramètre d'ordre antiferromagnétique à $T = 0$ en fonction de U à la figure 4.2.

La présence de ces deux ordres à faible couplage a été déterminée séparément. On peut aussi considérer les deux ordres sous forme de coexistence, c'est-à-dire en ajoutant simultanément les champs de Weiss antiferromagnétique et supraconducteur à l'amas et en trouvant les points stationnaires de la fonctionnelle $\Omega(M', D')$. En permettant les deux ordres, nous aurions alors soit qu'un des deux ordres est favorisé, ou sinon qu'ils coexistent. Si un des deux est favorisé, ce sera celui dont la valeur de la fonctionnelle de Potthoff au point stationnaire est la plus basse. Nous allons alors vérifier si le système adopte une coexistence ou si un des deux ordres est favorisé.

Pour savoir lequel des deux ordres est favorisé lorsque nous considérons seulement un ordre à la fois (supraconducteur ou antiferromagnétique), nous déterminons quelle est la solution ayant le grand potentiel le plus petit. Pour illustrer ceci, nous avons tracé à la figure 4.3 le grand potentiel thermodynamique en fonction de U pour un amas 2×2 . La ligne verticale représente l'endroit où la solution la plus petite change entre l'ordre supraconducteur à faible couplage et l'ordre antiferromagnétique à couplage plus grand.

Nous pouvons déterminer l'endroit où se produit le changement de phase pour différentes tailles d'amas (voir figure 2.2), considérant un seul paramètre d'ordre à la fois. Les valeurs trouvées sont données dans le tableau 4.1. Pour tous les amas, à très faible couplage, nous observons un ordre supraconducteur qui ne semble pas avoir une tendance à disparaître lorsque la taille de l'amas augmente. Dans ce même tableau, nous avons aussi ajouté la valeur du couplage à partir de laquelle l'ordre supraconducteur disparaît.

Ainsi, lorsque nous considérons un seul paramètre d'ordre à la fois, nous observons un ordre supraconducteur à très faible couplage qui semble persister en fonction de la taille de l'amas. Sa présence ne semble pas être un artefact de la méthode.

L'étude réalisée par Nevidomskyy *et al.* avait montré qu'à faible couplage, nous avons plutôt un état mixte, où la phase antiferromagnétique coexiste avec la phase supraconductrice. Nous avons refait ces calculs, en considérant la coexistence de phase, mais en considérant une plus grande variété d'amas. Les résultats se trouvent au graphique de la figure 4.4.

Deux courbes se comportent différemment des autres que nous avons observées jusqu'à

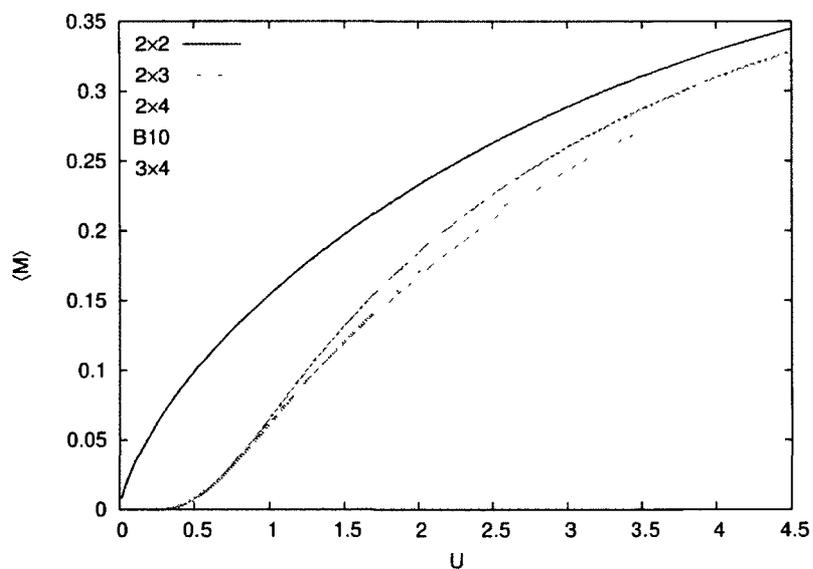


FIGURE 4.2 – Paramètre d’ordre antiferromagnétique M en fonction du couplage U . $t = 1$, demi-rempli.

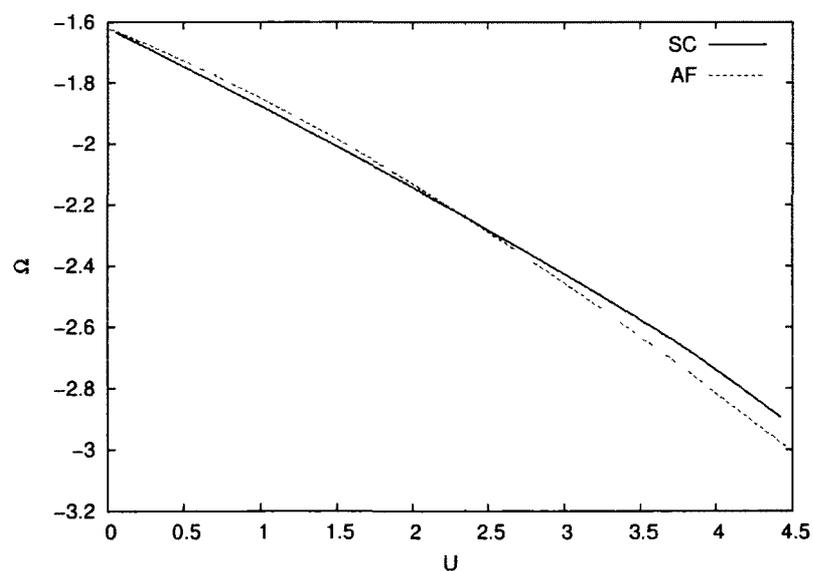


FIGURE 4.3 – Solution de la self-énergie de Potthoff en fonction du couplage U pour un amas 2×2 pour les solutions antiferromagnétique (AF) et supraconductrice (SC).

Amas	U_c	U_D
2×2	2.346	4.42
2×3	1.669	4.06
2×4	1.650	4.12
B10	1.321	3.41
3×4	1.466	3.30

TABLEAU 4.1 – Valeur du couplage critique U_c où se produit le changement de phase entre l'ordre supraconducteur (aux plus faibles couplages) et l'ordre antiferromagnétique, lorsque l'on considère un seul paramètre d'ordre à la fois. La deuxième colonne représente la valeur du couplage U_D à partir de laquelle l'ordre supraconducteur disparaît dans les calculs.

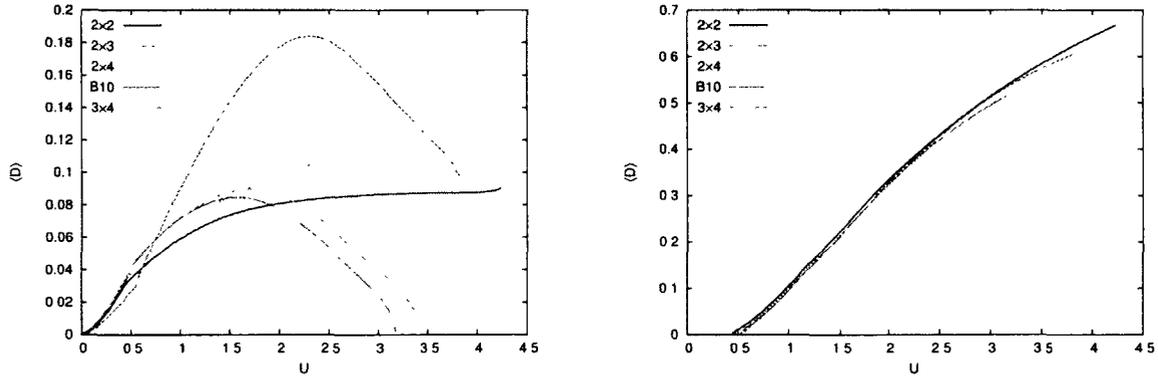


FIGURE 4.4 – Paramètre d'ordre supraconducteur D (à gauche) et paramètre d'ordre antiferromagnétique (à droite) en fonction du couplage U dans le cas où la coexistence de phase est considérée. $t = 1$, demi-remplissage

présent. En effet, les amas de 2×2 et 2×4 donnent une courbe du paramètre d'ordre supraconducteur qui ne retombe pas vers 0 lorsque U augmente. Nous avons plutôt un changement de phase du 1^{er} ordre. La raison pourquoi ces deux courbes se comportent de la sorte n'est pas claire. Pour vérifier si ceci est lié au fait qu'on peut décomposer l'amas en plaquettes de taille 2×2 , nous avons vérifié si l'amas 2×6 présentait le même comportement. Or, ce dernier amas ne présente pas ce type de comportement (données non-présentées ici). Donc le comportement similaire des amas 2×4 n'est pas simplement dû au fait qu'on peut décomposer l'amas en plaquettes de taille 2×2 .

À très faible couplage ($U < 0.5$), nous voyons qu'il y a très peu de variation entre les différentes courbes, ce qui semble indiquer que la solution a possiblement convergé.

Ce n'est pas surprenant que la solution puisse converger aussi vite à faible couplage. En effet, tel que vu dans le chapitre sur l'antiferromagnétisme (chapitre 3), notre approche présente des similarités avec une approche de type champ moyen, qui est valide à faible couplage. Notons ici qu'on ne peut appliquer la théorie du champ moyen tel que nous avons fait pour l'ordre antiferromagnétique, puisqu'il est impossible de faire apparaître le paramètre d'ordre supraconducteur de type d par une factorisation du hamiltonien.

En ce qui concerne l'ordre antiferromagnétique, nous voyons peu de variation entre les différentes courbes. Ainsi, on observe que l'ajout d'un paramètre d'ordre variationnel supplémentaire semble stabiliser les solutions, ce qui est attendu puisque qu'on augmente l'espace variationnel.

Ainsi, pour les différentes valeurs de U , nous devons regarder si le système a tendance à adopter un ordre antiferromagnétique, un ordre supraconducteur ou une coexistence de phase. Afin de savoir quel état est favorisé entre ces trois possibilités, nous avons comparé la valeur de la solution de la fonctionnelle de Pothhoff pour ces 3 cas. Nous obtenons ainsi que la coexistence dans notre cas est toujours favorisée. Un exemple de la comparaison entre ces trois solutions est donné à la figure 4.5.

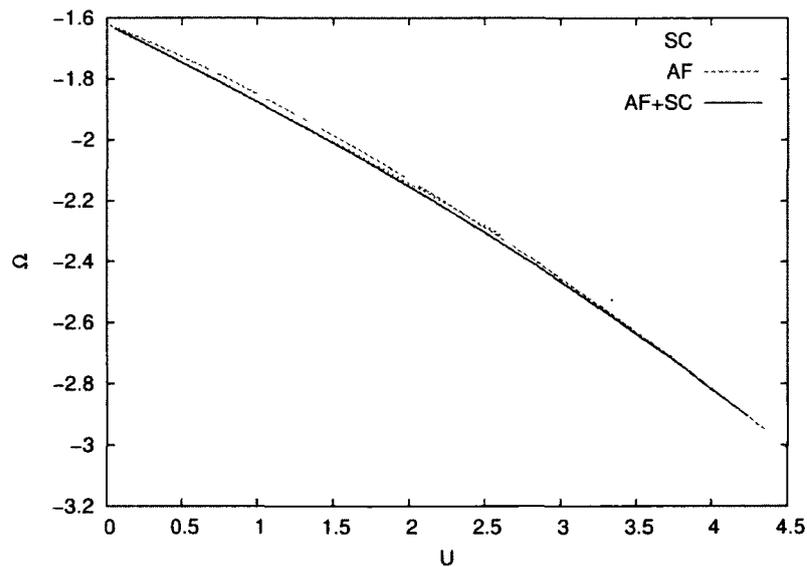


FIGURE 4.5 – Mêmes conditions que pour la figure 4.3, mais en ajoutant la coexistence de phase (AF+SC).

Nous voyons ainsi que la solution optimale est la coexistence de phase. Pour alléger les

calculs, nous allons tout de même considérer qu'un seul ordre à la fois. Selon ce que nous avons obtenu ci-haut, la solution optimale se rapproche de la situation où, aux endroits où il existe à fois une solution supraconductrice et une solution antiferromagnétique pure, on considère qu'il y a coexistence de phase. La stratégie qui consiste à comparer le grand potentiel pour la solution antiferromagnétique pure et la solution supraconductrice pure n'est pas une bonne façon de procéder. En effet, elle ne nous donne pas des résultats crédibles. Ainsi, pour étudier la supraconductivité, nous n'avons pas à comparer le grand potentiel obtenu avec celui de l'antiferromagnétisme pour savoir lequel de ces deux ordres est favorisé. En fait, nous aurions une meilleure précision dans nos calculs en considérant la coexistence, mais ceci requiert beaucoup plus de ressources. Nous allons nous limiter pour l'instant à l'étude d'un ordre supraconducteur pur.

4.2 Demi-remplissage à température finie

Nous allons maintenant étudier l'effet de la température sur l'ordre supraconducteur. Tel que nous avons fait pour l'ordre antiferromagnétique, nous avons déterminé la température critique pour l'ordre supraconducteur. Les résultats sont illustrés dans la figure 4.6 pour les amas 2×2 et 2×3 .

Dans ce graphique, nous observons que la température critique augmente très rapidement lorsque U diminue. En fait, la température critique devient rapidement infinie, ce qui ne semble pas avoir de sens physiquement. Le désordre amené par l'augmentation de la température devrait en théorie faire disparaître l'ordre supraconducteur. Pour voir comment se comporte le paramètre d'ordre supraconducteur en fonction de la température, nous avons tracé le graphique de la figure 4.7.

On observe que la température fait diminuer le paramètre d'ordre supraconducteur, ce qui est physiquement réaliste. Cependant, cet ordre ne disparaît pas, du moins pour les températures que nous avons étudiées, jusqu'à $T = 10$.¹ Nous remarquons aussi dans ce graphique un saut du paramètre d'ordre supraconducteur. Celui-ci est lié par la présence d'un deuxième minimum dans la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss supraconducteur, qui devient le minimum absolu lorsque la température augmente.

Ce deuxième minimum semble être davantage une anomalie qu'un phénomène physique réel. Il est causé par la contribution de certains états à plus grande énergie aux

1. Ceci équivaut à une température infinie. les poids de Boltzman étant pratiquement tous égaux numériquement

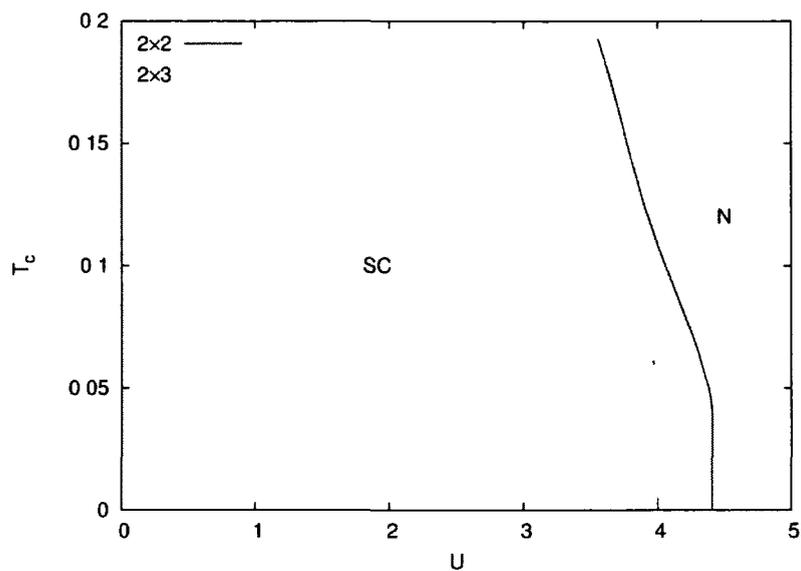


FIGURE 4.6 – Température critique de l'ordre supraconducteur à l'état normal en fonction de U , avec $t = 1$ et demi-remplissage

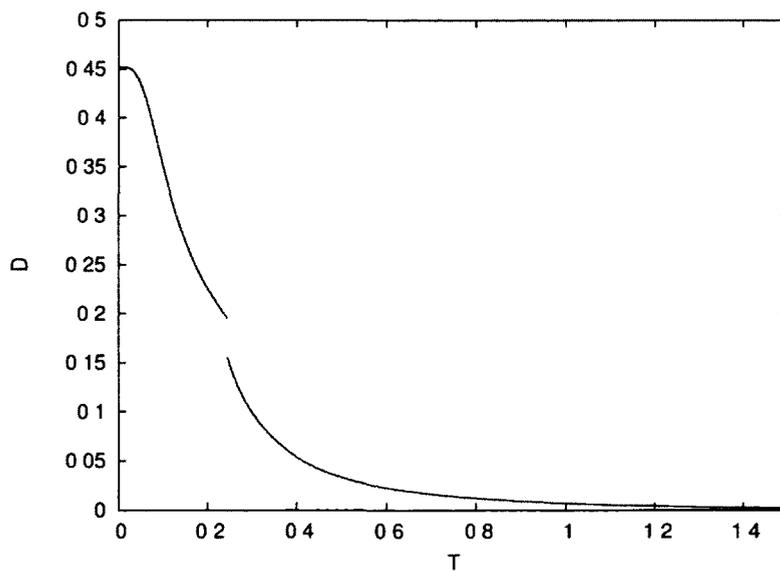


FIGURE 4.7 – Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction de la température, avec $U = 3$, $t = 1$, demi-remplissage.

calculs de la fonctionnelle de Potthoff (ou plus précisément de la fonction de Green de l'amas) . Ceux-ci se manifestent lorsque leur poids de Boltzmann devient suffisamment grand. Ils influencent aussi la courbe à plus basse température, qui semble vouloir se redresser près de la discontinuité. Ceci survient aussi à des couplages plus faibles.

Cette anomalie s'observe aussi à plus fort couplage. En effet, on peut passer de l'état normal à un état supraconducteur en augmentant la température. Pour l'amas 2×2 , nous avons tracé le graphique de la figure 4.8. qui montre la présence d'un ordre supraconducteur au-dessus de la phase normale.

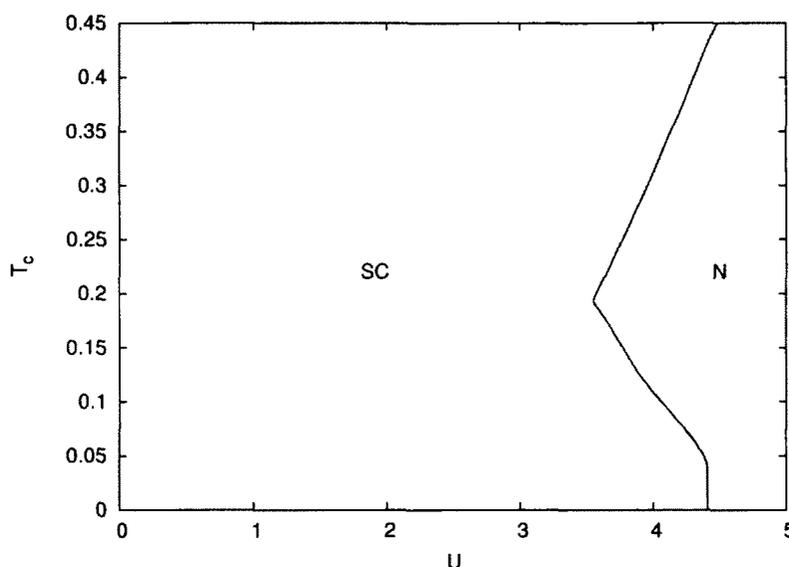


FIGURE 4.8 – Température critique de l'ordre supraconducteur à l'état normal en fonction de U , avec $t = 1$ et demi-remplissage pour l'amas 2×2

On voit que ce changement de phase à température plus élevée est évidemment une anomalie liée à la méthode. Ainsi, dans les prochains calculs, nous resterons à couplage assez élevé pour que cette anomalie n'interfère pas dans les calculs. Sinon, nous en ferons mention lorsqu'elle apparaîtra dans les calculs. Pour faire disparaître cette anomalie, deux approches pourraient possiblement fonctionner : utiliser un amas plus gros ou ajouter un paramètre variationnel supplémentaire. Ces deux possibilités ne seront cependant pas étudiées dans cette thèse, nous nous concentrerons sur les régions ne présentant pas ce type d'anomalie.

