

Nouvelles approches en théorie du champ moyen
dynamique : le cas du pouvoir thermoélectrique et
celui de l'effet orbital d'un champ magnétique

par

Louis-François Arsenault

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, février 2013



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: 978-0-494-93222-3

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-93222-3

NOTICE:

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

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

AVIS:

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

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

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

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

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

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

Canada

Composition du jury

Le 4 février 2013, le jury a accepté la thèse de M. Arsenault dans sa version finale.

Prof. Claude Bourbonnais
Département de physique
Président-rapporteur

Prof. André-Marie Tremblay
Département de physique
Directeur de recherche

Prof. Louis Taillefer
Département de physique

Michel Ferrero, chercheur CNRS
Centre de Physique Théorique (CPHT), École Polytechnique
Paris, France
membre externe

À mes parents et ami(e)s

*Random blobs of power expressed as that which we all disregard,
Ordered states of nature on a scale that no one thinks about,
Don't speak to me of anarchy of peace or calm revolt,
Man, we're in a play of slow decay orchestrated by Boltzmann,*

*It's entropy, it's not a human issue,
Entropy, it's a matter of course,
Entropy, energy at all levels,
Entropy, from it you can not divorce
And your pathetic moans of suffrage tend to lose all significance*

*Extinction, degradation,
The natural outcomes of our ordered lives,
Power, motivation; temporary fixtures for which we strive,
Something in our synapses assures us we're ok,
But in our disequilibrium we simply can not stay,*

It's entropy ...

*A solid proposition from a man unkempt as I,
My affectations I can not rectify,
But we are out of equilibrium unnaturally,
A pang of consciousness of death,
And then you will agree,*

*Entropy par Bad Religion 1990
Cliquez pour écouter*

Sommaire

Les applications reliées à la génération d'énergie motivent la recherche de matériaux ayant un fort pouvoir thermoélectrique (S). De plus, S nous renseigne sur certaines propriétés fondamentales des matériaux, comme, par exemple, la transition entre l'état cohérent et incohérent des quasi-particules lorsque la température augmente. Empiriquement, la présence de fortes interactions électron-électron peut mener à un pouvoir thermoélectrique géant. Nous avons donc étudié le modèle le plus simple qui tient compte de ces fortes interactions, le modèle de Hubbard. La théorie du champ moyen dynamique (DMFT) est tout indiquée dans ce cas. Nous nous sommes concentrés sur un système tridimensionnel (3d) cubique à face centrée (fcc), et ce, pour plusieurs raisons. A) Ce type de cristal est très commun dans la nature. B) La DMFT donne de très bons résultats en 3d et donc ce choix sert aussi de preuve de principe de la méthode. C) Finalement, à cause de la frustration électronique intrinsèque au fcc, celui-ci ne présente pas de symétrie particule-trou, ce qui est très favorable à l'apparition d'une grande valeur de S . Ce travail démontre que lorsque le matériau est un isolant à demi-remplissage à cause des fortes interactions (isolant de Mott), il est possible d'obtenir de grands pouvoirs thermoélectriques en le dopant légèrement. C'est un résultat pratique important. Du point de vue méthodologique, nous avons montré comment la limite de fréquence infinie de S et l'approche dite de Kelvin, qui considère la limite de fréquence nulle avant la limite thermodynamique pour S , donnent des estimations fiables de la vraie limite continue (DC) dans les domaines de température appropriée. Ces deux approches facilitent grandement les calculs en court-circuitant la nécessité de recourir à de problématiques prolongements analytiques. Nous avons trouvé que la méthode de calcul à fréquence infinie fonctionne bien lorsque les échelles d'énergie sont relativement faibles. En d'autres termes, cette approche donne une bonne représentation de S lorsque le système devient cohérent. Les calculs montrent aussi que la formule Kelvin est précise lorsque la fonction spectrale des électrons devient incohérente, soit à plus haute température. Dans la limite Kelvin, S est essentiellement