4.3 Supraconductivité pour les systèmes dopés

Contrairement à l'antiferromagnétisme qui existe seulement à demi-remplissage en l'absence de frustration dans les calculs de la VCA lorsque le potentiel chimique n'est pas utilisé comme paramètre variationnel, la supraconductivité existe à différents dopages. C'est ce que nous étudierons dans cette section, pour ensuite regarder l'effet d'une frustration du réseau dans la section suivante.

D'abord, tout comme dans le cas de l'antiferromagnétisme, la variation du potentiel chimique fait apparaître une discontinuité dans la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss supraconducteur, tel qu'observé sur la figure 4.9. Cette discontinuité apparaît d'abord à $D' = 0$ à une certaine valeur de μ pour ensuite se déplacer vers des valeurs plus grandes de D' lorsque le dopage est augmenté. Cette discontinuité est associée à un changement de secteur dans l'amas, le fondamental passant d'un secteur $S_z = 0$ aux secteurs à $S_z = \pm 1$.²

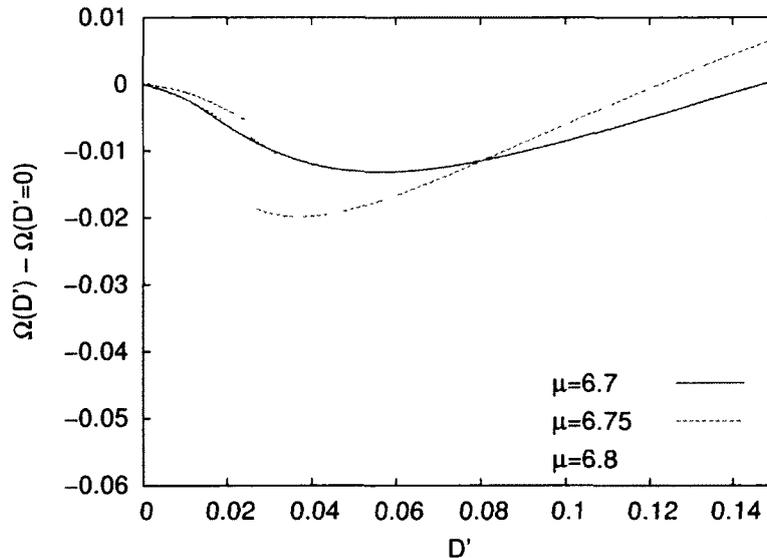


FIGURE 4.9 – Fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss supraconducteur D' . $U = 8$, $t = 1$, amas 2×3

Ces discontinuités représentent un obstacle à la détermination de la température critique. En effet, lorsque la température est augmentée, la fonctionnelle de Potthoff devient

2. Le fondamental sera dans ce dernier cas une combinaison des fondamentaux des secteurs de spin $S_z = +1$ et $S_z = -1$ de façon à garder le spin total de l'amas nul.

continue tel que nous avons vu dans le cas de l'antiferromagnétisme. Ainsi, la discontinuité peut alors devenir un minimum, ce qui rend les solutions à $T = 0$ et $T \rightarrow 0$ différentes. Afin d'éviter cette situation, nous allons arrêter les calculs dans les prochains graphiques à la valeur du potentiel chimique où commence à apparaître la discontinuité.

Le graphique de la figure 4.10 nous montre la température critique de la phase supraconductrice à la phase normale. Nous y voyons qu'en général la température critique diminue en fonction de U , tel que nous avons lorsque nous regardons seulement à demi-remplissage. Nous voyons aussi une croissance exponentielle de la courbe à $U = 2$ lorsque le dopage diminue, ce qui est en lien avec la situation que nous avons observée au demi-remplissage, où nous avons des régions où l'ordre supraconducteur persiste à toutes les températures.

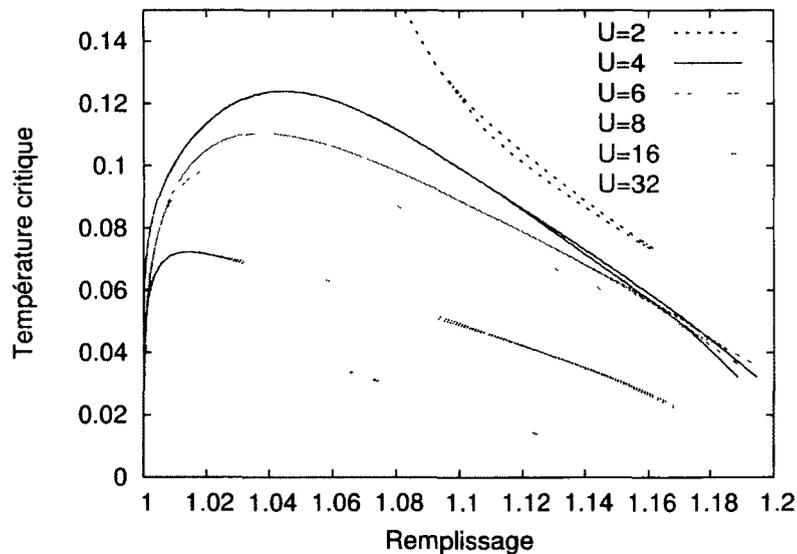


FIGURE 4.10 – Température critique pour le changement de phase supraconducteur en fonction du remplissage. $t = 1$, amas 2×3

Il est clair dans le graphique 4.10 que la courbe de la température critique pour l'ordre supraconducteur ne se comporte pas comme J à fort couplage. Le maximum de la température critique diminue plus lentement que J . Ceci n'est pas surprenant puisque nous ne sommes pas à demi-remplissage, ceci faisant en sorte que J ne définit pas une échelle d'énergie dans ce cas-ci.

La raison pour laquelle les courbes de la température critique sont parfois doubles

est la même qu'au chapitre précédent. Ceci survient lorsque nous avons affaire à une transition du premier ordre. En effet, à la valeur de température et de potentiel chimique où la transition a lieu, il existe deux solutions, soit la solution ordonnée et la solution normale. Bien que ces deux solutions soient au même potentiel chimique, la valeur du remplissage n'est pas nécessairement la même.

Nous pouvons comparer nos résultats avec ceux obtenus par Maier *et al.* [53] ainsi que Jarrell *et al.* [54]. Dans la première référence, ils ont obtenu le diagramme de phase supraconducteur (type d , tel qu'étudié ici), en fonction du remplissage avec saut au premier voisin à partir de la DCA, combiné avec une approche de type NCA³ pour la résolution de l'amas. Ils obtiennent une température critique maximale de 0.052 à un dopage de 19%, pour une valeur de $U = 12$. Bien que nous n'ayons pas de courbe à $U = 12$, on déduit selon le graphique 4.10 que la température maximale T_{max} dans le cas étudié ici serait autour d'un dopage de 2% – 2.5%, avec $T_{max} \approx 0.08$. Les ordres de grandeur en température sont relativement similaires dans les deux cas (avec la DCA et la VCA), bien que le dôme supraconducteur n'ait pas son maximum au même endroit.

Dans la deuxième référence, celle de Jarrell *et al.* [54], les calculs ont été réalisés aussi avec la DCA, pour un amas de 4 sites, à $U = 8$. On obtient dans ce cas un dôme supraconducteur beaucoup plus large, allant jusqu'à des dopages de plus de 25%, avec un maximum de la température critique d'environ 0.08 autour d'un dopage de 5%. Dans notre cas, à $U = 8$, nous avons un maximum de $T_{max} \approx 0.1$ autour d'un dopage de 2.5%. Ainsi, nos résultats ressemblent davantage à ceux obtenus par Jarrell *et al.*

Tel que nous avons vu dans la section sur l'antiferromagnétisme, il n'existe pas de brisure de symétrie à température finie en deux dimensions, en vertu du théorème de Mermin-Wagner. Dans le cas de l'antiferromagnétisme, nous avons vu que nos résultats pouvaient être associés à la température de *crossover*, où la longueur de corrélation se met à augmenter de façon exponentielle. Nous pouvons nous attendre à ce même type de situation avec la supraconductivité.

Ainsi, dans le cas de la supraconductivité, Maier *et al.* ont observé à partir de la DCA une transition de type Kosterlitz-Thouless (KT) dans le modèle de Hubbard répulsif[55]. En effet, ils ont observé que la susceptibilité de paire supraconductrice de type d P_d se comporte en $A \exp[2B/(T - T_c)^{\frac{1}{2}}]$, ce qui est caractéristique des transitions de type KT. Cette susceptibilité est définie par $P_d = \int_0^\beta d\tau \langle \Delta_d(\tau) \Delta_d^\dagger(0) \rangle$ avec

3. Non-Crossing Approximation

$\Delta^\dagger = \frac{\sqrt{N}}{2} \sum_{a,\delta} (-1)^\delta c_{a\uparrow}^\dagger c_{a+\delta\downarrow}^\dagger$ où N est le nombre de sites de l'amas, a l'indice de site. Ici δ réfère à la somme sur les plus proches voisins $(-1)^\delta = \pm 1$ selon si le lien est selon x ou y .

Nous pourrions être tentés de croire que la température critique que nous trouvons à partir de la VCA correspond à la température de KT trouvée par Maier *et al.* Cependant, un élément qui distingue ces deux résultats est la présence d'un paramètre d'ordre à longue portée dans le cas de la VCA, qui n'est pas présent dans les changements de phase de type KT. Ainsi, en vertu du théorème de Mermin-Wagner, on s'attend à ce que la température critique déterminée par la VCA tende vers 0 quand la taille de l'amas augmente. Dans le cas des changements de phase de type KT, la température critique trouvée à température finie peut exister en deux dimensions car étant donné la nature de ce type de changement de phase, le théorème de Mermin-Wagner ne l'interdit pas.

De notre côté, nous n'avons pas directement accès à la susceptibilité mais même si on pouvait la calculer, elle ne donnerait pas de divergence du côté de la phase normale tel qu'observé par la Maier *et al.* En effet, la phase normale serait déterminée dans notre cas par un calcul à partir de la CPT, qui ne permet pas de changement de phase même de type KT. Nous pourrions possiblement voir tout de même, si nous utilisons un amas suffisamment grand, une augmentation de la susceptibilité près de la température critique. Ce serait soit un maximum ou une saturation.

4.4 Supraconductivité pour les systèmes frustrés

Une fois de plus, afin de pouvoir comparer nos résultats avec les cuprates, nous allons fixer les paramètres à $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$. Le diagramme de phase dans ce cas est donné au graphique de la figure 4.11.

La caractéristique la plus frappante dans ce graphique est le comportement très différent des deux côtés du demi-remplissage. Du côté du dopage aux trous, nous avons une température critique qui semble influencée par U (ou J) dans le régime fort couplage. En effet, la température critique diminue lorsque U augmente, jusqu'à disparaître à un couplage de $U = 32$. En effet, pour cette valeur de U , nous n'obtenons aucun ordre supraconducteur, même à $T = 0$.

Du côté dopé aux électrons, nous observons plutôt que le dôme supraconducteur se comporte comme t lorsque le couplage augmente. En effet, il semble que lorsque le couplage augmente, la forme du dôme ne semble plus dépendre de ce couplage.

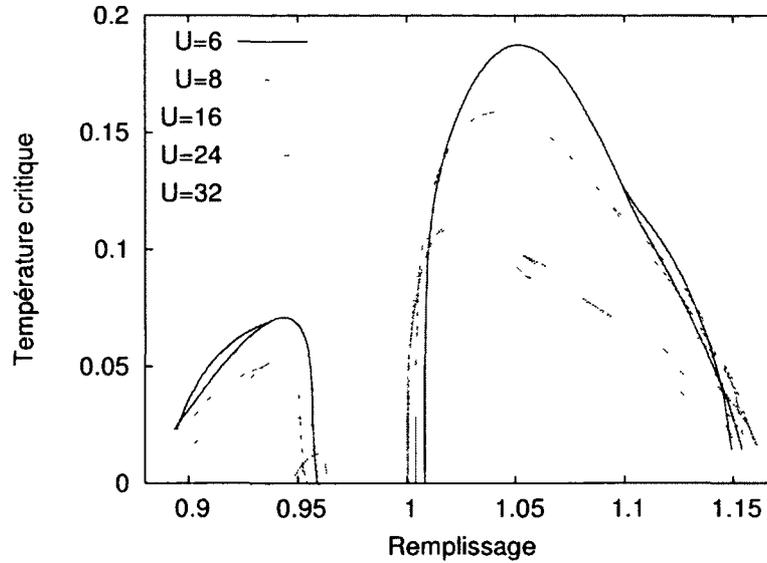


FIGURE 4.11 – Température critique en fonction du remplissage pour différentes valeurs de U . $t = 1$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$, amas 2×3

Cette asymétrie dans la forme des dômes supraconducteurs en fonction de U est aussi observée du côté du paramètre d'ordre à température nulle avec la VCA [56]. Dans cette étude, la coexistence de phase a été considérée. En considérant différentes valeurs de U (6, 8 et 12) et en utilisant un amas 2×4 , le paramètre d'ordre supraconducteur varie très peu du côté dopé aux électrons, alors que du côté dopé aux trous il varie significativement. De notre côté, nous devons être à couplage beaucoup plus élevé pour que la solution du côté dopé aux électrons cesse de varier significativement en fonction de U .

4.5 Comparaison avec les supraconducteurs à haute température critique

Dans cette section, nous analyserons plus en détail comment le modèle de Hubbard se comporte lorsque le potentiel U est de l'ordre de la largeur de bande ($W = 8t$). Ceci nous permettra de faire certaines comparaisons avec les supraconducteurs à haute température critique. Ainsi, à la figure 4.12 nous avons combiné les résultats des figures 3.20 et 4.11 pour $U = 8$.

Ce diagramme de phase présente quelques similarités avec celui des supraconducteurs

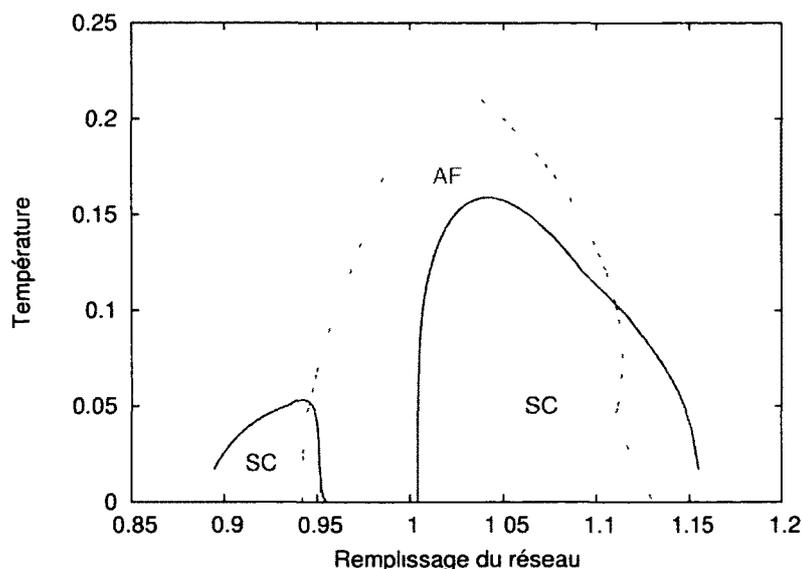


FIGURE 4.12 – Diagramme de phase du modèle de Hubbard bidimensionnel calculé avec la VCA. Les phases antiferromagnétiques (AF) et supraconductrices (SC) sont présentées. Amas 2×3 , $U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.3$, $t'' = -0.2$.

à haute température critique, qui a été présenté à la figure 1.4. D'abord, nous voyons la même asymétrie de la phase antiferromagnétique. En fait, du côté dopé aux trous, notre phase antiferromagnétique s'étend un peu plus loin que le diagramme générique des cuprates. Cependant, la différence n'est pas très importante.

En ce qui concerne la phase supraconductrice, la différence est davantage marquée. Nous constatons tout de même la présence de deux dômes supraconducteurs de chaque côté du demi-remplissage. Notre dôme du côté dopé aux trous est beaucoup plus étroit en remplissage que pour les systèmes réels. En fait, dans nous avons arrêté nos calculs lorsque le changement de secteur du fondamental à température nulle faisait en sorte de rendre difficile la détermination de la solution. En effet, à température nulle, une discontinuité apparaît dans la fonctionnelle de Potthoff lorsque le potentiel chimique est varié et cette discontinuité fait disparaître le minimum lorsque la température est augmentée. Une approche utilisée à température nulle pour contourner ce problème est de fixer le secteur tout simplement, ce qui fait en sorte qu'il n'y a pas de discontinuité qui apparaît. Cependant, ceci ne permet pas une continuité avec le cas à température finie.

Une autre différence concernant la phase supraconductrice est au niveau de la tempé-

rature critique maximale des deux dômes, de chaque côté du demi-remplissage. Du côté dopé aux électrons, le dôme supraconducteur est beaucoup plus élevé en température que du côté dopé aux trous. Les états excités de l'amas appartenant à un autre secteur que le fondamental semblent faire rapidement disparaître l'ordre supraconducteur du côté dopé aux trous.

Du côté dopé aux électrons, la région où il y a seulement la phase supraconductrice correspond approximativement à la région supraconductrice du diagramme de phase des cuprates. Ceci peut nous laisser croire que la phase antiferromagnétique dans les systèmes réels auraient tendance à faire disparaître la phase supraconductrice. En fait, il n'est pas clair encore si dans les systèmes réels il existe ou non une coexistence de phase qui persiste.

L'écart des résultats entre les figures 4.12 et 4.12 s'explique de différentes façons. D'abord, nous avons utilisé seulement un amas de 6 sites. Un amas de plus grand taille pourrait nous permettre de voir des résultats un peu différents. Ensuite, nous n'avons utilisé à chaque fois qu'un seul paramètre variationnel, sans tenir compte de la solution de coexistence. Pour voir à quoi pourrait ressembler le comportement de nos résultats si nous augmentions la taille de l'amas tout en permettant la coexistence de phase, nous pouvons examiner ce qui se passe à température nulle.

Sénéchal *et al.* [56] ont calculé le paramètre d'ordre supraconducteur et antiferromagnétique du modèle de Hubbard à partir de la VCA dans les mêmes conditions que nous avons étudiées ici, en considérant la coexistence de phase. Nous observons d'abord le même comportement pour l'antiferromagnétisme, avec la même asymétrie pour les différentes tailles d'amas (6, 8 et 10 sites). Pour l'ordre supraconducteur, le dôme du côté dopé aux trous semble vouloir s'étendre sur une plus large plage de remplissage. Ceci est dû entre autres au fait que dans ces calculs à température nulle, le changement de secteur du fondamental n'a pas été considéré.

Un autre élément qui fait en sorte que nos résultats présentent des différences avec le diagramme de phase générique des cuprates est le fait que le modèle de Hubbard étudié ici est un modèle très simplifié de la réalité. D'abord, nous considérons qu'une seule bande alors qu'un modèle à plusieurs bandes pourraient être plus réalistes. Ensuite, nous négligeons de nombreux éléments tel que les phonons, les imperfections du système, etc. Le modèle à une bande reste tout de même un bon point de départ pour tenter de comprendre l'origine de la supraconductivité dans les cuprates.

De plus, selon les mesures de spectroscopie de photoémission résolue en angle (ARPES⁴),

4. angle-resolved photoemission spectroscopy

il semble que le terme potentiel U devrait être davantage autour de $U = 6$, en étant un peu plus petit du côté dopé aux électrons que du côté dopé aux trous [57, 58]. En utilisant des valeurs plus réalistes de U , nous n'obtiendrions tout de même pas une importante différence dans les diagrammes de phase, considérant les données obtenus en fonction de U aux figures 3.20 et 4.11. Quant aux paramètres de saut, ils devraient changer d'un composé à l'autre et ainsi, être différents de chaque côté du demi-remplissage. Ces paramètres de saut ne devraient pas varier de façon drastique, ce qui fait en sorte que nous résultats peuvent être crédibles pour une première analyse.