l'entropie par particule, tel que proposé il y a longtemps. Nos résultats démontrent ainsi que la vision purement entropique de S est la bonne dans le régime incohérent, alors que dans le régime cohérent, l'approche à fréquence infinie est meilleure. Nous avons utilisé une méthode à la fine pointe, soit le Monte-Carlo quantique en temps continu pour résoudre la DMFT. Pour permettre une exploration rapide du diagramme de phase, nous avons dû développer une nouvelle version de la méthode des perturbations itérées pour qu'elle soit applicable aussi à forte interaction au-delà de la valeur critique de la transition de Mott.

Un autre sujet a aussi été abordé. L'effet orbital du champ magnétique dans les systèmes électroniques fortement corrélés est une question très importante et peu développée. Cela est d'autant plus essentiel depuis la découverte des oscillations quantiques dans les supraconducteurs à haute température (haut- T_c). Par désir de développer une méthode la moins biaisée possible, nous avons dérivé la DMFT lorsqu'un champ se couplant à l'opérateur énergie cinétique par la substitution de Peierls est présent. Ce type d'approche est nécessaire pour comprendre entre autres l'effet de la physique de Mott sur des phénomènes tels que les oscillations quantiques. Nous avons obtenu un résultat très important en démontrant rigoureusement que la relation d'auto-cohérence de la DMFT et le système intermédiaire d'impureté quantique restent les mêmes. L'effet du champ peut être contenu dans la fonction de Green locale, ce qui constitue la grande différence avec le cas habituel. Ceci permet de continuer à utiliser les solveurs d'impuretés standards, qui sont de plus en plus puissants. Nous avons aussi développé la méthode pour le cas d'un empilement de plans bidimensionnels selon z , ce qui permet d'étudier l'effet orbital du champ dans des nanostructures et même dans les matériaux massifs, si le nombre de plans est suffisant pour obtenir la limite tridimensionnelle.

Mots clés : Pouvoir thermoélectrique, Théorie du Champ Moyen Dynamique, Modèle de Hubbard, Effet orbital du champ magnétique, Électrons fortement corrélés, Matériaux quantiques, Théorie des perturbations itérées

Remerciements

Les remerciements sont toujours difficiles à écrire ; on recherche à ne pas oublier personne et, à la fin d'un si long parcours qu'est le doctorat (surtout le mien), tant de personnes ont compté.

Je voudrais en premier lieu remercier mon directeur de recherche André-Marie Tremblay pour la confiance qu'il m'a accordée, la grande liberté qu'il laisse à ses étudiants, sa grande disponibilité et sa gentillesse. Il était toujours là pour m'aider quand le besoin s'en faisait sentir. J'ai eu une chance énorme au cours de mes études supérieures, maîtrise et doctorat, d'avoir des superviseurs qui m'ont supporté et aidé. J'aimerais aussi remercier Sriram Shastry avec qui j'ai pu avoir une collaboration fructueuse et qui m'a accueilli à l'Université de Californie à Santa Cruz.

Je souhaite remercier mes collègues présents et passés. À Rutgers, Jean-François, Haile et Tianjing (amie et coloc plus que collègue). À Sherbrooke, Shila, Giovanni, Syed Hassan, Dominique, Maxime etc. Un merci particulier à Patrick Sémon pour ses codes, essentiels à mon travail. Un grand merci à Dominic Bergeron, collègue et coéquipier de lab au baccalauréat avec qui j'ai partagé le même groupe à la maîtrise et au doctorat, car il était déjà dans le groupe que j'ai joint à Sherbrooke quand j'ai quitté Rutgers. Par plusieurs concours de circonstances, Dominic a souvent résolu astucieusement divers problèmes pour lui-même avant que ceux-ci se concrétisent pour moi. Grâce à son aide, j'ai souvent pu régler prestement plusieurs difficultés que j'ai rencontrées durant cette thèse sans y passer des semaines de frustration.