4.6 Limites de l'application de la VCA a la supraconductivité

Tout comme pour l'antiferromagnétisme, la présence des discontinuités pose problème. Elle rend la détermination du paramètre d'ordre difficile près de $T = 0$. Du moins, la façon de traiter ces discontinuités à $T = 0$ n'est pas claire. Dans les calculs à température nulle qui ont été réalisés jusqu'à présent, on considérait seulement le secteur $S_z = 0$ du hamiltonien. Ceci n'est plus possible à température finie.

Une autre problématique, encore plus importante cette fois-ci, est l'absence de transition de phase dans certains cas, tel qu'à demi-remplissage et à faible couplage. En effet, certains états excités semblent contribuer à former un deuxième minimum qui ne disparaît pas en fonction de la température. Ce résultat n'est pas réaliste physiquement. En effet, lorsque la température augmente, l'ordre devrait finir par disparaître. Cependant, ce problème disparaît lorsque le couplage devient suffisamment élevé.

Il n'est pas clair si l'augmentation de la taille de l'amas peut résoudre ce problème. Le changement d'un amas de 2×2 à 2×3 ne semblait pas affecter tellement la situation. Il est possible que l'ajout de paramètres variationnels supplémentaires tel l'antiferromagnétisme puisse faire en sorte de faire disparaître le problème.

4.7 Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons réalisé différents calculs sur la supraconductivité à partir de la VCA. Nous nous sommes d'abord attardés à la supraconductivité à température nulle et à demi-remplissage. Nous avons vu qu'à faible couplage, la supraconductivité

persistait peu importe l'amas utilisé et ce même lorsque la coexistence de phase était considérée. Nous avons aussi vu que dans le cas demi-remplis, la solution de coexistence était favorisée et était comparable à la superposition des solutions antiferromagnétique et supraconductrice pures.

À température finie et à demi-remplissage, la température critique devient infinie à faible couplage pour des amas 2×2 et 2×3 , ce qui est assurément un problème provenant de la VCA. Lorsque le potentiel chimique est varié, nous voyons apparaître des températures critiques qui ne divergent pas nécessairement. Le dôme supraconducteur diminue en amplitude avec U lorsque nous nous plaçons dans le cas simple avec saut aux premiers voisins seulement.

En ajoutant les sauts aux deuxièmes et troisièmes plus proches voisins, nous remarquons un comportement différent du côté dopé aux trous et aux électrons. Du côté dopé aux trous, le dôme supraconducteur diminue avec U alors qu'il semble se stabiliser du côté dopé aux électrons.

Enfin, nous avons pu comparer nos résultats avec le diagramme de phase générique des cuprates. Nous avons vu que la région antiferromagnétique présente le même type d'asymétrie. Du côté de la supraconductivité, les ressemblances sont moins importantes. Nous voyons tout de même une asymétrie importante des dômes supraconducteurs.

Encore une fois, nous avons utilisé dans ce chapitre des amas de dimension 2×2 et 2×3 pour les calculs à température finie, ce qui est petit. Nous allons voir au prochain chapitre comment traiter un amas de plus grande taille, soit de 8 à 12 sites.

Chapitre 5

Application aux systèmes plus grands

Dans les chapitres précédents, nous avons réalisé les calculs sur de petits amas (4 et 6 sites) afin de pouvoir diagonaliser complètement les hamiltoniens. Ceci permettait d'obtenir la fonction de Green des amas avec une très grande précision numérique. Cependant, afin d'approfondir notre compréhension du modèle de Hubbard et diminuer les effets de taille finie, nous devons utiliser des amas plus grands.

Nous allons appliquer ici deux méthodes différentes utilisant l'algorithme de Lanczos pour nous permettre de réaliser les calculs thermodynamiques. D'abord, nous appliquerons la RVLM¹ (notre version de la LTLM²), où nous utiliserons des vecteurs aléatoires pour calculer la moyenne thermodynamique (section 2.3.3). Nous passerons ensuite à une méthode où les vecteurs de Lanczos servent de vecteurs de base du système (LVM³) dans la moyenne thermodynamique (section 2.3.6). Dans les deux cas, nous allons nous concentrer sur les paramètres à utiliser afin de réaliser ces calculs tout en ayant convergence des résultats. Nous présenterons entre autres des calculs de chaleur spécifique et finalement un graphique de la température de Néel en fonction de U pour un amas de 8 sites.

-
1. Random Vectors Lanczos Method.
 2. Low Temperature Lanczos Method.
 3. Lanczos Vectors Method.

5.1 RVLM : détermination des paramètres

La RVLM nécessite de fixer certains paramètres, tout comme la FTLM⁴ et la LTLM. Nous verrons dans cette section comment fixer ceux-ci afin d'optimiser les résultats tout en minimisant les ressources requises. Nous nous concentrerons d'abord sur les calculs d'énergie et de chaleur spécifique à l'aide de la CPT. Nous allons aussi nous placer à demi-remplissage, avec $t = 1$, et travailler dans l'ensemble canonique pour l'instant. Nous utiliserons aussi, pour commencer, des vecteurs dont la direction est générée de façon aléatoire pour calculer la moyenne thermodynamique.

Les principaux paramètres à fixer sont le nombre d'itérations M dans les différentes procédures de Lanczos et le nombre d'états conservés R dans la moyenne thermodynamique. Nous allons commencer par fixer M car ce nombre ne devrait pas dépendre (ou très peu) des états aléatoires choisis. Une fois que nous aurons déterminé M , nous pourrions voir ensuite comment convergent les calculs en fonction du nombre de vecteurs aléatoires conservés pour la moyenne thermodynamique.

Le nombre d'itérations M à garder dans l'algorithme de Lanczos afin que les résultats aient convergé peut dépendre de différents facteurs. Parmi ces facteurs, il y a entre autres la taille de l'amas, les paramètres du système étudié (dont U et t) et la température. Nous avons tracé à la figure 5.1 le comportement de $\Delta E = |E(M) - E(M = 250)|$ en fonction de M , où $E(M)$ est l'énergie du système calculée par la CPT (voir équation (2.138)).

Sur ces graphiques, les courbes s'arrêtent lorsqu'il n'y a plus de différence entre l'énergie trouvée et celle à $E(M = 250)$, dans les limites de la précision des calculs. Nous voyons que l'énergie converge très rapidement en fonction de M et ce à toutes les valeurs de température. Dans tous les cas, les solutions ont convergé vers la solution à $M = 250$ lorsque le nombre d'itération dépassait $M = 100$. Il n'est cependant pas nécessaire de dépasser les 100 itérations en pratique puisque nous n'avons pas besoin en général d'une précision aussi grande.

Afin d'évaluer le nombre d'itérations nécessaires dans l'algorithme de Lanczos dans un calcul concret, nous allons étudier la chaleur spécifique calculée à partir d'un seul état aléatoire. En théorie, le nombre d'itérations M nécessaires pour faire converger les résultats ne devrait pas dépendre des états aléatoires utilisés. Ainsi, nous utiliserons $R = 1$ pour l'instant. La chaleur spécifique est calculée à partir de l'énergie du système, en calculant la dérivée en utilisant la méthode des différences finies au deuxième ordre.

4. Finite Temperature Lanczos Method

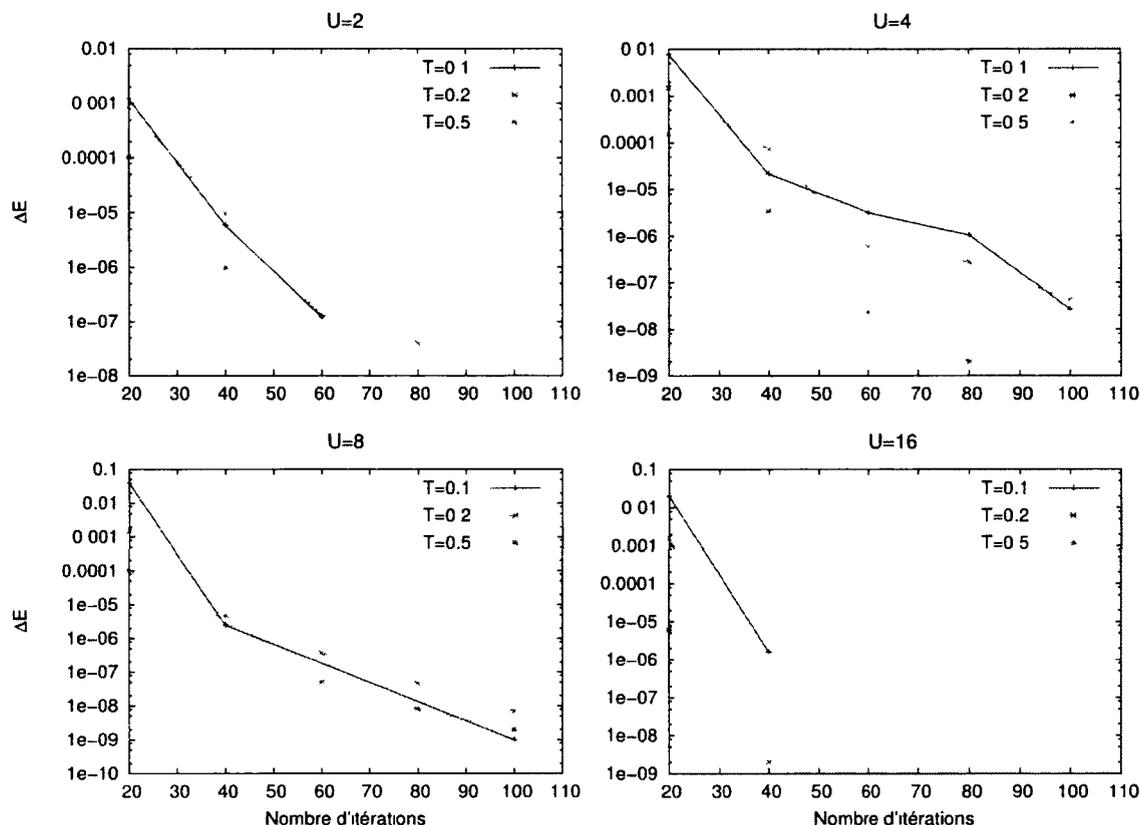


FIGURE 5.1 – Énergie en fonction du nombre d'itérations M dans les procédures de Lanczos, relativement à la solution à $M = 250$, $\Delta E = |E(M) - E(M = 250)|$, déterminée à partir d'un seul vecteur aléatoire, pour différentes valeurs de U et de température. Amas 2×4 , $t = 1$, ensemble canonique.

Ainsi, nous calculons

$$C(T) = [E(T + \Delta T/2) - E(T - \Delta T/2)]/\Delta T. \quad (5.1)$$

Une première série de graphiques du calcul de la chaleur spécifique est présentée à la figure 5.2. À faible U ou à température $T \gtrsim 0.3$, peu d'états sont nécessaires pour faire converger les calculs de chaleur spécifique : à $M=20$, la courbe ne change plus. Dans tous les cas, 40 itérations suffisent pour avoir une solution qui a convergé, ou du moins, les fluctuations deviennent plus petites que la largeur de la courbe.

Nous remarquons à la figure 5.2 que la chaleur spécifique devient parfois négative. Puisque la CPT n'est pas une transformation linéaire, il n'est pas totalement impossible

que la chaleur spécifique soit parfois négative. En fait, comme nous le verrons plus loin, lorsque la taille de l'amas augmente, la chaleur spécifique devient toujours positive lorsque la solution a convergé. Cette valeur négative est ainsi un effet de taille finie de la CPT.

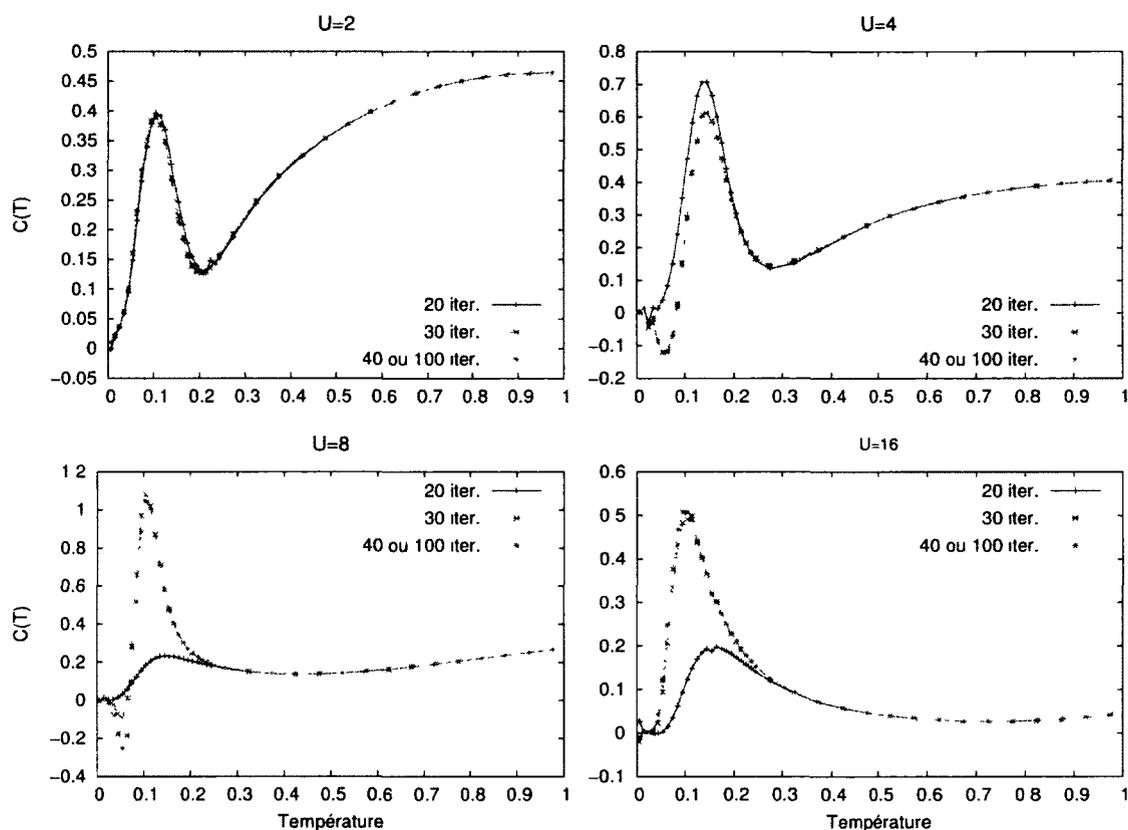


FIGURE 5.2 – Chaleur spécifique $C(T)$ en fonction de la température pour différents nombres d'itérations de Lanczos, déterminée à partir d'un seul vecteur aléatoire, pour différentes valeurs de U .

Un élément qui distingue les différents hamiltoniens, et qui peut expliquer le comportement différent dans la convergence, est la valeur du gap entre le fondamental et le premier état excité, ainsi que la densité du spectre d'énergie. Ainsi, une étude plus poussée pourrait permettre de considérer ces éléments afin de fixer automatiquement la valeur de M . Cependant, ceci ne sera pas à l'étude ici. Nous allons simplement fixer $M = 40$.

Il reste maintenant à fixer le nombre d'états aléatoires R pour obtenir une solution qui converge. À la figure 5.3, nous avons tracé l'énergie en fonction du nombre de vecteurs aléatoires conservés, pour différentes valeurs de couplage U et de température T . Enfin, afin de pouvoir comparer la convergence à différentes températures, nous avons plutôt

tracé l'énergie relativement à sa valeur à $R = 250$.

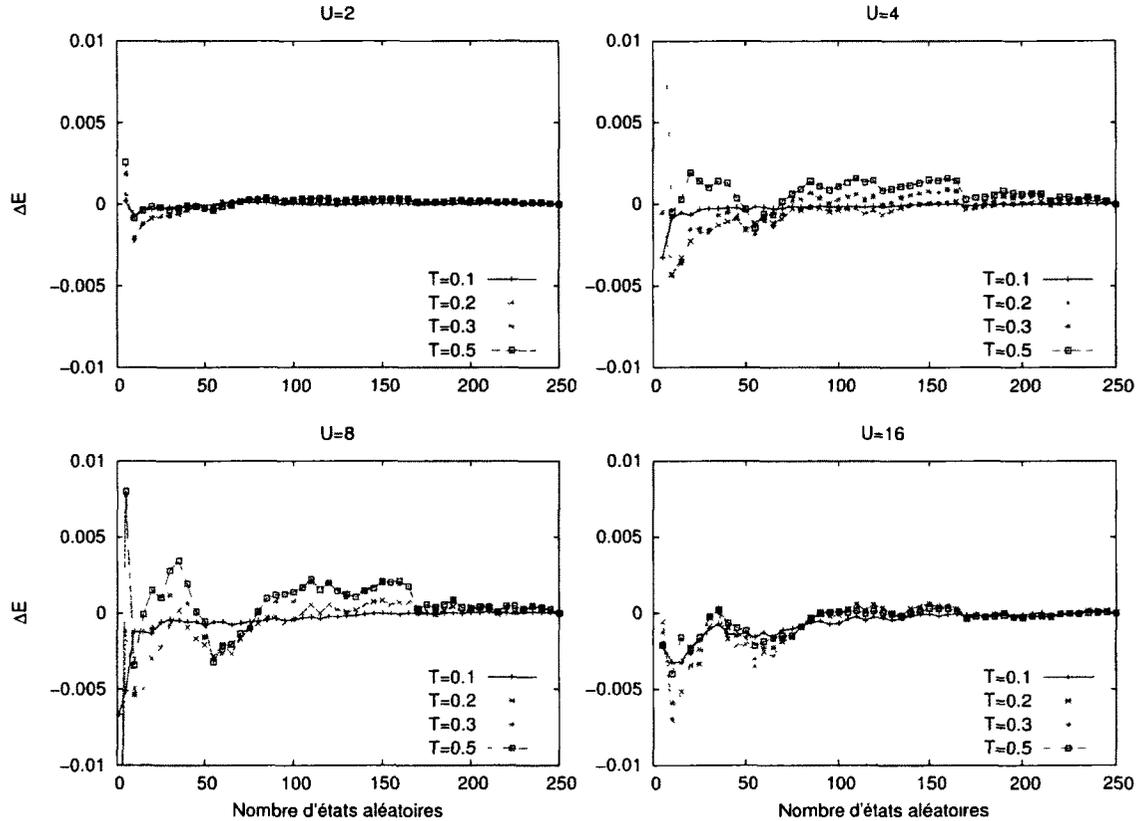


FIGURE 5.3 – Énergie en fonction du nombre de vecteurs aléatoires R , relativement à la solution à $R = 250$, $\Delta E = |E(R) - E(R = 250)|$, en utilisant $M = 40$, pour différentes valeurs de U et de température.

La convergence n'est pas aussi rapide qu'en fonction du nombre d'itérations dans les procédures de Lanczos. Nous y voyons des fluctuations statistiques, surtout à $U = 8$. Les résultats semblent tout de même converger dans tous les cas : les fluctuations diminuent en fonction de R . Cependant, il est difficile de voir si les résultats convergent vers la solution réelle ou simplement vers un nombre constant. Pour avoir convergence, nous devons aussi nous assurer que la solution ne dépend pas des vecteurs aléatoires utilisés. Pour montrer comment se comporte la convergence avec différentes séries de vecteurs aléatoires, nous avons tracé le graphique de la figure 5.4. Celui-ci présente l'énergie en fonction du nombre de vecteurs aléatoires R pour différentes séries de vecteurs aléatoires, à $T = 0.3$ et $U = 8$. Ces paramètres ont été choisis à partir du graphique 5.3, en s'assurant de prendre des conditions où les fluctuations statistiques sont relativement importantes.

Nous voyons que pour les différentes séries de vecteurs aléatoires, nous avons une solution qui converge lorsque R augmente. La courbe en gris correspond au résultat obtenu par la LVM, qui sera étudiée au chapitre 5.1.4.