Durant la dernière année de cette thèse, la question générale de l'éducation supérieure au Québec s'est posée de façon plutôt bruyante, pour utiliser un euphémisme. J'ai souvent eu l'impression que le manichéisme mettant prétendument en opposition les «carrés

rouges» d'un côté et le «vrai monde» de l'autre que certains ont semblé vouloir établir, tendait à présenter une image de la société où les parents ne désirent pas que leurs enfants réussissent mieux et avec moins de difficultés. Dans cette perspective, l'éducation supérieure n'est accessible qu'au prix d'un investissement purement individuel. Cette crise a montré la dominance dans l'espace public de l'opinion et de l'analyse des adeptes du «gros bon sens». En tant que scientifique, j'ai très tôt été à même de témoigner de l'échec commun de cette caractéristique prétendument humaine appelée «gros bon sens», intuition ou raison, dépendamment du milieu où elle est utilisée et ce, à maintes reprises. Cela démontrant que la domination médiatique de commentateurs n'ayant aucune expertise précise est problématique et représente un danger à ne pas minimiser. En tant qu'amoureux des mathématiques, je fus ahuri de l'utilisation d'arguments basés sur des valeurs moyennes sans préciser l'écart type et sans même expliquer que celui-ci existe et qu'une valeur moyenne seule ne veut absolument rien dire si les fluctuations autour de celle-ci ne sont pas spécifiées. L'absence constante de définition du zéro ou des unités était la norme. Peut-être ont-ils raison, bien que je sois convaincu du contraire, mais cette utilisation déficiente des outils mathématiques est indécente. Toute cette situation m'a grandement peiné, mais cela m'a aussi permis d'apprécier encore plus la chance inouïe que j'ai eu d'avoir les parents qui sont les miens. D'abord un grand-père avec une quatrième année qui souhaitait ardemment poursuivre des études, mais qui par la suite, selon ses moyens, a donné à ses enfants toute l'éducation possible ; ensuite jusqu'à mes parents qui, eux aussi n'ont rien épargné pour que je puisse obtenir l'éducation dont je rêvais. Ma chance n'a pas de prix. L'opportunité que j'ai eue au cours de mon baccalauréat de pouvoir seulement me concentrer sur celui-ci a été déterminante. Évidemment, sans mes parents, cela n'aurait jamais été possible. Parce qu'avec 5 000 \$ de travail d'été à travailler sur des projets de recherche plus 2 400 \$ de prêt par année, en divisant par 12, par 30 et par 24, cela donne 0,85 \$/min ou si on préfère, un salaire horaire de 3,55 \$ à 40 heures par semaine pour habiter un appartement, se nourrir, se vêtir, payer ses frais de scolarité ... Par conséquent, les voyages dans le Sud, c'était limité à des safaris d'observation de la faune locale sur le boulevard Taschereau à Brossard. Ce concept profond de l'importance de l'éducation est le plus important legs que mes parents m'ont laissé. Jamais je ne pourrai redonner tout ce qu'ils ont fait pour moi et je ne l'oublierai pas le jour où je pourrai, à mon tour, contribuer à l'éducation de quelqu'un, qu'il soit de ma famille ou seulement un membre de cette société. Je n'oublierai jamais ce désir de permettre à tous d'avoir cette possibilité de poursuivre ses rêves.

Les derniers mois ont été riches en actions et émotions dans ma vie personnelle. Merci infiniment à Marie et Gizmo qui m'ont accueilli et offert un toit pendant plusieurs mois. Leur altruisme, leur générosité et leur gentillesse est stratosphérique et j'aimerais pouvoir les remercier plus. Merci à Bianca de m'avoir laissé aussi habiter dans son appartement pour les derniers moments avant mon déménagement dans la Grosse Pomme. Un merci spécial à mes grands amis Valérie, Simon-Pierre et (même!) Fred pour être toujours là. Merci à Marianne qui a partagé ma vie durant la majeure partie de mon doctorat. Merci aux différents cafés qui sont devenus mon bureau ... J'adresse peu la parole aux autres clients réguliers, mais merci à Annie-Claude de m'y avoir tenu compagnie si souvent durant ces longues heures à survivre sur ces nombreux cafés au lait dans les derniers mois. Le concept de pause shooter devrait certainement être intégré aux guides informatifs sur «Comment bien étudier»! Je tiens de plus à remercier tous mes autres amis, en particulier la gang d'Alma, certains que je vois souvent, d'autres que je vois rarement, Guillaume Martel, Pierre-Luc Lajoie, Charles Laplante, François Bouchard, Pierre Lafortune, Fabien Tremblay, Jean-François Baron, Chantale Laprise, Martin Demers (un almatois *Honoris Causa*), David Harvey et tous ceux que j'oublie (désolé!) et les membres de ma famille qui, d'une façon ou d'une autre, ont facilité mon travail.

Finalement, je voudrais remercier les professeurs Louis Taillefer, Claude Bourbonnais et Michel Ferrero d'être membres de mon jury et le CRSNG pour son appui financier.

Table des matières

Sommaire	iv
Table des matières	ix
Liste des figures	xiii
Introduction	1
Perspective sur les systèmes électroniques fortement corrélés et les phénomènes émergents	1
Problématiques nouvelles	8
Importance du transport et plus spécifiquement du pouvoir thermoélectrique .	12
1 Méthodologie	18
1.1 Fonctions de Green	18
1.2 DMFT à un site en l'absence de brisure de symétrie	21
1.2.1 Dérivation découlant de la fonctionnelle de Luttinger-Ward	22
1.2.2 Approche à la Vollhardt	24
1.2.3 Dérivation à partir de la méthode de la cavité	27
1.3 Solutionneurs d'impuretés	32
1.3.1 Monte Carlo quantique en temps continu	32
1.3.2 Théorie des perturbations itérées	37
1.4 Transport	40
1.4.1 Définition générale	40
1.4.2 Prolongement analytique	49
1.4.3 Évaluation de la limite DC en fréquences réelles	51
1.5 Approximations pour le pouvoir thermoélectrique	52
1.5.1 Limite haute fréquence; S^*	53

1.5.2	Limite lente ; S_{Kelvin}	64
1.5.3	Approximation DC sans prolongement analytique	69
2	Article : IPT-D, une nouvelle théorie des perturbations itérées	74
I	Introduction	76
II	Modèle, DMFT et solveur d'impuretés	77
A	Modèle et DMFT	77
B	CTQMC	78
C	IPT	78
III	Insuffisance de IPT	78
A	Extraction des paramètres du liquide de Fermi	78
B	Comportement prévu, tel qu'obtenu par CTQMC	79
C	Insuffisance de IPT- n_0	80
IV	IPT avec double occupation, IPT- D	80
A	Valeurs exactes et naïves de la double occupation à fort couplage	81
B	Précision des paramètres du liquide de Fermi de IPT- D	82
C	Précision de la densité d'états et du potentiel chimique	82
D	Énergie et chaleur spécifique	83
E	Résistivité DC	85
F	Conductivité optique	87
V	Système multi-orbital	87
VI	Conclusion	88
A	Intégrateur	88
B	Implémentation de IPT- D	90
C	Calcul de $N_0(\varepsilon)$ et de $X(\varepsilon)$	92
D	Conductivité optique	92
3	Article : Pouvoir thermoélectrique et isolants de Mott dopés	95
I	Introduction	97
II	Modèle et méthodes	98
A	DMFT	98
B	Pouvoir thermoélectrique	98
III	Résultats	100
A	Limite de bande	100
B	Limite faible et grand couplage	100