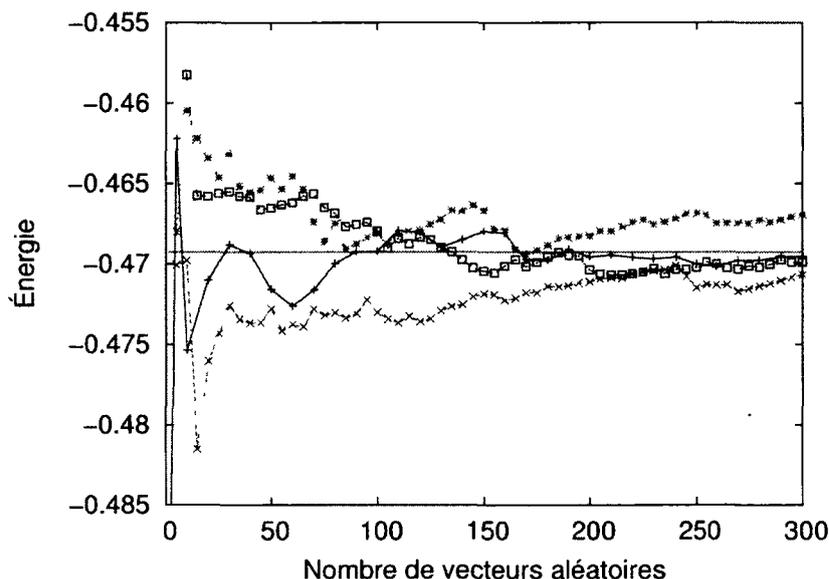


FIGURE 5.4 – Énergie en fonction du nombre de vecteurs aléatoires R pour quatre séries de vecteurs aléatoires, en utilisant $M = 40$, avec $U = 8$ et $T = 0.3$. La ligne horizontale grise correspond à la valeur obtenue par la LVM (section 5.1.4).

Une des quatre courbes présentées (la verte) semble ne pas converger aussi bien que les autres courbes. Il est possible qu'un très petit nombre de vecteurs aléatoires viennent causer des problèmes dans la convergence des résultats. Cependant, la différence n'est tout de même pas très grande. Lorsque R devient encore plus grand, la solution ne devrait plus dépendre de M ou R , ni du choix des vecteurs aléatoires. Les valeurs R et M choisies dépendront bien sûr de la précision nécessaire dans les calculs ainsi que des quantités mesurées.

Pour s'assurer que la solution converge bien, nous pouvons faire des vérifications supplémentaires. En effet, nous pouvons calculer par exemple le paramètre d'ordre antiferromagnétique dans le réseau. Celui-ci devrait être nul si la fonction de Green de l'amas était calculée exactement puisqu'aucun champ de Weiss est appliqué. Rien n'empêche que le paramètre d'ordre antiferromagnétique soit non-nul lorsque des vecteurs aléatoires sont utilisés. Nous voyons à la figure 5.5 le paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction

du nombre de vecteurs aléatoires. Nous voyons que très rapidement celui-ci disparaît en fonction de R pour 3 des courbes. En ce qui concerne la dernière courbe, il semble y avoir un problème à converger vers 0. Il est intéressant de noter que ce calcul (en vert) présente aussi une différence au niveau de la convergence de l'énergie dans le graphique 5.4. Ainsi, on peut vérifier que les calculs convergent correctement en regardant par exemple la convergence de l'ordre antiferromagnétique.

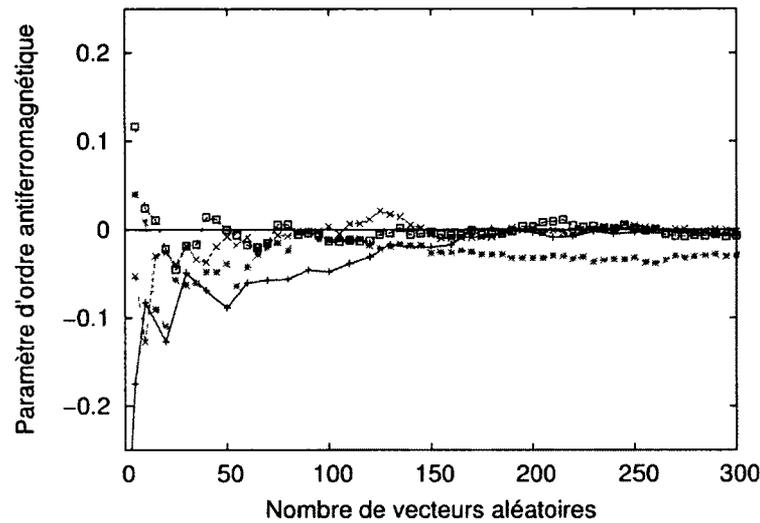


FIGURE 5.5 – Paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction du nombre de vecteurs aléatoires R pour différentes séries de vecteurs aléatoires en utilisant $M = 40$, avec $U = 8$ et $T = 0.3$. Chaque courbe correspond à celle ayant la même couleur dans le graphique 5.4.

Malgré la présence de fluctuations statistiques, la nature de la méthode permet d'obtenir des courbes continues en fonction de la température, dans les limites de la précision numérique. Ainsi, il est facile d'évaluer la dérivée des différentes quantités calculées. Nous calculerons ainsi la chaleur spécifique à partir de la dérivée numérique de l'énergie au deuxième ordre (équation 5.1). Nous illustrons dans un premier temps à la figure 5.6 des calculs de chaleur spécifique pour différents nombres de vecteurs aléatoires R .

À l'exception de la courbe à $R = 5$, les différentes courbes sont très rapprochées. Il semble que nous pouvons obtenir une solution ayant convergé suffisamment pour avoir un bon aperçu de la forme de la chaleur spécifique à partir d'aussi peu que $R = 50$. Pour s'assurer que ce n'est pas un hasard lié au choix des vecteurs aléatoires, nous avons

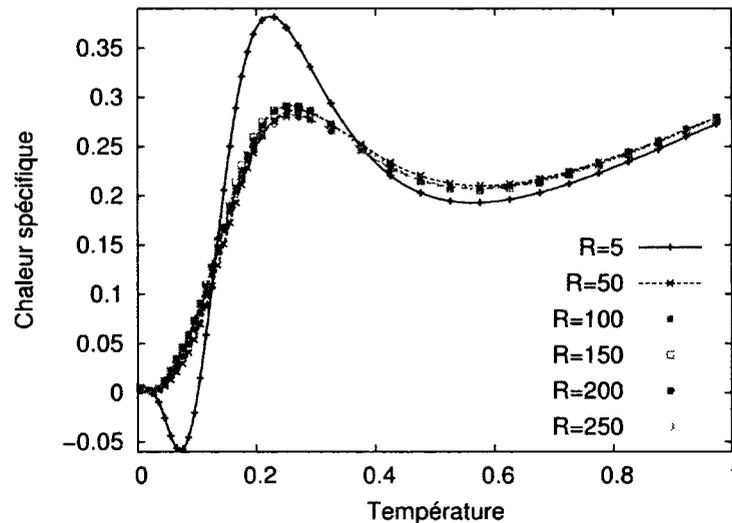


FIGURE 5.6 – Chaleur spécifique pour différents nombres de vecteurs aléatoires R à $U = 8$, $t = 1$ et demi-remplissage. $M = 40$.

tracé la figure 5.7 où nous présentons les courbes de chaleur spécifique avec différents échantillonnages de vecteurs aléatoires. Chacun des six graphiques de la figure est associé à un nombre de vecteurs aléatoires R différent. Pour une même couleur de courbe, nous avons simplement augmenté le nombre de vecteurs aléatoires d'un graphique à l'autre. Par exemple, la courbe rouge du graphique à $R = 100$ comprend les mêmes vecteurs aléatoires que la courbe à $R = 50$ en plus de 50 autres vecteurs aléatoires.

Les graphiques de la figure 5.7 nous apportent deux éléments importants justifiant la méthode utilisée. D'abord, l'augmentation du nombre de vecteurs aléatoires semble permettre à la chaleur spécifique de converger, tel qu'attendu. De plus, plus le nombre de vecteurs aléatoires augmente, moins la solution dépend de la sélection des vecteurs aléatoires. En effet, les fluctuations statistiques diminuent en fonction de R .

Notons que les fluctuations de la solution trouvée sont plus importantes aux températures variant entre $T \approx 0.1$ et $T \approx 0.3$. Plus la température augmente, moins nous avons besoin d'états aléatoires pour avoir une solution qui converge. Nous l'observons assez bien dans les calculs de la dernière figure : à $T = 1$, la solution fluctue à peine, même à $R = 5$. Ceci permet de diminuer le nombre de vecteurs aléatoires lorsque la température augmente.

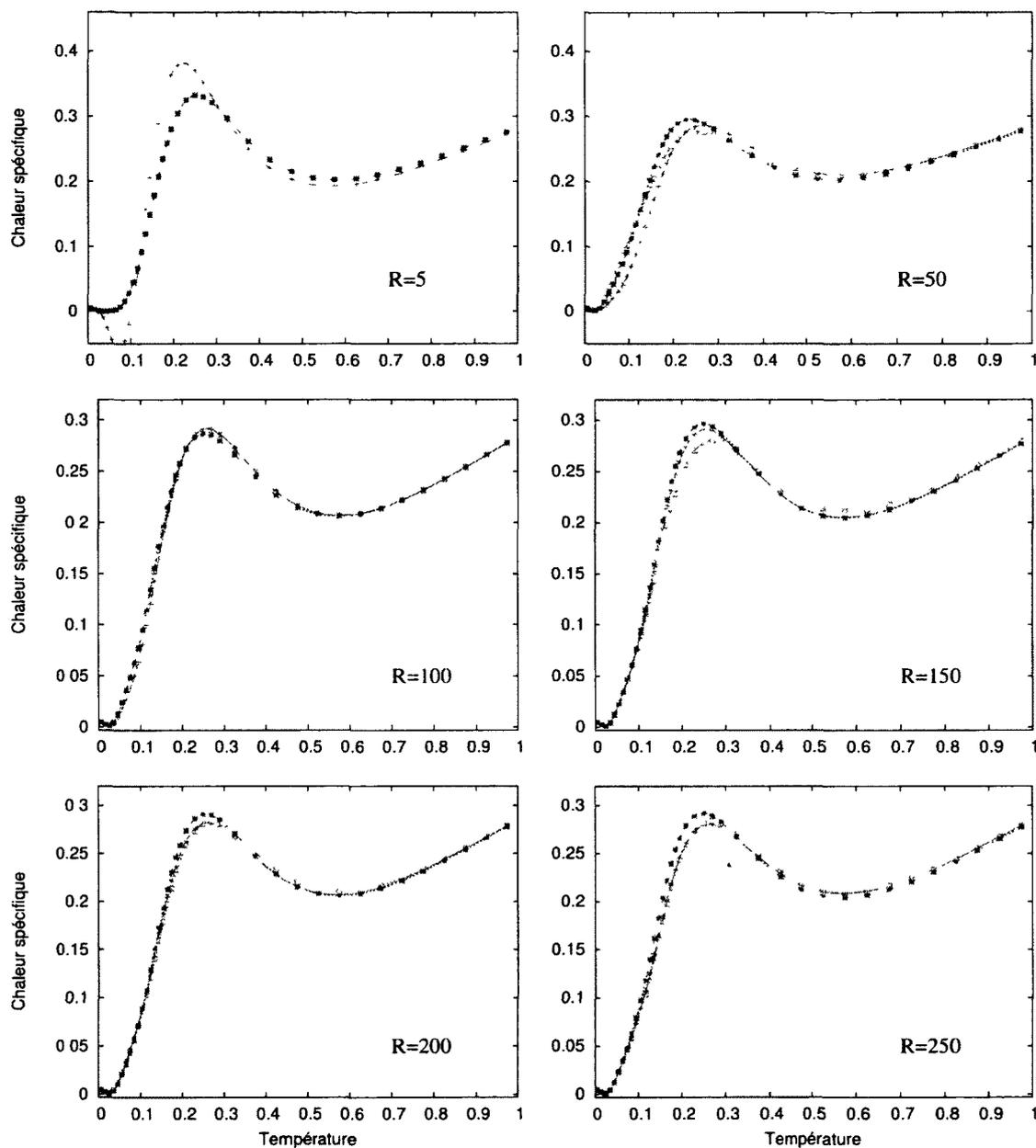


FIGURE 5.7 – Chaleur spécifique pour différents ensembles de vecteurs aléatoires. Chaque courbe correspond à une série différente de vecteurs aléatoires. $U = 8$, $t = 1$ et demi-remplissage. $M = 40$

5.1.1 Sélection des états de base

Nous avons discuté à la section 2.3.3 (page 31) qu'il existe différentes façons de générer les vecteurs aléatoires. D'abord, on peut générer les vecteurs de sorte à ce que leur direction soit entièrement aléatoire. Sinon, on peut les générer de sorte que leurs composantes soient -1 ou $+1$. En théorie, cette dernière approche devrait être plus efficace.

Afin de vérifier s'il existe une différence entre les deux façons de générer les vecteurs aléatoires, nous avons tracé la figure 5.8. Ce graphique a été généré en calculant plusieurs fois l'énergie pour un cas bien précis ($U = 8$ et $T = 0.2$), tout en utilisant à chaque fois un ensemble différent de vecteurs aléatoires. Nous calculons ensuite le produit de convolution entre les solutions (sous forme de delta de Dirac) et une gaussienne $\exp[-(x - x_i)^2/10^{-4}]$. Ceci est une alternative à l'utilisation d'un simple histogramme. Chacune des courbes correspond à une façon de générer les vecteurs aléatoires : en utilisant un signe aléatoire pour les composantes du vecteur ou en générant une direction aléatoire. Un échantillonnage de 100 solutions a été considéré pour faire ce graphique.

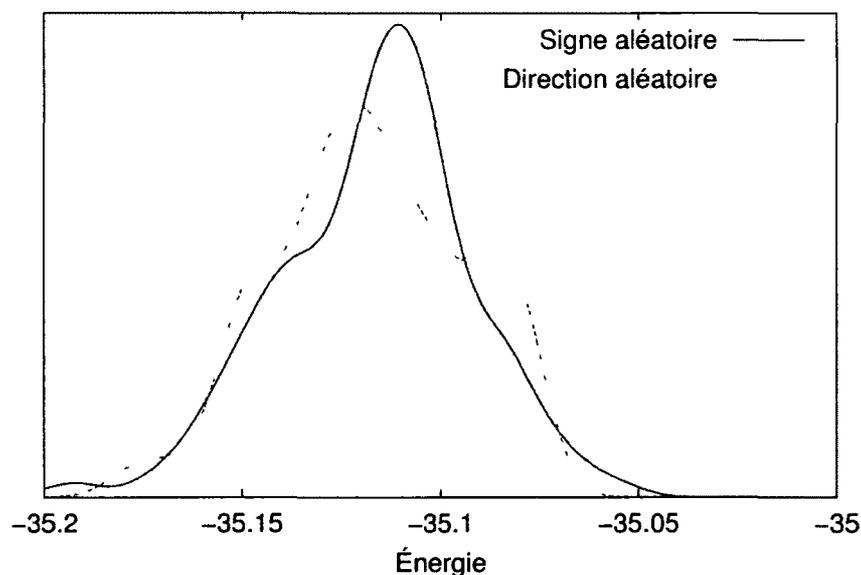


FIGURE 5.8 – Distribution des énergies trouvées après avoir généré plusieurs solutions (voir texte). Amas 2×4 , $U = 8$, $T = 0.2$, $t = 1$, $R = 50$

Ainsi, la figure 5.8 ne nous donne aucune indication claire qu'une des deux méthodes est supérieure à l'autre. S'il y avait une différence importante, nous aurions vu une dif-

férence dans la largeur des deux distributions : une fluctuation plus grande des solutions correspondrait à une courbe plus large. En fait, la méthode utilisant les signes aléatoires semble marginalement préférable, mais pas de manière significative.

Nous avons répété ces mêmes calculs à $R = 150$ et comparé ces résultats avec $R = 50$ à la figure 5.9. Dans ce cas, nous observons assez clairement une différence dans la distribution des solutions trouvées. À $R = 150$, la distribution est moins large, ce qui veut dire que les solutions fluctuent moins. C'est le résultat attendu.

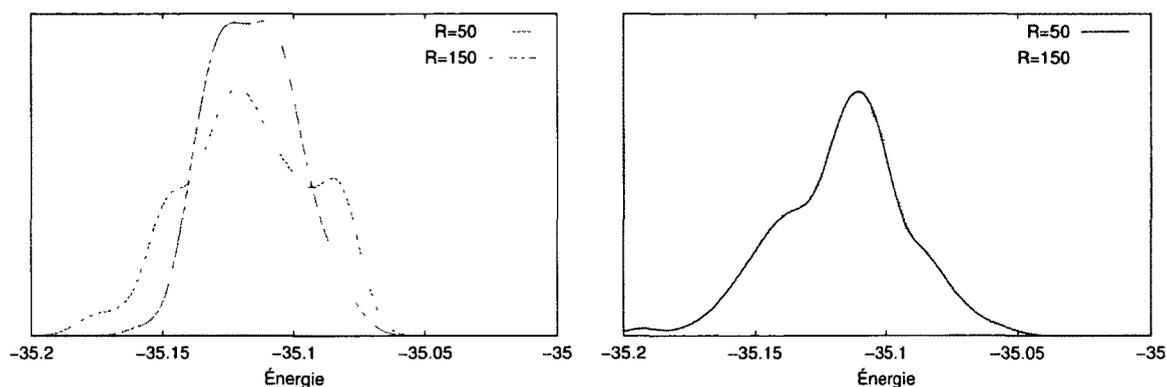


FIGURE 5.9 – Même conditions qu’au graphique 5.8, en comparant cette fois-ci la distribution des solutions pour deux valeurs de R . Dans le graphique de gauche, nous générons une direction aléatoire et dans celui à droite, on utilise plutôt des signes aléatoires.

Les deux méthodes pour générer les nombres aléatoires peuvent alors être utilisées sans que l’impact soit grand. La raison pour laquelle la différence n’est pas grande est probablement liée à la présence de la fonction de partition, tel qu’il a été discuté en page 32 (section 2.3.3). En effet, la fonction de partition n’est pas calculée indépendamment du numérateur dans le calcul d’énergie. Elle permet sans doute de faciliter la convergence.

5.1.2 Chaleur spécifique avec la RVLM

Le comportement de la chaleur spécifique du modèle de Hubbard bidimensionnel a déjà été étudié avec différentes méthodes, dont le Monte Carlo quantique (MCQ) [59] et la FTLM [60]. Ces deux méthodes utilisaient simplement des amas avec des conditions aux limites périodiques. Elles ont permis d’observer que la chaleur spécifique présente deux pics en fonction de la température autant à fort qu’à faible couplage. À fort couplage, la présence de ces deux pics peut s’expliquer simplement. D’abord, le pic à basse température

correspond à la chaleur spécifique du modèle de Heisenberg. Les électrons restent ainsi localisés sur les sites et les excitations impliquent principalement des changements dans la configuration des spins. Le pic à plus forte température est plutôt associé aux charges : les électrons commencent à se délocaliser et la double occupation augmente. Il correspond à la chaleur spécifique associée au modèle de Hubbard à $t = 0$.

Dans le mémoire présenté par Plouffe [31], la taille des amas utilisés était limitée à 6 sites. La méthode utilisée était la LVM (section 2.3.6), où les vecteurs de Lanczos servent de vecteurs de base. On y observait la présence des deux pics dans la chaleur spécifique à fort couplage. Cependant à faible couplage, à $U < 6$, on observait plutôt un seul pic de chaleur spécifique. Nous allons ainsi vérifier si l'augmentation de la taille de l'amas permet d'observer ces deux pics à faible couplage.

Avant de passer à une analyse détaillée des résultats à 8 sites, voyons d'abord à la figure 5.10 des résultats exacts pour un amas à 6 sites (2×3). Pour les valeurs de couplage égales ou inférieures à $U = 5$, nous n'observons qu'un pic de chaleur spécifique. Ceci est sans doute lié au fait que l'amas est trop petit. En effet, le pic à faible couplage et à basse température est lié à l'augmentation rapide de la longueur de corrélation et sa position est associée à la température de *crossover*, tel que discuté à la section 3.1.4. Or, notre système ne permet pas à ces grandes longueurs de corrélation de se développer, limitant la présence du premier pic. À fort couplage, la tendance vers l'antiferromagnétisme est liée à des corrélations à courte portée, ce qui permet à notre méthode de faire apparaître le pic à basse température dans la chaleur spécifique.