<i>Table des matières</i>	xi
IV Autres mesures du pouvoir thermoélectrique	101
V Sommaire	102
A Changement de signe du pouvoir thermoélectrique autour de $n = 1$ pour $U = 32t$	103
B S_{Kelvin} à $U = 32t$	104
4 Compléments aux résultats de l'article du Chapitre 3	106
4.1 Pouvoir thermoélectrique : résumé pour un expérimentateur à la recherche de grands S	106
4.2 Précision sur la transition cohérence-incohérence	108
4.3 Retour sur l'importance de l'asymétrie à basse température	111
5 DMFT et champ magnétique orbital	122
5.1 Ajout d'un champ magnétique orbital	123
5.2 Cas sans interaction	125
5.3 Cas avec interactions	128
5.4 DMFT dépendante du champ magnétique	136
5.5 Ajout d'un champ magnétique dans le plan pour N plans 2d couplés et limite 3d	143
Conclusion	147
Annexe A Compléments de calculs pour S^*	150
A.1 Limite $T \rightarrow 0$ de L_{12}^*	150
A.2 Comportement pour un liquide de Fermi	155
A.2.1 L_{12}^{*1}	155
A.2.2 L_{11}^{*0}	156
Annexe B Cubique à face centrée dans le cas sans interaction	158
B.1 Température de Fermi	158
B.2 Dérivées de la Densité d'états et de la fonction de transport	165
B.3 Lorentzienne	170
Annexe C Prolongement analytique par approximants de Padé	171
Annexe D Introduction à la méthode de l'entropie maximale	173

<i>Table des matières</i>	xii
Annexe E Comportement asymptotique de la fonction d'hybridation	176
E.1 Comportement asymptotique à $\mathbf{B} = 0$	176
E.2 Comportement asymptotique à \mathbf{B} fini	178
Bibliographie	188

Liste des figures

- 1 Comportement universel du pouvoir thermoélectrique à $290K$ en fonction de la densité de trous dans le plan P_{pl} , pour différentes familles de cuprates dopés aux trous. Ils exhibent tous un changement de signe autour de $P_{pl} = 0.25$. Au-dessus de la ligne horizontale pleine, S obéit la forme fonctionnelle $S^{290}(P_{pl}) = 392e^{-19.7P_{pl}}$ pour $0.01 < P_{pl} < 0.21$. Au-dessous de la ligne horizontale pleine, $S^{290}(P_{pl}) = 40.47 - 163.4P_{pl}$ pour $0.21 < P_{pl} < 0.34$. La figure est tirée de Phys. Rev. B **82**, 214503 (2010) qui l'ont eux-mêmes tirée de Phys. Rev. B **75**(18), 184520 (2008) 14
- 2 Pouvoir thermoélectrique en fonction de la température pour $FeSi_{1-x}Ge_x$ ($x = 0.05, 0.25$: gauche, $x = 0$: droite). La figure insérée montre S/T en fonction de T^2 pour $x = 0.05$ pour des T de 2 à $25K$. La figure est tirée de Physica B : Condensed Matter **230**, 784 (1997) 15
- 3 (a) Dépendance en température du pouvoir thermoélectrique des Fermions lourds YbT_2Zn_{20} où T est Fe, Ru, Os, Ir, Rh et Co. La figure insérée est $S(T)$ vs $\log(T)$ (ici T la température) pour Fe, Rh et Co.(b) Zoom à basse température. Figure insérée pour $T < 8K$. La figure est tirée de Phys. Rev. B **86**, 115110 (2012) 16
- 4 Pouvoir thermoélectrique dans le plan de $NaCo_2O_4$ cristallin. La figure insérée montre le coefficient de Hall dans le plan (R_H) pour le même cristal. La figure est tirée de Phys. Rev. B **56**, R12685 (1997) 17
- 1.1 Approximation de la cavité. (a) Le réseau original (b) Le réseau original est reformulé comme celui-ci moins un site plus un site seul. Les bons couplages sont conservés et donc le problème est toujours exact. (c) Le réseau sans le site est remplacé par un champ moyen dynamique soit un bain d'électrons sans interactions couplé au site seul. 28