Pour vérifier si le pic à basse température peut apparaître en augmentant la taille de l'amas, nous avons tracé à la figure 5.11 la chaleur spécifique pour un amas 2×4 . Nous avons utilisé dans ce cas $R = 200$. Nous remarquons qu'il n'y a pas une importante différence avec l'amas 2×3 . En fait, la position des pics ne change pas, mais nous voyons une légère différence dans leur amplitude, surtout lorsque U est plus élevé. Ainsi, tout comme dans le cas 2×3 , le pic de chaleur spécifique à basse température disparaît vers $U = 5$.

Maintenant, nous allons augmenter encore la taille de l'amas pour voir comment se comporte le système. Nous avons tracé à la figure 5.12 un graphique de chaleur spécifique en utilisant l'amas B10 (voir figure 2.2), avec cette fois-ci $R = 150$. Ce nombre est suffisant pour obtenir une solution ayant convergé suffisamment pour les besoins de l'analyse. Il est intéressant de remarquer la formation de ce qui ressemble à un épaulement à $U = 5$. Pour le reste du graphique, nous observons encore un comportement similaire à celui

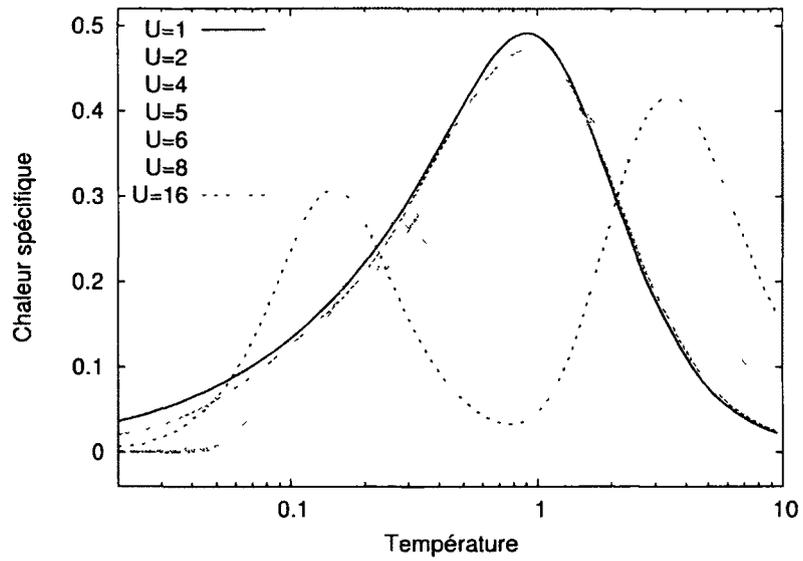


FIGURE 5.10 – Chaleur spécifique pour différentes valeurs de U . Amas 2×3 , $t = 1$ et demi-remplissage. Notons que l'axe de la température est en en échelle logarithmique.

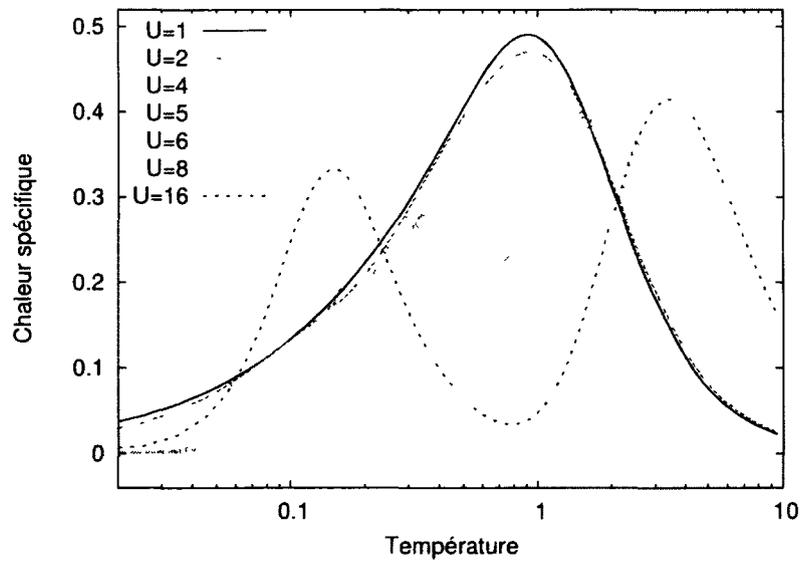


FIGURE 5.11 – Chaleur spécifique pour différentes valeurs de U . Amas 2×4 , $t = 1$, $R = 200$ et demi-remplissage.

observé dans les cas où nous avons un amas de taille 2×3 et 2×4 .

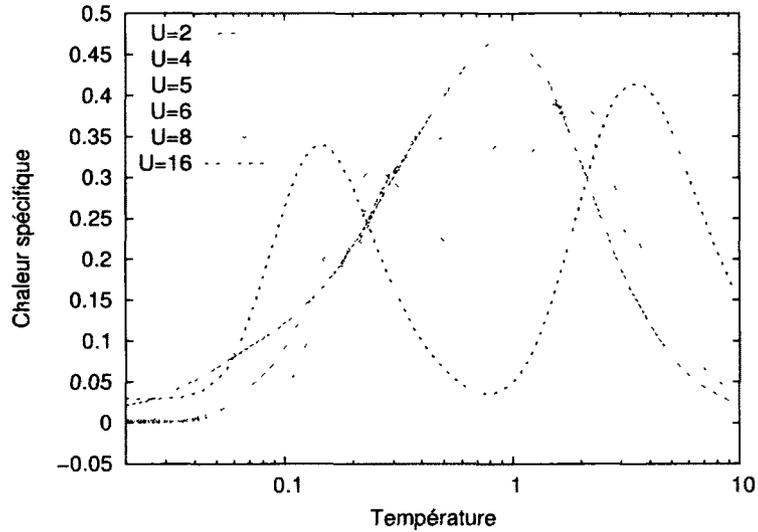


FIGURE 5.12 – Chaleur spécifique pour différentes valeurs de U calculée avec la RVLM. Amas B10, $t = 1$, $R = 150$ ($R = 50$ pour $T > 1.5$) et demi-remplissage.

Enfin, nous avons réussi à augmenter la taille de l'amas jusqu'à 12 sites, en appliquant la CPT sur un amas 3×4 . Puisque nous nous intéressons particulièrement à voir si nous pouvons observer le pic de chaleur spécifique qui se situe à basse température, nous allons regarder les cas à $U = 4$ et $U = 5$. La figure 5.13 présente les résultats obtenus, comparés aux résultats pour l'amas 2×4 et B10. La courbe à 12 sites n'est pas complète puisqu'à partir d'une certaine température, les ressources informatiques nécessaires pour faire les calculs deviennent importantes. Il serait possible de modifier le code afin de faire des calculs à température plus élevée, en exploitant par exemple la parallélisation.

Il est intéressant de remarquer que pour le cas $U = 5$, nous voyons un pic qui semble se former à basse température. Ceci est une manifestation assez claire de l'effet de la taille finie des amas. On observe ainsi que le premier pic est très sensible à la taille de l'amas, ce qui laisse croire qu'il est lié à un phénomène sensible à la taille du système, impliquant des phénomènes impliquant des longueurs de corrélation plus grande que la taille de l'amas. À $U = 4$, nous voyons aussi la formation d'un épaulement. Mais il apparaît moins rapidement que pour le cas $U = 5$ en fonction de la taille de l'amas. On peut supposer qu'en continuant d'augmenter la taille des amas, nous pourrions observer les deux pics de chaleur spécifique à faible U .

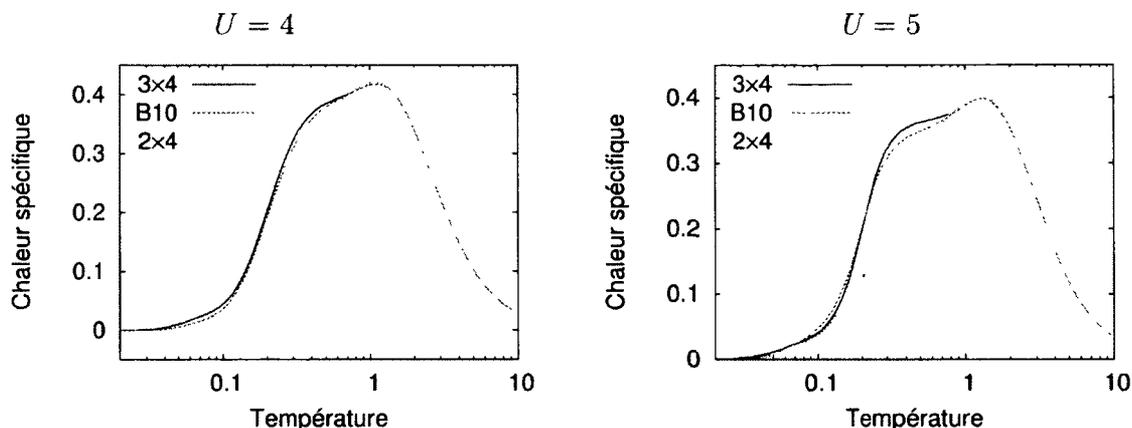


FIGURE 5.13 – Chaleur spécifique pour différents amas (2×4 , B10 et 3×4) en utilisant la RVLM pour $U = 4$ (à gauche) et $U = 5$. Nous avons utilisé $t = 1$, $R = 120$ et demi-remplissage.

Ainsi, la CPT échoue alors à faire apparaître le pic à basse température lorsque $U < 5$. Ce pic étant lié à des longueurs de corrélation plus grandes, ils ne peuvent pas apparaître pour les amas que nous utilisons. Cependant, nous savons que la VCA peut nous permettre d'obtenir des informations sur les propriétés antiferromagnétiques du système à faible U . Ainsi, en permettant un ordre antiferromagnétique en utilisant la VCA, la chaleur spécifique présenterait alors une divergence à la température T_N , calculée au chapitre 3. En effet, on s'attend à ce que la chaleur spécifique se comporte de façon similaire à celle en champ moyen, qui diverge à la transition. Ce serait en quelque sorte notre «pic» de chaleur spécifique à basse température. Pour démontrer ceci, nous avons tracé à la figure 5.14 la chaleur spécifique pour un amas 2×3 dans l'état normal et dans l'état antiferromagnétique. Ces calculs ont été réalisés de la même façon que ceux de la section 3.

Tel que nous l'observons à la figure 5.14, la chaleur spécifique dans l'état antiferromagnétique augmente très rapidement près de la température de transition. Les résultats semblent indiquer une divergence. Cependant, celle-ci serait difficile à obtenir numériquement puisque plus on s'approche de la température de transition, plus les erreurs numériques ont un impact dans la mesure de la dérivée de l'énergie. De plus, tout près de la transition, il devient de plus en plus difficile de mesurer la valeur du paramètre d'ordre antiferromagnétique.

La chaleur spécifique du système correspondrait alors à celle de l'état antiferromagnétique jusqu'à la température de transition, et passerait ensuite à celle de l'état normal.

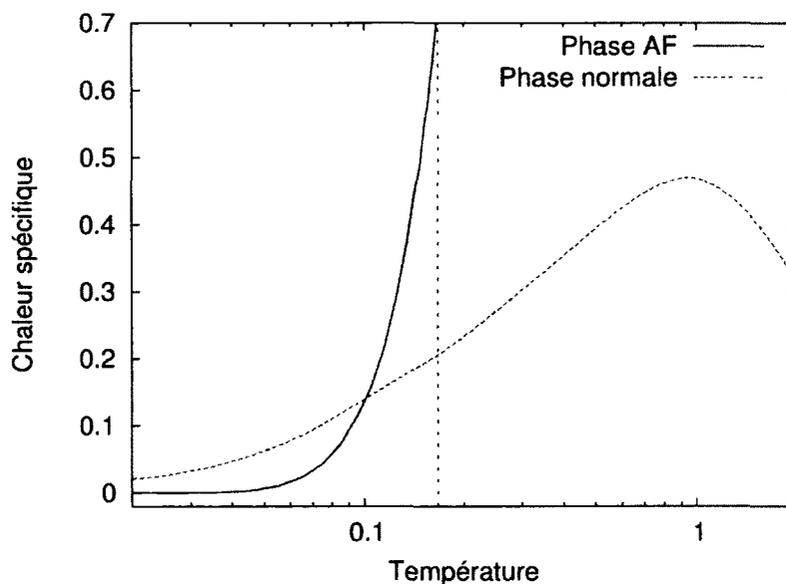


FIGURE 5.14 – Chaleur spécifique pour un amas 2×3 dans l'état normal et dans l'état anti-ferromagnétique. Les calculs ont été réalisés en diagonalisant complètement le hamiltonien sur l'amas. $U = 2$, $t = 1$, $\mu = 1$ (demi-remplissage), dans l'ensemble grand-canonique. La ligne verticale pointillée indique la température de transition.

La position du «pic» correspondrait alors à la position de la température de transition, tel que nous avons observé au graphique 3.4. Ainsi, nous obtenons en quelque sorte les mêmes résultats que ceux obtenus par la QMC et la FTLM. Notons que le pic à basse température pour un couplage faible a aussi été observé en TPSC [47].

5.1.3 Chaleur spécifique pour l'ensemble grand-canonique

Nous pouvons aussi répéter le genre de calcul de la section précédente dans l'ensemble grand-canonique, où on considère tous les secteurs de l'espace de Hilbert. Pour faire les calculs dans l'ensemble grand-canonique, nous générons un vecteur aléatoire à la fois dans tout l'espace. Les procédures de Lanczos sont tout de même réalisées dans un secteur à la fois, l'hamiltonien étant diagonal par bloc (où chaque bloc correspond à un nombre de particules et un spin donné). Travailler dans un secteur à la fois permet d'économiser des ressources de calcul.

Cependant, tel que nous le voyons à la figure 5.15, la convergence n'est pas aussi rapide que dans l'ensemble canonique. Même en considérant 300 états aléatoires, nous

observons que la chaleur spécifique n'a pas convergé. Dans ce graphique, nous avons calculé la chaleur spécifique pour deux ensembles différents de vecteurs aléatoires, en utilisant pour le reste les mêmes paramètres.

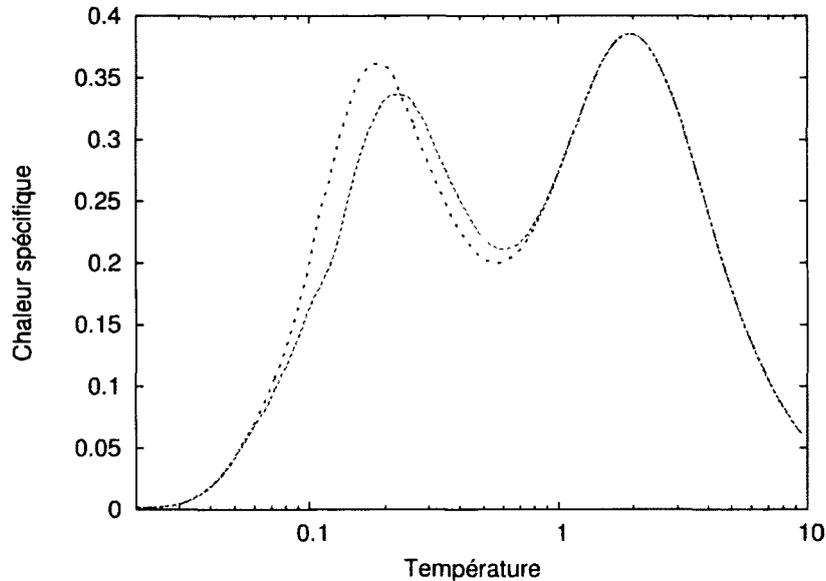


FIGURE 5.15 – Chaleur spécifique pour deux ensembles de vecteurs aléatoires. Amas 2×4 , $U = 8$, $t = 1$, $R = 300$ et $\mu = 4$ (demi-remplissage).

Ce résultat peut sembler surprenant. En effet, plus un système est grand, plus les fluctuations devraient être petites, tel qu'expliqué à la section 2.3.3. Pour un amas de 8 sites, la dimension de l'espace considéré est de 4900 dans l'ensemble canonique et de 65536 dans l'ensemble grand canonique. Ainsi, un espace plus grand conduit ici, semble-t-il, à des fluctuations plus grandes. On sait que dans le cas à 2×4 dans l'ensemble canonique, les calculs semblent fluctuer beaucoup moins lorsqu'on utilise 250 états.

Ce qui explique ces résultats est le fait que dans l'ensemble grand-canonique, nous avons une contribution de secteurs de plus petites dimensions dans les calculs thermodynamiques lorsque la température augmente. Les secteurs étant découplés les uns des autres⁵, les fluctuations des plus petits secteurs font en sorte d'augmenter l'amplitude des fluctuations par rapport à l'ensemble canonique.

⁵ L'hamiltonien commute avec l'opérateur représentant le nombre de particule et celui représentant le spin

Ainsi, faire les moyennes thermodynamiques en générant les vecteurs aléatoires dans tout l'espace n'est pas une approche efficace dû aux grandes fluctuations générées par les petits secteurs. Il serait préférable de travailler secteur par secteur, en considérant un nombre de vecteurs aléatoires différents pour chacun des secteurs. Les secteurs plus grands nécessiteront moins de vecteurs aléatoires. Il est possible ensuite de pondérer la contribution de chacun des secteurs en fonction du nombre de vecteurs aléatoires utilisés.

En fait, plus le système sera grand en dimension, moins les problèmes de fluctuations seront importantes. D'abord, le poids relatif des petits secteurs sera de moins en moins grand lorsque la taille du système augmente. En fait, la contribution des petits secteurs dépendra entre autres du remplissage. Les secteurs de plus grandes tailles sont ceux près du demi-remplissage ($N_\uparrow = N_\downarrow = L/2$). Les énergies impliquées dans les petits secteurs sont habituellement plus grandes que celles des grands secteurs près du demi-remplissage. Ainsi, en travaillant avec de plus gros amas, et en restant relativement près du demi-remplissage, il serait possible d'avoir des solutions qui convergent plus rapidement que celles de la figure 5.15.

Pour les secteurs très petits, il est possible d'utiliser une diagonalisation complète. Ceci permet d'éviter d'utiliser un trop grand nombre de vecteurs aléatoires alors que ces secteurs sont facilement diagonalisables exactement. Pour les secteurs de tailles intermédiaires, c'est-à-dire un peu plus grands que la taille maximale où la diagonalisation complète est encore possible, nous pouvons utiliser une autre approche qui sera décrite à la section suivante.

5.1.4 Utiliser la base des vecteurs de Lanczos

Puisque les états aux valeurs propres extrêmes convergent plus rapidement dans la méthode de Lanczos, les états propres de plus basse énergie obtenus par la méthode de Lanczos peuvent être utilisés pour effectuer des calculs thermodynamiques à basse température. En effet, à basse température, seules les énergies les plus basses contribuent significativement à la moyenne thermodynamique. Habituellement, on fixe une énergie de coupure et on garde seulement les états propres associés à une énergie plus basse que cette coupure. Ceci fait en sorte que les températures accessibles sont limitées dans cette méthode.

Nous allons ici procéder d'une autre façon. Nous allons utiliser dans nos calculs tous les états propres trouvés dans la méthode de Lanczos et voir comment se comporte la

chaleur spécifique en fonction du nombre d'itérations dans Lanczos. En fait, concrètement, nous appliquerons une coupure, mais celle-ci servira seulement à éliminer les états dont l'énergie est trop grande pour contribuer de façon significative au calcul (voir section 2.3.3). C'est la méthode que nous avons décrite à la section 2.3.6, soit la LVM.

Pour ce faire, nous déterminons un vecteur aléatoire⁶ et nous utiliserons les états propres générés par la méthode de Lanczos pour calculer la moyenne thermodynamique. Le nombre d'itérations M dans la deuxième procédure de Lanczos (appliquée aux vecteurs de type $c_a|\psi\rangle$ dans le calcul de la fonction de Green) ne sera pas traité de la même façon que le nombre d'itérations M' pour déterminer la base utilisée. En effet, dans le dernier cas, la méthode de Lanczos ne sert pas à calculer une projection impliquant un terme du genre $e^{-\beta H}$. Le nombre d'itérations M sera fixé de la même façon que nous avons faite à la section précédente.

Nous avons tracé à la figure 5.16 un graphique de la chaleur spécifique en fonction du nombre d'itérations M' . Nous y voyons que la convergence se fait de façon plus régulière qu'en utilisant les vecteurs aléatoires. En effet, plutôt que d'avoir des variations autour de la valeur attendue, nous avons plutôt une courbe qui converge progressivement. Pour voir que ceci se produit aussi à d'autres valeurs de U , nous avons tracé le graphique de la figure 5.17, où $U = 4$. Le même comportement se produit. Les graphiques ont été tracés jusqu'à $T = 1$ puisqu'à température plus élevée, il n'y a pas de difficulté à calculer la chaleur spécifique.

Il peut sembler surprenant, a priori, de constater qu'un ensemble fini des vecteurs de base obtenus par la méthode de Lanczos puissent donner le bon comportement à toutes les températures⁷. Cependant, notons ici que la dimension du système étudié est relativement petite, soit 4900 pour un amas de 8 sites à demi-rempli dans l'ensemble canonique.

Afin de valider ces résultats, nous allons les comparer avec ceux obtenus à l'aide de la RVLM. Nous avons ainsi tracé le graphique à la figure 5.18 pour le cas $U = 8$. Nous y voyons que les deux courbes sont presque identiques. La différence est due au fait qu'il y a une fluctuation statistique à la courbe calculée à l'aide de la RVLM. Ceci nous confirme la validité des deux approches. En effet, dans les deux cas, la fonction de Green est calculée différemment et nous observons le même comportement. Ceci, ajouté au fait que nous avons vérifié que notre méthode donne les résultats exacts dans les cas limites (cas $U = 0$

6. La façon de générer le vecteur aléatoire n'a plus d'importance ici.

7. Du moins, les solutions convergent et sont similaires à celle obtenues à partir de la base aléatoire

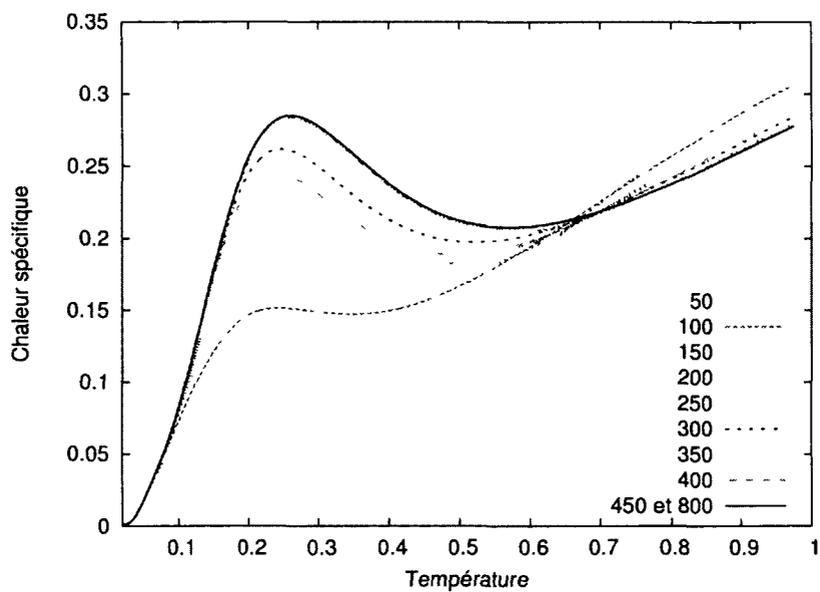


FIGURE 5.16 – Chaleur spécifique pour différents nombres d'itérations M' dans la méthode de Lanczos. Amas 2×4 , $U = 8$, $t = 1$, demi-remplissage, ensemble canonique.

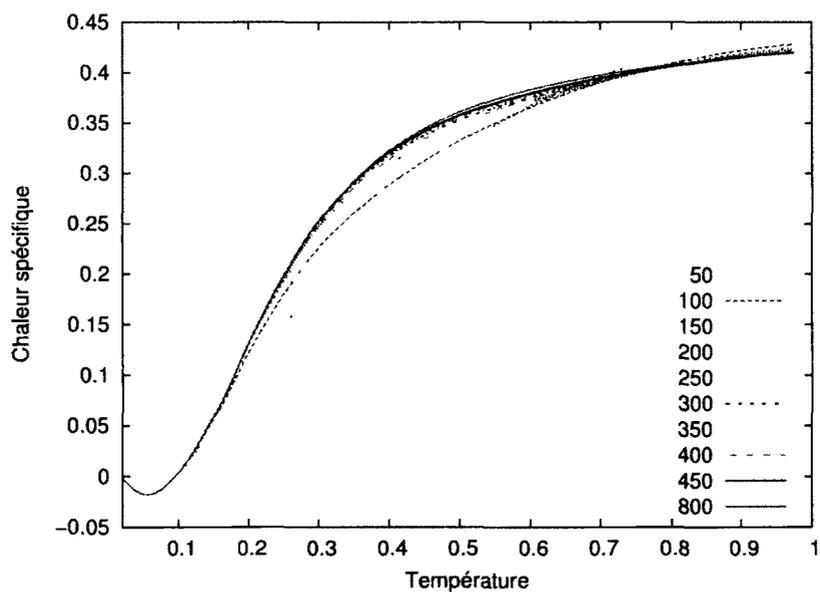


FIGURE 5.17 – Même situation que la figure 5.16, mais en prenant cette fois-ci $U = 4$.

et cas $t = 0$), nous pouvons considérer que les résultats sont crédibles : il ne semble pas y avoir d'erreurs de calcul autre que les erreurs numériques habituelles.

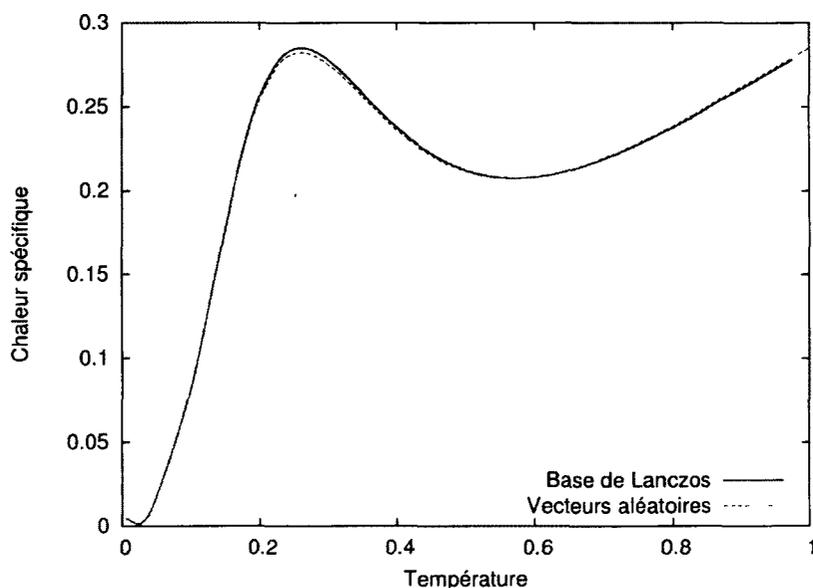


FIGURE 5.18 – Comparaison de la RVLM ($R = 200$) et la LVM ($M' = 500$) pour $U = 8$. Les données sont tirées des figures 5.16 et 5.11. Système demi-rempli, ensemble canonique, $t = 1$, amas 2×4 .

Afin de s'assurer que ceci est aussi le cas à d'autres valeurs de U , nous avons tracé la figure 5.19. Cette fois-ci, nous avons fixé $U = 4$. Encore une fois, nous avons une correspondance assez convaincante entre les deux méthodes de calcul.

L'utilisation de la LVM fonctionne bien pour le calcul de la fonction de Green sur un amas de 8 sites. On s'attend à ce qu'elle fonctionne au moins tout aussi bien pour un amas plus petit. Pour comprendre ceci, considérons que nous gardons un nombre fixe d'itérations dans la méthode de Lanczos pour obtenir notre base. Si la dimension de l'espace de Hilbert considéré est plus petite que ce nombre d'itérations, la moyenne thermodynamique est exacte. Si on augmente la dimension de l'espace de Hilbert, le nombre d'état ayant convergé diminuera forcément relativement à l'espace total. Ainsi, les calculs deviendront de moins en moins précis lorsque la taille de l'amas augmente. Nous le verrons plus loin.

Lorsque la taille de l'amas augmente, on devrait observer une convergence plus lente de la LVM. Afin de démontrer cette affirmation, nous avons tracé à la figure 5.20 la chaleur

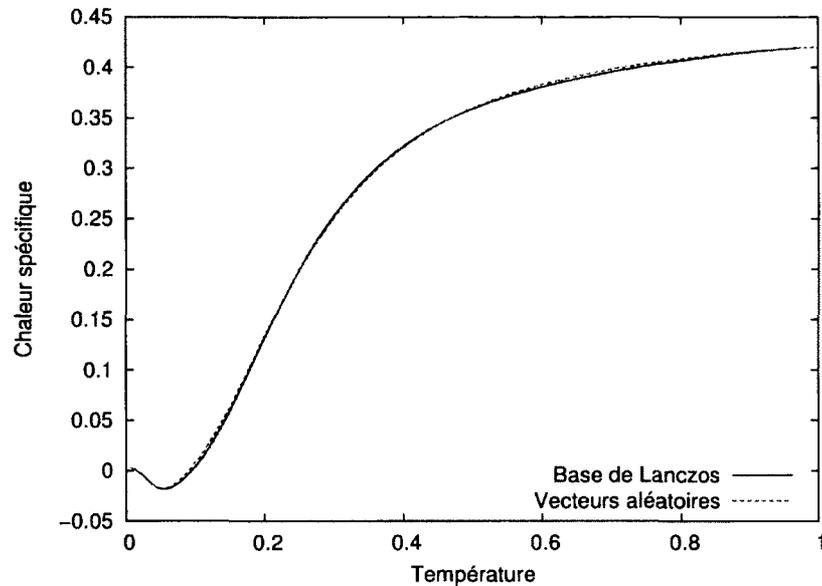


FIGURE 5.19 – Même situation que la figure 5.18, mais en prenant cette fois-ci $U = 4$.

spécifique pour différents nombres de vecteurs obtenus par la méthode de Lanczos pour un amas B10. Tel que nous le voyons dans ce graphique, même avec 1400 itérations, nous n'avons pas obtenu une convergence générale des résultats. En fait, tel qu'attendu, nous avons une convergence des résultats à basse température. La température à partir de laquelle les résultats semblent avoir convergé augmente lorsque le nombre de vecteurs considérés dans la méthode de Lanczos augmente.

Ainsi, lorsque la taille de l'amas augmente trop, il ne devient pas avantageux d'utiliser la LVM, au contraire. Elle exige beaucoup trop de ressources informatiques. Pour les hamiltoniens de très grandes dimensions, il est préférable d'utiliser la RVLM.

5.2 Application de la LVM à la VCA

Les calculs réalisés à l'aide de la VCA demandent habituellement une grande précision numérique. En effet, une petite variation dans la forme de la fonctionnelle de Potthoff peut conduire à une importante variation dans la détermination de quantités tel que les températures de transition. Par exemple, lorsque l'on détermine la température de Néel, si la fonctionnelle de Potthoff n'est pas calculée correctement, la position de la température

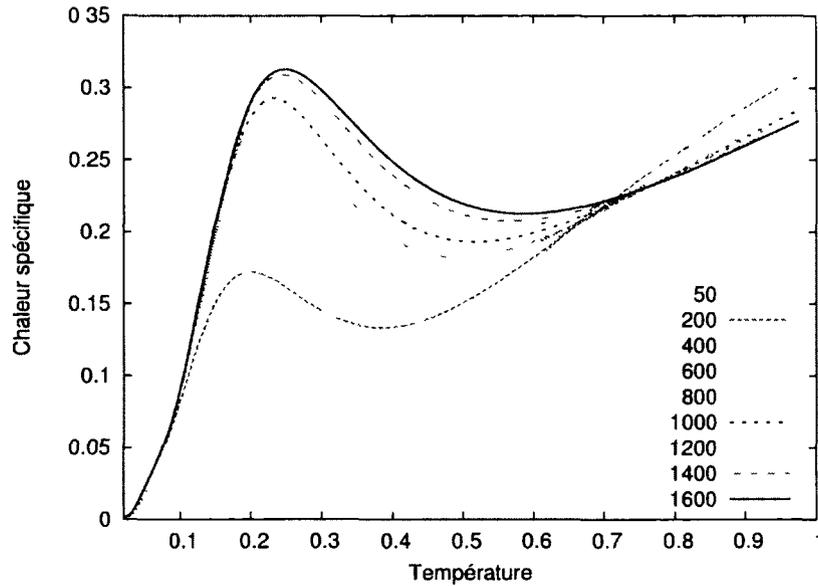


FIGURE 5.20 – Chaleur spécifique pour différents nombres d'itérations M' en utilisant la LVM. Amas B10, $U = 8$, $t = 1$, demi-remplissage, ensemble canonique.

de transition peut changer de façon significative.

Une des difficultés dans ce type de calculs réside dans l'évaluation de la fonction de partition. En effet, pour calculer la fonctionnelle de Potthoff, nous avons besoin du grand potentiel de l'amas. Pour calculer ce dernier, nous devons connaître la fonction de partition grand canonique. Les méthodes que nous avons étudiées dans ce chapitre, soient la LVM et la RVM, ne calculaient pas nécessairement la fonction de partition totale du système. Il a été plutôt démontré que nous n'avons pas besoin de connaître sa valeur exacte lorsque nous calculons des moyennes thermodynamiques. Nous avons montré que la moyenne thermodynamique d'un opérateur converge même si l'on n'utilise pas une base complète.

Il est possible de contourner le problème du calcul de la fonction de partition de différentes façons. L'approche la plus simple est d'utiliser la LVM et de rester à basse température. En effet, dans ce cas, les états contribuant aux calculs de la fonction de partition ont tous convergé si suffisamment d'itérations sont réalisées. Ceci revient en quelque sorte à une approche similaire à celle utilisée dans les chapitre 3 et 4. En effet, la méthode de Lanczos nous permet de déterminer exactement les états de plus basse énergie, comme on obtiendrait avec une diagonalisation complète.

Nous allons alors répéter les mêmes opérations qu'au chapitre 3 , mais en utilisant cette fois-ci un amas 2×4 . Nous calculerons la température de Néel pour le système demi-rempli, à $t = 0$. Afin de s'assurer que les états ont convergé, nous pouvons comparer nos résultats avec un cas où le nombre d'itération est augmentée. Si la solution reste la même, alors on peut considérer que nous avons convergence.

Ainsi, nous avons tracé le graphique de la figure 5.21. Nous y avons obtenu la température de Néel en fonction de U . À des fins de comparaison, nous y avons ajouté les résultats de la figure 3.4 pour un amas 2×3 . L'erreur sur la précision de la température de Néel obtenue est de l'ordre de ± 0.001 . Une plus grande précision pourrait être obtenue, mais celle choisie était suffisante pour les besoins de ce graphique.

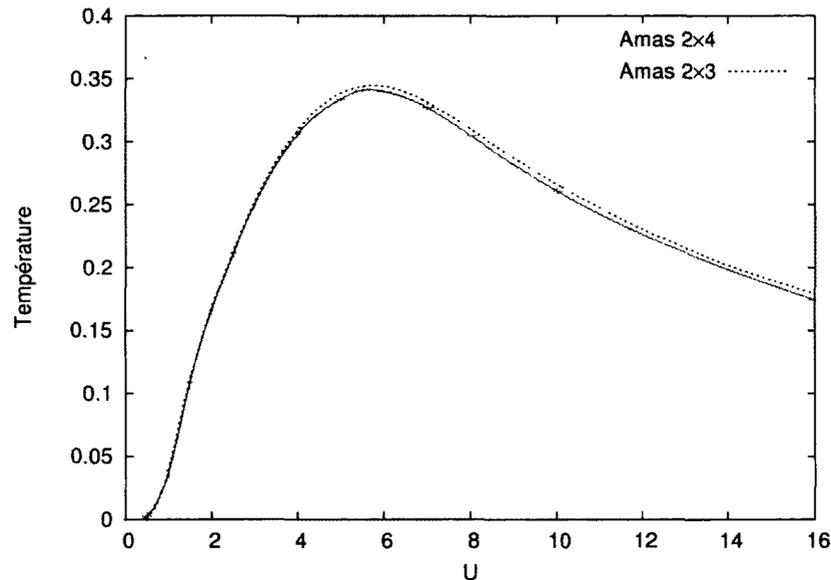


FIGURE 5.21 – Température de Néel en fonction du terme d'interaction U pour l'amas 2×4 , à l'aide de la LVM. La courbe pour l'amas 2×3 provient de la figure 3.4. Système demi-rempli, $t = 1$, ensemble canonique.

Tout d'abord, il est intéressant de constater que les deux courbes, pour l'amas 2×3 et l'amas 2×4 sont très similaires. Tel que prévu, la courbe pour l'amas 2×4 montre une température de Néel inférieure (ou égale) à celle de l'amas 2×3 . En effet, tel qu'expliqué au chapitre 3, nous nous attendons à ce que la température de Néel diminue lorsque la taille de l'amas augmente. Lorsque la taille de l'amas tend vers l'infini, la température de Néel devrait tendre vers 0.

À faible U , on ne voit aucune différence importante entre les deux courbes. À faible U , la température de transition semble être purement de nature champ moyen, avec une augmentation exponentielle de T_N en fonction de U . Ceci n'est pas surprenant. En effet, la longueur de corrélation antiferromagnétique dans le réseau devrait augmenter de façon exponentielle. L'amas ne peut pas refléter très bien cette augmentation rapide de la longueur de corrélation, ce qui fait en sorte qu'une augmentation de la taille de l'amas qui est petite comparée à la longueur de corrélation peut avoir peu d'effets sur la température de transition.

À plus fort U , les corrélations antiferromagnétiques sont de plus courtes portées. L'amas peut ainsi mieux refléter ce qui se passe dans le réseau, ce qui fait en sorte que la taille de l'amas influence plus facilement la température de Néel.

Ce graphique reflète bien le changement de comportement du système entre le fort et le faible couplage, tel qu'attendu. La transition survient autour de $U = 6$. Bien que cette transition ne soit pas surprenante, il est intéressant de constater que la même approche puisse détecter ce changement de comportement. Plusieurs approches ne sont valides qu'à fort ou à faible couplage, alors que la VCA semble pouvoir donner des résultats significatifs dans les deux limites. Bien que cette approche soit basée sur le couplage fort, elle «voit» une transition vers le faible couplage.

5.3 Application de la RVLM à la VCA

Cette section ne présentera pas de calculs, mais expliquera comment on peut obtenir la fonctionnelle de Potthoff à partir de la RVLM. Tel que nous avons expliqué dans la section précédente, la difficulté dans ce cas réside dans le calcul de la fonction de partition grand canonique. Pour calculer celle-ci exactement, nous devons en théorie utiliser une base complète, ou du moins utiliser les états contribuant significativement à la fonction de partition.

Il est habituellement plus simple de réaliser des calculs sur l'amas que sur le réseau. Par exemple, calculer l'énergie sur l'amas est beaucoup plus rapide que calculer l'énergie sur le réseau. En effet, pour calculer l'énergie du réseau, on doit d'abord calculer la fonction de Green de l'amas, ce qui nécessite plusieurs procédures de Lanczos pour calculer la fonction de Green de l'amas.

Ainsi, il est possible de calculer la fonction de partition grand canonique sur l'amas en utilisant une approche différente de celle utilisée pour calculer la fonction de Green.