- 1.2 $\Omega_n \chi_{ab}(\Omega_n)$ et $\chi_{11}(\Omega_n)$ en fonction de Ω_n à basse fréquence pour $U = 32t$, $n = 0.80$ et $\beta = 25$ pour le modèle de Hubbard à une bande sur le réseau fcc solutionné avec la DMFT à un site en utilisant la CTQMC. 71
- 2.1 Non-interacting density of states for the FCC lattice with nearest-neighbor hopping only. The large particle-hole asymmetry caused by frustration is apparent. 78
- 2.2 (Color online) Results obtained with CTQMC as impurity solver are plotted as a function of density and shown in blue with circles and line for $U = 8$ and in black with dots and line for $U = 32t$. In all numerical results, energy units are such that $t = 1$. Boltzmann's constant and the lattice spacing are also taken as unity. We obtain the zero-frequency limit from a poor man's approach : we take $\beta t = 25, 50$ and 75 and use the value of the function at the lowest Matsubara frequency in the three cases to perform the extrapolation. (a) Check for Luttinger's theorem : The effective chemical potential $\tilde{\mu} = \mu - \Sigma'(0)$ is equal to the non-interacting chemical potential shown in red except at half-filling where there is a Mott gap for $U = 32t$. (b) At $U = 32t$ the imaginary part of the self-energy at zero frequency $\Sigma''(0)$ should be zero away from half-filling and infinite at half-filling. (c) The single-particle spectral weight Z vanishes only at $n = 1$, $U = 32t$ where there is a Mott gap. 79

- 2.3 (Color online) Fermi liquid parameters as a function of density. Zero frequency results are obtained with the same extrapolation method as in Fig. 2. (a) Check of Luttinger's theorem. The effective chemical potential $\tilde{\mu} = \mu - \Sigma'(0)$ should equal the non-interacting value, shown in red, when the theorem is satisfied. For $U = 8t$, the brown asterisks (*) obtained with IPT $n = n_0$ satisfy the theorem. For $U = 32t$ results for three different methods are shown : in kaki (\square) for IPT $n = n_0$, in cyan (*) for IPT D_{naive} and in magenta (\diamond) for IPT $\langle D \rangle_{CTQMC}$. (b) $\Sigma''(0)$ is plotted for $U = 32t$ in magenta (\diamond) for IPT $\langle D \rangle_{CTQMC}$ as above, and compared with the CTQMC results shown previously in Fig.2.2 (black dots joined by a line). (c) Quasiparticle spectral weight Z computed for different methods and displayed with the same symbols as in (a). We compare with the CTQMC results of Fig. 2, namely blue symbols (\circ) with line for $U = 8t$ and black symbols (\cdot) with line for $U = 32t$. The results for IPT $n = n_0$ at $U = 32t$ are un-physical since they predict an insulator away from half-filling. 80
- 2.4 (Color online) CTQMC results at $U = 32t$ for double occupancy $D - D_{naive}$ plotted as a function of temperature. We define $D_{naive} = 0$ for fillings $n < 1$ and $D_{naive} = n - 1$ for $n > 1$. The various densities are represented by different symbols : $n = 0.2$ (black (\circ)), 0.4 (blue (\times)), 0.6 (red (\square)), 0.8 (green (\diamond)), 1.0 (yellow ($+$)), 1.2 (cyan (∇)), 1.4 (magenta (Δ)), 1.6 (brown (\triangleleft)) and 1.8 (kaki (\star)). The largest deviations from the naive value, occurring close to $n = 1$, are less than 10^{-2} in absolute value. 81
- 2.5 (Color online) Double occupancy D as a function of density obtained from CTQMC for $U = 32t$ for three temperatures : $\beta = 25/t$ (black (\square)), $\beta = 10/t$ (blue (\circ)) and $\beta = 0.5/t$ (red (\cdot)). On this scale, the naive value of D is very accurate. The inset is a zoom for densities $n \leq 1$ 81
- 2.6 (Color online) Density of states for $n = 0.84$, $\beta t = 25$ and $U = 32t$ obtained with three methods : black (solid line) with CTQMC maxent, blue (- -) with IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$, and red (-.) with IPT- D_{naive} . (b) is a zoom of (a) around $\omega = 0$. The value at zero frequency is improved when a more accurate value of D is used in IPT. 83