Par exemple, il pourrait être facile de calculer la fonction de partition exacte en utilisant plusieurs itérations dans Lanczos (suffisamment pour que tous les états contribuant à la fonction de partition aient convergé), et ensuite calculer la fonction de Green en utilisant la RVLM. Ainsi, on peut se permettre une plus grande précision dans le calcul de la fonction de partition grand canonique.

Pour calculer la fonction de partition à l'aide de la RVLM, nous devons extrapoler la fonction de partition totale à partir de celle obtenue pour un sous-ensemble de vecteurs. Ainsi, nous pouvons supposer que la fonction de partition totale Z sera donnée par :

$$Z \approx Z(R) \frac{D}{R} \quad (5.2)$$

où D est la dimension du système et $Z(R)$ est la fonction de partition partielle calculée à partir de R vecteurs aléatoires normalisés. La raison pour laquelle nous mettons la fonction de partition sous cette forme est pour l'obtenir sous forme d'une moyenne. Cette équation se justifie à partir de l'équation (2.56), en posant $\mathcal{O} = e^{-\beta H}$ et $\langle\langle \xi_{r_i} \xi_{s_j}^* \rangle\rangle = 1/D$. Cette moyenne sur les ξ_{r_i} est vraie si nous avons normalisé les vecteurs aléatoires.

Pour vérifier si c'est possible de calculer la fonction de partition à l'aide de la RVLM, nous allons voir un exemple de calcul. En fait, puisque nous voulons voir comment fluctue la fonction de partition, nous allons considérer seulement un secteur pour obtenir la fonction de partition canonique et l'amas B10. Les résultats se trouvent à la figure 5.22. Dans ce graphique, nous avons tracé trois courbes, chacune correspondant à un ensemble de vecteurs aléatoires différent.

Nous voyons dans la figure 5.22 que la fonction de partition ne converge pas rapidement. En effet, après 2000 itérations, la fonction de partition n'a pas encore convergé de façon convaincante. Notons que la dimension du système étudié ici est de 63 504. Étant donné que nous avons fait les calculs à $T = 0.5$, ce ne sont pas tous les états propres du hamiltonien qui contribuent significativement à la fonction de partition, donc la dimension effective est plus petite que 63 504. Nous avons calculé la dimension effective telle que définie à l'équation 2.63. Considérant la coupure utilisée dans notre cas, la dimension effective est d'environ 7000 à $T = 0.5$. Notons ici que cette valeur nécessite de fixer arbitrairement certaines valeurs (pour fixer la coupure). Cependant, ce qui est clair c'est qu'elle sera de 1 à $T = 0$ et D à $T \rightarrow \infty$.

Plus la dimension effective sera grande, plus la fonction de partition calculée à partir de l'équation 5.2 risque de converger rapidement. En effet, d'avantages d'états contribuent

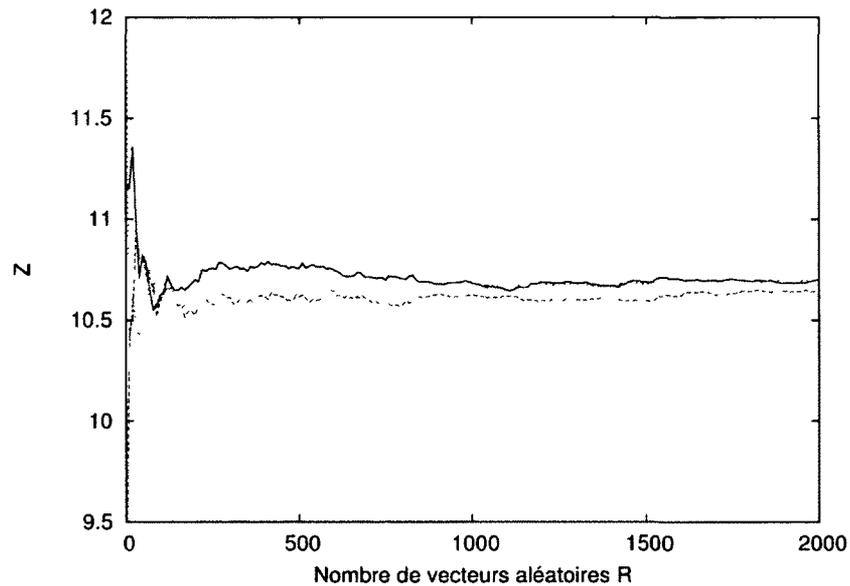


FIGURE 5.22 – Fonction de partition canonique totale en fonction du nombre de vecteurs aléatoires R pour l'amas B10 à $T = 0.5$, $U = 8$, $t = 1$, système demi-rempli. Elle est calculée à partir de l'équation 5.2. Les trois courbes correspondent à des ensembles de vecteurs aléatoires différents.

alors à la fonction de partition, ce qui fait que les fluctuations risquent d'être moins grandes.

Il est possible que les fluctuations dans la fonction de partition n'influence pas suffisamment la position du minimum dans la fonctionnelle de Potthoff pour changer significativement les résultats. Ceci serait à vérifier. Cependant, la solution la plus réaliste pour l'instant serait de calculer la fonction de partition de façon exacte en utilisant une autre approche.

5.4 Discussion des résultats et des méthodes étudiées

Jusqu'à présent, trois approches différentes ont été utilisées pour déterminer la fonction de Green sur l'amas. Dans les deux chapitres précédents, nous avons considéré des amas qui pouvaient être diagonalisés complètement pour étudier les ordres antiferromagnétique et supraconducteur à l'aide de la VCA. Dans ce chapitre, nous nous sommes

plutôt attardés à des amas de plus grande taille, soit de 8 à 12 sites.

Deux facettes sont à distinguer dans l'analyse des résultats de ce chapitre, soit le calcul de la fonction de Green sur l'amas et le calcul de la chaleur spécifique à l'aide de la CPT. Bien que nous n'ayons pas explicitement montré le calcul de la fonction de Green de l'amas, nous avons vérifié comment s'assurer que son calcul soit suffisamment précis pour obtenir des résultats qui ont convergé lorsque la CPT est utilisée. Nous avons ainsi pu par la suite étudier la chaleur spécifique en fonction de la température pour différentes valeurs de U et pour différentes tailles d'amas.

Nous avons pu établir dans ce chapitre l'efficacité des méthodes en fonction des tailles d'amas. Pour un amas de 6 sites et moins, une diagonalisation complète est suffisante. Pour un amas de 8 sites, la LVM est l'approche la plus efficace. Elle permet de minimiser à la fois les ressources nécessaires pour faire les calculs ainsi que d'optimiser le temps de calculer. Pour 10 sites et plus, la RVLM est définitivement plus appropriée. En effet, dans ce cas, la LVM requiert beaucoup trop d'itérations dans la méthode de Lanczos pour pouvoir faire les calculs efficacement. En fait, la LVM peut être utilisée à très basse température pour un amas de 10 ou 12 sites. Cependant, elle devient vite limitée en température, tel que nous avons pu le constater dans les résultats.

Nos méthodes sont malheureusement limitées à un nombre restreint de sites par rapport au QMC. Cette dernière approche peut considérer au moins le double de sites sans avoir besoin de ressources informatiques beaucoup plus importantes que nos approches. Cependant, les méthodes présentées ici ont tout de même certains avantages. Bien que nous soyons restés à demi-remplissage et au cas où il n'y a que des sauts aux premiers voisins, nos approches ne sont pas limitées par rapport aux valeurs que peuvent prendre les paramètres définis sur l'amas. Nous pourrions sans problème varier les paramètres tels que les termes de saut t_{ab} , le couplage U et le potentiel chimique μ . Nous ne sommes pas non plus limités en température. Nous pouvons passer de façon continue de $T = 0$ à $T \rightarrow \infty$. Le QMC est davantage limité sur les conditions dans lesquels il peut être utilisé, à cause du problème de signe qui survient lorsqu'on s'éloigne du demi-remplissage et lorsque la frustration du système est trop importante.

Un autre avantage important de notre méthode est que nous pouvons obtenir des résultats dans l'espace des fréquences réelles ou des fréquences imaginaires. Dans le cas du QMC et de la TPSC, les quantités dynamiques sont d'abord données en fonction des fréquences de Matsubara et il est ensuite nécessaire de faire un prolongement analytique pour obtenir les résultats en fréquences réelles.

Cependant, une des lacunes des méthodes présentées ici est l'absence, contrairement au QMC, d'une façon de mesurer l'erreur sur les quantités calculées. Par exemple, avec la RVLM, il nous est alors difficile d'évaluer à quel point nos calculs sont précis sans refaire plusieurs fois le même calcul à partir d'un ensemble différent de vecteurs aléatoires. Une difficulté liée à l'évaluation de l'erreur réside dans le fait que la CPT et la VCA ne sont pas des opérations linéaires. En sachant l'erreur sur la fonction de Green de l'amas, il n'est pas évident d'extrapoler quelle sera, par exemple, l'erreur sur l'énergie déterminée par la CPT.

Les approches présentées ici sont des améliorations de méthodes déjà existantes. Nous avons d'abord montré que la LVM pouvait être appliquée à plus large éventail de température lorsqu'un amas n'est pas trop grand, soit 8 sites dans notre cas. En effet, traditionnellement, on utilise seulement les vecteurs propres de plus petite énergie pour faire la moyenne thermodynamique alors que nous avons montré qu'il était possible d'appliquer l'approche à température plus élevée, à condition que la dimension du hamiltonien ne soit pas trop grande par rapport au nombre d'états de Lanczos trouvés.

Quant à la RVLM, en calculant directement les termes sous la forme $e^{-\beta H/2}|\psi\rangle$, où $|\psi\rangle$ est un vecteur quelconque, nous faisons en sorte de réduire considérablement les temps de calcul lorsqu'on veut considérer qu'une seule température et qu'un seul potentiel chimique à la fois. Ceci permet de réduire les ressources nécessaires pour les calculs lorsque combiné avec une méthode telle que la VCA ou la CDMFT.

Du côté de la CPT plus spécifiquement, une fois que nos résultats ont convergé, nous avons vu que la chaleur spécifique déterminée à l'aide de la CPT avait le comportement attendu à fort couplage, avec deux larges pics dans la chaleur spécifique. Cependant, à faible couplage, la chaleur spécifique n'a pas le bon comportement. En effet, dans ce cas, le pic de chaleur spécifique à basse température est absent dans nos calculs. Nous avons expliqué que ceci était lié à la petite taille des amas. Il s'agit d'une des faiblesses de la CPT et des méthodes d'amas en général, soit l'incapacité de considérer les phénomènes associés à des grandes longueurs d'onde.

Pour l'étude des paramètres associés aux supraconducteurs à haute température critique, ceci ne devrait pas poser problème. En effet, tel qu'expliqué à la section 4.5, la valeur du couplage sera autour de $U = 6$. À cette valeur de couplage, l'amas semble être de taille suffisamment grande pour présenter les deux pics attendus dans la chaleur spécifique.

La CPT donne aussi des résultats peu crédibles à faible température pour certaines

valeurs de U . En effet, la chaleur spécifique devient parfois négative. Il faut considérer ici que ceci n'est pas associé directement aux méthodes de résolution des amas, mais plutôt à la CPT elle-même. Bien que cela puisse sembler être problématique, il faut considérer que les valeurs négatives de la chaleur spécifique surviennent seulement pour de petits amas, ou quand les solutions n'ont pas convergé. C'est pourquoi nous ne sommes pas attardés davantage à l'analyse de cette chaleur spécifique négative. Il s'agit d'un artefact de la CPT.

Nous avons tenté dans ce chapitre d'utiliser nos méthodes de résolution d'amas avec la VCA. Cependant, ceci pose problème pour le calcul de la fonction de partition grand canonique. En effet, la fonction de partition ne s'écrit pas comme une valeur moyenne contrairement aux autres quantités telle la fonction de Green. Ceci limite beaucoup l'application de la RVLM aux calculs avec la VCA. Il sera nécessaire de faire davantage de vérifications pour voir comment on peut contourner ce problème. Nous avons suggéré une façon d'écrire la fonction de partition sous forme d'une moyenne. Il faudra mettre à l'épreuve cette approche pour voir comment les valeurs trouvées vont varier en fonction des vecteurs aléatoires choisis.

Dans le cas de la CDMFT, la RVLM pourrait être plus facilement utilisée. En effet, la RVLM serait impliquée seulement dans le calcul de la fonction de Green de l'amas. Il n'est pas nécessaire de calculer explicitement la fonction de partition totale de l'amas dans les calculs de la CDMFT. Une approche correspondant à la LVM a été utilisée avec la CDMFT par Capone *et al.* [32]. Cependant, étant donné la dimension de l'espace d'Hilbert considéré, il devient difficile d'augmenter de façon significative la température tout en obtenant des résultats crédibles. Cependant, pour utiliser la RVLM avec la CDMFT, l'approche utilisée par Capone *et al.* peut être utilisée, avec la seule différence que la fonction de Green serait calculée différemment.

5.5 Résumé du chapitre

Nous avons étudié dans ce chapitre deux méthodes permettant de calculer la fonction de Green sur un amas. Nous nous sommes d'abord attardés à la RVLM appliquée à la CPT. Nous avons étudié comment ajuster les paramètres de la RVLM afin que l'énergie et la chaleur spécifique convergent. Nous avons ainsi vu qu'avec un nombre très restreint de vecteurs aléatoires, nous sommes capables d'obtenir une moyenne thermodynamique qui permet de donner des résultats crédibles.

Nous avons aussi pu calculer la chaleur spécifique du modèle de Hubbard sur un réseau carré à l'aide de la CPT et ce pour des amas allant jusqu'à 12 sites. À fort couplage, nous obtenons les mêmes comportements que ceux obtenus à l'aide d'autres méthodes, soit la présence de deux larges pics dans la chaleur spécifique. Cependant, à faible couplage, nous obtenons plutôt qu'un seul pic, contrairement aux autres méthodes. Nous avons vu que ceci était dû au fait que nos amas étaient trop petits pour considérer les grandes longueurs d'onde. Pour faire apparaître une structure similaire à ce pic à faible température, nous avons vu que nous pouvons utiliser la VCA en permettant d'inclure l'ordre antiferromagnétique.

Nous avons ensuite pu refaire des calculs similaires mais en utilisant cette fois-ci la LVM. Pour un amas de 8 sites, la méthode est plutôt efficace et permet de donner des résultats qui convergent rapidement en fonction du nombre d'itérations dans Lanczos, et ce à toutes les températures considérées. Les résultats obtenus par la LVM correspondent à ceux obtenus par la RVLM, ce qui montre que les deux méthodes semblent converger correctement. Cependant, lorsque l'amas augmente en taille, la LVM devient de moins en moins performante, nécessitant de nombreuses itérations dans la méthode de Lanczos pour obtenir un résultat qui converge.

Quant à la VCA, nous avons vu que la grande difficulté était d'obtenir la fonction de partition grand canonique. À faible température, il est possible d'appliquer la LVM pour obtenir la bonne fonction de partition. Cependant, pour la RVLM, la difficulté de calculer cette fonction de partition est très présente. D'autres vérifications et développements devront être faits pour résoudre ce problème.

Conclusion

Cette recherche a permis d'étudier à partir de différentes approches les propriétés du modèle de Hubbard bidimensionnel à température finie sur un réseau carré. Nous avons utilisé trois méthodes différentes pour déterminer la fonction de Green sur des amas : la diagonalisation complète, la RVLN (vecteurs aléatoires), et la LVM (vecteurs de Lanczos). Les fonctions de Green sur les amas ont ensuite été traitées à partir de deux méthodes, soit la CPT et la VCA, pour extrapoler les caractéristiques du modèle de Hubbard sur un réseau.

En utilisant de petits amas (4 et 6 sites), sur lesquels nous avons appliqué une diagonalisation complète, nous avons étudié les transitions de phase antiferromagnétique et supraconductrice du modèle de Hubbard à l'aide de la VCA. Dans le cas où le terme de saut t est limité aux premiers voisins et que nous utilisons un amas 2×3 , nous avons observé un comportement de la température de Néel au demi-remplissage qui correspond à celui attendu dans un système quasi bidimensionnel. En effet, on observe d'abord une augmentation exponentielle de la température de Néel à faible U , un maximum à couplage intermédiaire (vers $U = 5$) et enfin un comportement en $1/U$ (ou J) à fort couplage.

Ce dernier résultat est l'un des plus importants de cette thèse. En effet, il montre que la VCA permet d'obtenir la bonne tendance à l'antiferromagnétisme du modèle de Hubbard autant dans les limites à fort et faible couplage. Il reproduit la forme du diagramme de phase attendu en fonction de U d'un système quasi bidimensionnel.

Lorsque le remplissage était varié nous avons vu que la VCA laissait une région sans solution dans le diagramme de phase. Ce qui est intéressant avec cette région est qu'elle semble correspondre à une tendance du système vers l'antiferromagnétisme incommensurable obtenue par d'autres méthodes. Cette observation montre que les régions sans solution de la VCA peuvent signifier la présence d'un ordre non considéré par la VCA plutôt que la présence d'une séparation de phase.

Du côté de la supraconductivité, dans les mêmes conditions, la VCA s'est montrée un

peu moins efficace, principalement à faible couplage. En effet, dans ce cas, la température critique diverge au demi-remplissage. Certains états excités contribuent à faire apparaître dans la fonctionnelle de Potthoff un minimum supplémentaire lorsque la température augmente. Ceci semble clairement lié aux limites de la VCA et très probablement au fait que l'amas utilisé est petit. À plus fort couplage, nous avons tout de même pu obtenir des températures critiques qui ne divergeaient pas au demi-remplissage. Contrairement au paramètre d'ordre à température nulle trouvée par la CDMFT, la température critique ne se comportait pas selon J .

Nous avons aussi pu tracer le diagramme de phase pour l'antiferromagnétisme et la supraconductivité lorsque les termes de saut correspondaient aux valeurs suggérées dans la littérature pour le YBaCuO, avec $U = 8t$. Nous avons vu que la phase antiferromagnétique présentait la même asymétrie trou-électron que les cuprates. Cette asymétrie avait aussi été observée pour le paramètre d'ordre antiferromagnétique à température nulle à l'aide de la VCA et d'autres méthodes telle la CDMFT. Il s'agit d'un autre indice nous montrant l'efficacité de la VCA pour l'étude de l'antiferromagnétisme.

Pour ce qui est de la supraconductivité, nous observons deux dômes de chaque côté du demi-remplissage. La température critique maximale de ces dômes diffèrent : celle du côté dopé aux trous étant significativement plus basse. Bien qu'une différence soit aussi observée dans d'autres méthodes étudiant le paramètre d'ordre à température nulle, cette différence est davantage prononcée dans nos résultats. En fait, le dôme du côté dopé aux trous semblait davantage influencé par la présence des autres secteurs du hamiltonien, ceux ne contenant pas le fondamental. Ceci nous indique qu'il peut s'agir d'un effet de taille finie plutôt qu'une réelle tendance du système. Enfin, la région supraconductrice du côté dopé aux électrons s'étend sur une beaucoup plus large plage de remplissage que dans les cuprates, tout comme ce qui est obtenu dans d'autres méthodes qui ont étudié le phénomène.

Une des grandes difficultés observées avec la VCA est le traitement des discontinuité qui apparaissent à $T = 0$ dans la fonctionnelle de Potthoff. Celles-ci sont dues au fait qu'en variant différents paramètres tels que le potentiel chimique du réseau μ , le fondamental peut changer de secteur du hamiltonien, passant par exemple d'un secteur à N électrons à un secteur à $N \pm 1$ électrons. Lorsque les calculs sont faits strictement à $T = 0$, on considère un seul secteur à la fois. Ceci n'est pas possible si on veut une continuité entre $T = 0$ et $T \rightarrow 0$.