- 2.7 (Color online) Chemical potential as a function of temperature for different IPT approximations, compared with the reference CTQMC calculations as black dots with line obtained for $U = 32t$ and different densities : (a) $n = 0.80$, (b) $n = 1.2$ and (c) $n = 0.84$. The three different IPT approximations are given in kaki (\square) for IPT- n_0 , in cyan (\star) for IPT- D_{naive} , and in magenta (\diamond) for IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$. The latter approximation in magenta (\diamond) is best, having a more or less doping and temperature independent offset $\delta\mu/t \sim 0.5$ when compared with the reference CTQMC in black. 83
- 2.8 (Color online) Energy as a function of temperature obtained from IPT- D (solid lines) and CTQMC (dashed lines) for $U = 32t$. (a) Densities equal to, or below half-filling $n = 0.2$ (black (\circ)), 0.4 (blue (\times)), 0.6 (red (\square)), 0.8 (green (\diamond)), 0.84 (cyan (∇)), 0.88 (magenta (Δ)), 0.92 (brown (\triangleleft)) and 1.0 (kaki (\star)). For densities above half-filling, displayed in (b), $n = 1.08$ (black (\circ)), 1.2 (blue (\times)), 1.4 (red (\square)), 1.6 (green (\diamond)), 1.8 (cyan (∇)), the quantity UD_{naive} is subtracted from the energy to allow the results to fit on the same scale. (c) is a zoom for $n = 1.08$ and (d) a zoom for $n = 1.4$. 84
- 2.9 (Color online) Specific heat at constant filling as a function of temperature for $U = 32t$. (a) Results from IPT- D (solid line) for densities below half-filling : $n = 0.2$ (black (\circ)), 0.4 (blue (\times)), 0.6 (red (\square)), 0.8 (green (\diamond)), 0.84 (cyan (∇)), 0.88 (magenta (Δ)), 0.92 (brown (\triangleleft)) and 1.0 (kaki (\star)), (b) Specific heat from IPT- D (solid line) for densities above half-filling $n = 1.08$ (black (\circ)), 1.2 (blue (\times)), 1.4 (red (\square)), 1.6 (green (\diamond)), 1.8 (cyan (∇)), (c) Comparison between IPT- D as solid lines and CTQMC as dashed lines for $n = 0.6$ (red (\square)), 0.8 (green (\diamond)) and 0.84 (cyan (∇)). The peak positions and shape coincide, even though the absolute values differ. In this case, since CTQMC values come from differentiation of Monte Carlo data, there is a rather large uncertainty, especially for peaks. . . . 85
- 2.10 Transport function $X(\varepsilon) = \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$, as calculated in Appendix C. 86