Nous avons aussi développé dans cette thèse des méthodes permettant de traiter des

amas de plus grande taille (8 à 12 sites). Nous avons d'abord suggéré la RVLM, qui est une modification de la méthode de Lanczos à température finie (FTLM) développée par Jaklič et Prelovšek [26] et modifiée par Aichhorn *et al.* (LTML) [30]. Numériquement, notre méthode donne une solution presque identique à la LTLM, mais est mieux adaptée à une situation où le hamiltonien à diagonaliser varie selon la température et le potentiel chimique considéré. Ceci est le cas par exemple avec la VCA où le changement de température implique que le champ de Weiss donnant la solution stationnaire recherchée varie aussi, ce qui implique que le hamiltonien diagonalisé sera aussi différent. Dans notre approche, nous avons suggéré de calculer explicitement les termes $e^{-\beta H/2}|\psi\rangle$. Ceci nous permet d'économiser beaucoup de temps de calcul et d'espace mémoire.

Nous avons vu aussi que la RVLM permet de calculer la fonction de Green de l'amas en utilisant R vecteurs aléatoires ($R \ll D$) dans le calcul des moyennes thermodynamiques. Lorsque R est suffisamment grand, les quantités thermodynamiques convergent. La précision des calculs augmente quand R augmente. Avec cette méthode, nous avons obtenu la chaleur spécifique pour les amas 2×4 , B10, 3×4 à demi-remplissage pour différentes valeurs de U à partir de la CPT. À fort couplage, nous obtenons le même comportement en chaleur spécifique que celui observé par d'autres méthodes qui ont été utilisées dans le passé (QMC et FTLM sur un amas). Deux pics sont présents dans la chaleur spécifique, soit un à basse température qui est associé aux excitations de spin et un autre à plus haute température associé à une délocalisation des électrons. Cependant, lorsque $U \lesssim 5$ notre méthode ne présente qu'un seul pic de chaleur spécifique, contrairement aux autres méthodes. Le pic à plus basse température est absent. Ceci est dû au fait que la CPT ne permet pas de considérer les longueurs de corrélations qui sont plus grandes que la taille de l'amas, ce qui serait nécessaire pour observer le premier pic de chaleur spécifique. Pour obtenir ce pic, nous devons utiliser la VCA et permettre l'ordre antiferromagnétique. Nous avons ainsi observé deux «pics» avec un amas 2×3 à $U = 2$, dont le premier représentait en fait une discontinuité liée à la transition de phase antiferromagnétique.

Cependant, un des problèmes associés à la RVLM est le fait que lorsque les matrices diagonalisées sont trop petites, les fluctuations statistiques deviennent importantes. Ceci devient évident lorsque l'on fait les calculs dans l'ensemble grand canonique avec un amas 2×4 . En effet, dans ces calculs, certains secteurs de plus petite taille du hamiltonien contribuent à apporter de grandes fluctuations à la moyenne thermodynamiques.

Une approche permettant de faciliter la convergence des résultats lorsque les calculs

impliquent des amas de taille «intermédiaire» est la LVM. Cette méthode, qui consiste à considérer les vecteurs obtenus par Lanczos pour faire la moyenne thermodynamique, est déjà été utilisée dans divers contextes pour faire des calculs à faible température. Nous avons montré dans ce document que pour un système de 8 sites et moins, cette approche pouvait être facilement appliquée à toutes les températures. En effet, les résultats dans ce cas correspondaient à ceux obtenus avec la RVLM. La LVM est définitivement plus efficace que la RVLM en terme de ressources nécessaires pour des systèmes de taille de 8 sites et moins. Lorsque la taille du système augmente, il est possible d'obtenir des résultats ayant convergé pour des basses températures à l'aide de la LVM, mais la température maximale pouvant être considérée diminue lorsque la taille de l'amas utilisé augmente. En général, lorsque la température est suffisamment basse, la LVM est en fait équivalente à utiliser simplement les vecteurs propres du hamiltonien, puisque les états extrêmes obtenus par la méthode de Lanczos convergent rapidement.

Avec la LVM, nous avons aussi obtenu la courbe de la température de Néel en fonction de U pour un système demi-rempli en utilisant un amas 2×4 . Nous avons observé une très faible différence comparativement aux résultats pour un amas 2×3 . En fait, à faible couplage, ces deux amas donnent des courbes de T_N pratiquement identiques. Ceci nous indique que l'amas 2×4 n'est pas significativement différent de l'amas 2×3 pour déterminer les températures de Néel.

Puisque les calculs de la VCA impliquent l'utilisation de l'ensemble grand canonique, la RVLM peut présenter certaines difficultés, dont le problème des fluctuations statistiques causées par les petits secteurs du hamiltonien. De plus, le calcul de la fonction de partition n'est pas simple. Cependant, en utilisant des amas de plus grande taille, ces fluctuations diminuent. La RVLM donne des résultats exacts dans la limite des grandes valeurs de R . Plus l'hamiltonien sera grand en dimension, moins les petits secteurs auront un poids important dans les calculs thermodynamiques (tant que l'on reste relativement près du demi-remplissage). La RVLM peut alors être utile pour des amas plus grands que 8 sites.

Afin de pouvoir traiter de plus gros amas, il serait aussi possible de combiner les différentes méthodes. En effet, chaque secteur pourrait être traité par une différente méthode. Pour les secteurs où seuls les plus bas états propres sont nécessaires, nous pouvons appliquer la LVM en s'assurant que les états obtenus ont convergé. Nous obtenons ainsi la contribution exacte à la fonction de partition. Pour les matrices plus grandes, ou lorsque la température est suffisamment grande, nous pouvons utiliser la RVLM et faire l'ap-

proximation de la contribution du secteur à la fonction de partition à partir de l'équation 5.2. Enfin, il serait aussi possible de déterminer la fonction de partition plus exactement que la fonction de Green de l'amas. En effet, nous n'avons pas à calculer la fonction de partition grand canonique servant à calculer le grand potentiel de la même façon que la fonction de partition servant au calcul de la fonction de Green de l'amas.

La LVM et la RVLM sont bien sûr limitées par la taille des amas étudiés. De l'autre côté, les principaux avantages de la LVM et RVLM résident dans le fait qu'elles ne sont pas restreintes quant aux paramètres du système considérés (remplissage, température, termes de saut, couplage), contrairement à des méthodes tel le QMC qui présente un problème de signe. De plus, ces approches ne nécessitent pas de devoir faire un prolongement analytique pour déterminer les quantités dynamiques. Enfin, nos approches ne sont pas limitées en terme de température (sauf la LVM lorsque plus de 8 sites sont utilisés). Ainsi, ces méthodes peuvent être adaptées facilement à différentes autres méthodes d'amas telle la CDMFT. Cependant, un élément qui limite nos méthodes est le fait qu'on peut les utiliser que pour une taille d'amas relativement restreinte, beaucoup plus petite que pour le QMC par exemple.

Une prochaine étape dans l'étude de la VCA à l'aide de la RVLM sera d'automatiser davantage la détermination des valeurs tel que le nombre d'itérations dans Lanczos et le nombre de vecteurs aléatoires. De plus, un des importants avantages de la RVLM est le fait qu'on peut faire du calcul parallèle avec autant de processeurs que nous désirons, puisque les calculs associés à chacun des vecteurs aléatoire sont indépendants les uns des autres.

Ce document a ainsi permis de vérifier que la VCA pouvait être appliquée à des systèmes à température finie. Il a aussi permis de mettre à l'épreuve des méthodes de résolution d'amas basées sur la méthode de Lanczos avec la CPT et la VCA, tout en vérifiant dans quelles conditions chacune des méthodes était optimale à utiliser.

Annexe A

Réseau réciproque et transformée de Fourier

En décomposant le réseau γ de N sites en un super réseau Γ d'amas identiques de L sites chacun, nous avons deux indices pour identifier chaque sites. Le site i à la position \mathbf{r}_i du réseau original γ correspond de façon unique à un couple d'indices a et m , où a correspond au site situé à la position relative \mathbf{r}_a sur l'amas et m réfère à la position de l'amas dans le super-réseau Γ , situé à \mathbf{r}_m . Ainsi, $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_a + \mathbf{r}_m$.

Nous allons désigner les réciproques du réseau γ et du super-réseau Γ par γ^* et Γ^* respectivement. Ainsi, la première zone de Brillouin du super-réseau BZ_Γ est L fois plus petite que celle du réseau BZ_γ . Ceci est illustré à la figure A où nous voyons à gauche la décomposition du réseau en amas de 10 sites, et à droite la première zone de Brillouin du réseau et celle du super-réseau.

Ainsi un vecteur d'onde \mathbf{k} du réseau réciproque γ^* peut être décomposé de façon unique en un vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ appartenant à BZ_Γ et un vecteur d'onde \mathbf{K} appartenant à la fois à BZ_γ et à la réciproque du super-réseau Γ^* , tel qu'illustré à la figure A, de sorte à pouvoir écrire :

$$\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K} \quad (\text{A.1})$$

Nous pouvons appliquer une transformée de Fourier à une fonction quelconque qui

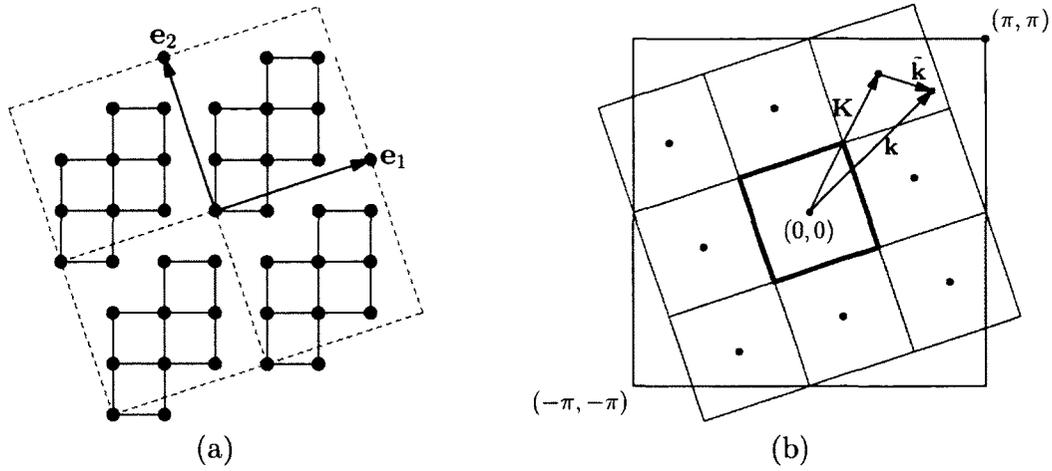


FIGURE A.1 – (a) Décomposition du réseau γ en un super-réseau d'amas de 10 sites . (b) Réseau et super-réseau réciproques de la configuration de l'image de gauche.

dépend des indices a , m ou i afin d'obtenir les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{k}) &= \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} f_i \\
 f(\tilde{\mathbf{k}}) &= \sum_m e^{-i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{r}_m} f_m \\
 f_{\mathbf{K}} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_a e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_a} f_a
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Notons que \mathbf{k} et $\tilde{\mathbf{k}}$ sont des variables quasi-continues alors que \mathbf{K} est discret avec L valeurs possibles. En effet, nous considérons N fini mais tout en étant très grand. La transformée réciproque devient ainsi

$$\begin{aligned}
 f_i &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} f(\mathbf{k}) \\
 f_m &= \frac{L}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{r}_m} f(\tilde{\mathbf{k}}) \\
 f_a &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_a} f_{\mathbf{K}}
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

On peut ainsi déduire que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} &= \delta_i \\
\frac{L}{N} \sum_m e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{r}_m} &= \delta_m \\
\frac{1}{L} \sum_a e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_a} f_{\mathbf{K}} &= \delta_a \\
\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} &= \Delta_\gamma(\mathbf{k}) \\
\frac{L}{\sqrt{N}} \sum_m e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{r}_m} &= \Delta_\Gamma(\tilde{\mathbf{k}}) \\
\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_a e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_a} f_{\mathbf{K}} &= \Delta_\gamma(\mathbf{K})
\end{aligned} \tag{A.4}$$

où δ sont les fonctions de Kronecker et Δ les fonctions de Laue. On définit ceux-ci par

$$\delta_\alpha = \begin{cases} 1 & \text{si } r_\alpha = 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{A.5}$$

et

$$\Delta_\gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{Q} \in \gamma^*} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \tag{A.6}$$

$$\Delta_\Gamma(\tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{P} \in \Gamma^*} \delta_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{P}} \tag{A.7}$$

Dans l'avant dernière relation, nous pouvons bien sûr remplacer α par i , m ou a . Ainsi, on peut appliquer différentes transformées aux opérateurs d'annihilation $c_i = c_{a,m}$:

$$\begin{aligned}
c_a(\tilde{\mathbf{k}}) &= \frac{L}{N} \sum_m e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}_m} c_{m,a} \\
c_{m,\mathbf{K}} &= \frac{1}{L} \sum_a e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_a} c_{m,a} \\
c_{\mathbf{K}}(\tilde{\mathbf{k}}) &= \frac{1}{N} \sum_{m,a} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}_m + i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_a} c_{m,a} \\
c(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_i
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Bien que $\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K} = \mathbf{k}$, nous avons tout de même que $c(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) \neq c_{\mathbf{K}}(\tilde{\mathbf{k}})$. Ces deux opérateurs sont plutôt liés entre eux par la matrice $\Lambda_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}})$ par la relation

$$c(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) = \sum_{\mathbf{K}'} \Lambda_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}}) \tag{A.9}$$

avec

$$\Lambda_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}(\tilde{\mathbf{k}}) = \sum_a e^{-i\mathbf{r}_a \cdot (\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K} - \mathbf{K}')} \tag{A.10}$$

Cette dernière relation se démontre facilement en utilisant les relations A.2, A.3 et A.4.

A.1 Représentation mixte d'un opérateur à deux indices

Lorsqu'on veut faire la transformée d'un opérateur O_{ij} qui utilise deux indices de site, nous avons différentes façons de l'écrire. Étant donnée la symétrie de translation du réseau, nous pouvons écrire en général :

$$\mathcal{O}(\mathbf{k}) = \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \mathcal{O}_{i0} \tag{A.11}$$

La représentation que nous favoriserons dans ce travail sera celle où nous réalisons la transformée de Fourier sur les indices d'amas, tout en gardant les indices de site sur l'amas. On considère $\mathcal{O}_{ij} = \mathcal{O}_{am,bn}$, avec $i \rightarrow a, m$ et $j \rightarrow b, n$. Puisque nous avons symétrie de translation du super-réseau, la transformée de Fourier sur les indices m et n

dépendra d'un seul vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$. La représentation mixte que nous utiliserons est

$$\mathcal{O}_{ab}(\tilde{\mathbf{k}}) = \sum_m e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}_m} \mathcal{O}_{am,b0} \quad (\text{A.12})$$

Cette forme sera entre autres pratiques lorsqu'on veut réaliser une trace, telle que celle de la fonction de Green avec un opérateur. Par exemple,

$$Tr[\mathcal{O}G] = \sum_{ij} \mathcal{O}_{ij} G_{ji} = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{ab} \mathcal{O}_{ab}(\tilde{\mathbf{k}}) G_{ba}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (\text{A.13})$$

Bibliographie

- [1] J. G. Bednorz et K. A. Müller, Z. Phys. B : Condens. Matter **64**, (1986).
- [2] L. F. Mattheiss, Phys. Rev. Lett. **58**, 1028 (1987).
- [3] N. P. Armitage, P. Fournier, et R. L. Greene, Rev. Mod. Phys. **82**, 2421 (2010).
- [4] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [5] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **276**, 238 (1963).
- [6] M. B. J. Meinders, H. Eskes, et G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **48**, (1993).
- [7] A. Macridin, M. Jarrell, T. Maier, et G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **71**, 134527 (2005).
- [8] A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **56**, 11 678 (1997).
- [9] N. D. Mermin et H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [10] G. Shirane *et al.*, Phys. Rev. Lett. **59**, (1987).
- [11] M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane, et Y. Endoh, Rev. Mod. Phys. **70**, (1998).
- [12] E. H. Lieb et F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [13] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, et M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [14] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, (1963).
- [15] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. **134**, A923 (1964).
- [16] Y. M. Vilk, L. Chen, et A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. B **49**, 13267 (1994).
- [17] J. Hirsch et R. Fye, Phys. Rev. Lett. **56**, (1986).
- [18] S. M. A. Rombouts, K. Heyde, et N. Jachowicz, Phys. Rev. Lett. **82**, 4155 (1999).
- [19] M. H. Hettler *et al.*, Phys. Rev. B **58**, 7475 (1998).

- [20] M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell, et H. R. Krishnamurthy, *Phys. Rev. B* **61**, 12739 (2000).
- [21] T. A. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, et M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, (2005).
- [22] J. D. Reger et A. P. Young, *Phys. Rev. B* **37**, 5978 (1988).
- [23] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991).
- [24] W. Nolting, *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **255**, 25 (1972).
- [25] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, et B. P. Flannery, *Numerical Recipes 3rd Edition : The Art of Scientific Computing*, 3rd ed. (Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2007).
- [26] J. Jaklic et P. Prelovsek, *Phys. Rev. B* **49**, 5065 (1994).
- [27] T. Iitaka et T. Ebisuzaki, *Phys. Rev. B* **69**, (2004).
- [28] M. E. Muller, *Commun. ACM* **2**, 19 (1959).
- [29] A. C. Davidson et D. V. Hinkley, *Bootstrap Methods and their Application* (Cambridge University Press, Cambridge, ADDRESS, 1997).
- [30] M. Aichhorn, M. Daghofer, H. G. Evertz, et W. von der Linden, *Phys. Rev. B* **67**, 161103 (2003).
- [31] D. Plouffe, *Étude du modèle de Hubbard à température finie par la théorie des perturbations intermas*, mémoire de maîtrise, Université de Sherbrooke, 2004.
- [32] M. Capone, L. de' Medici, et A. Georges, *Phys. Rev. B* **76**, 245116 (2007).
- [33] D. Sénéchal, D. Perez, et M. Pioro-Ladrière, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 522 (2000).
- [34] D. Sénéchal, D. Perez, et D. Plouffe, *Phys. Rev. B* **66**, (2002).
- [35] M. Potthoff, M. Aichhorn, et C. Dahnken, *Phys. Rev. Lett.* **91**, (2003).
- [36] M. Potthoff, *Adv. Solid State Phys.* **45**, 135 (2006).
- [37] N. E. Bickers, D. J. Scalapino, et S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 961 (1989).
- [38] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, et W. Hanke, *Phys. Rev. B* **74**, 024508 (2006).
- [39] A. L. Fetter et J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill College, San Francisco, 1971).
- [40] W. Romberg, *Norske Vid. Sels. Forh* **28**, 30 (1955).
- [41] D. Eichenberger et D. Baeriswyl, *Phys. Rev. B* **76**, (2007).
- [42] J. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).

- [43] P. Sahebsara et D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136402 (2008).
- [44] Y. M. Vilk et A.-M. Tremblay, *J. Phys. I France* **7**, 1309 (1997).
- [45] S. Chakravarty, B. I. Halperin, et D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989).
- [46] H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **64**, 1445 (1990).
- [47] S. Roy, thèse de doctorat, Université de Sherbrooke, 2007.
- [48] O. K. Andersen, A. I. Liechtenstein, O. Jepsen, et F. Paulsen, *J. Phys. and Chem. Solids* **56**, 1573 (1995).
- [49] S. S. Kancharla *et al.*, *Phys. Rev. B* **77**, 184516 (2008).
- [50] C. C. Tsuei et J. R. Kirtley, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 969 (2000).
- [51] A. H. Nevidomskyy, C. Scheiber, D. Sénéchal, et A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **77**, 064427 (2008).
- [52] D. Zanchi et H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **61**, 13609 (2000).
- [53] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, et J. Keller, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1524 (2000).
- [54] M. Jarrell, T. Maier, M. H. Hettler, et A. N. Tahvildarzadeh, *Europhys. Lett.* **56**, 563 (2001).
- [55] T. A. Maier *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 237001 (2005).
- [56] D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois, et A.-M. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **94**, (2005).
- [57] D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **92**, (2004).
- [58] B. Kyung, V. Hankevych, A.-M. Daré, et A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147004 (2004).
- [59] J. Bonca et P. Prelovsek, *Phys. Rev. B* **67**, 085103 (2003).
- [60] T. Paiva, R. T. Scalettar, C. Carey Huscroft, et A. K. McMahan, *Phys. Rev. B* **63**, 125116 (2001).