2.11	(Color online) Resistivity as a function of temperature for $U = 32t$ as calculated by IPT- D for different values of density : $n = 0.2$ (black (\circ)), 0.4 (blue (\times)), 0.6 (red (\square)), 0.8 (green (\diamond)), 1.2 (cyan (∇)), 1.4 (magenta (\triangle)), 1.6 (brown (\triangleleft)) and 1.8 (kaki (\star)). The resistivity are largest close to half-filling where they exhibit low coherence temperatures.	86
2.12	(Color online) Optical conductivity for $U = 32t$ and $n = 0.80$, as calculated from IPT- D for three different temperatures using two analytical continuation approaches for each temperature. The maximum entropy results are represented with solid lines and the Padé analytical continuations with dashed lines. The broadest zero-frequency peak (red (\times)) is for the largest temperature, $\beta = 1/t$, and the narrowest one (black (\circ)) for the lowest temperature, $\beta = 25/t$. The intermediate case, $\beta = 2.3/t$ is in blue (\square). The features in the optical conductivity can be identified with transitions between the Fermi level and peaks in the single-particle density of states.	87
2.13	The special points for a 3d Gaussian quadrature of fifth order over a cube of length $2h$	89
2.14	Flow chart for the impurity solver loop in IPT. There is also an outer loop for Δ , see text.	90
2.15	Illustration of the Monte Carlo integration scheme used to obtain $N_0(\varepsilon)$ and $X(\varepsilon)$	92
3.1	(Color online) S in $\mu V/K$ for $U = 0$ as a function of T/t for different values of density : $n = 0.2$ (black (\circ)), 0.4 (blue (\times)), 0.6 (red (\square)), 0.8 (green (\diamond)), 1.2 (cyan (∇)), 1.4 (magenta (\triangle)), 1.6 (brown (\triangleleft)) and 1.8 (khaki (\star)).	99
3.2	(Color online) S_{Kubo} , S_{Kelvin} and S^{**} as a function of T/t as calculated with IPT for Kubo and CTQMC for Kelvin and star for two values of interaction $U = 8t$ (a), (b), (c) and $U = 32t$ (d), (e), (f) for different values of density : $n = 0.4$ (black (\circ)), 0.6 (blue (\star)), 0.8 (red (\square)), 0.84 (black - - (\triangleleft)), 0.88 (blue - - (\star)), 0.92 (red - - (\times)), 1.08 (green - - (\triangleright)), 1.2 (green (\diamond)), 1.4 (cyan (∇)) and 1.6 (magenta (\triangle)).	100

3.3	(Color online) $Sgn(S)/T_f^{(1)}$ for $U = 8t$ (a) and $U = 32t$ (b) as a function of the density with the non-interacting value (black solid line) : S_{Kubo} (blue (\square)), S_{Fermi} with only the first term (green (*)), S_{Kelvin} (brown (\diamond)) and S^{**} (red (\circ)).	102
3.4	(Color online) S_{Kubo} (black -), S_{Kelvin} (blue - -), S_{MH} (red -.) and S^{**} (magenta \circ CTQMC) in $\mu V/K$ for $U = 32t$ as a function of density for $T = 2t$. In order to calculate S_{Kelvin} we used IPT results. As shown in Fig. 3.5, in this temperature range, IPT- D gives essentially the same $\mu(T)$ as CTQMC.	103
3.5	(Color online) S_{Kelvin} as a function of T/t as calculated with IPT (-) and CTQMC (-.) for $U = 32t$. In (a) values of filling farther away from $n = 1$ and (b) fillings closest to $n = 1$: $n = 0.4$ (black (\circ)), 0.6 (blue (*)), 0.8 (red (\square)), 0.84 (black - - (\triangleleft)), 0.88 (blue - - (*)), 0.92 (red - - (\times)), 1.08 (green - - (\triangleright)) 1.2 (green (\diamond)), 1.4 (cyan (∇)) and 1.6 (magenta (\triangle)). . .	105
4.1	Pouvoir thermoélectrique en fonction de la densité pour un isolant de Mott dopé à large bande interdite (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande) pour différentes températures : (noir) $T = 0.1t$, (bleu) $T = 0.25t$, (rouge) $T = t$ et (magenta) $T = 2t$. Le cas de la limite atomique est illustré par la courbe noire points-tirets (-.)	112
4.2	Résistivité en fonction du remplissage pour un isolant de Mott dopé à large bande interdite (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande) dans le régime incohérent $T = 2t$	113
4.3	L_{12} en fonction du remplissage pour un isolant de Mott dopé à large bande interdite (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande) dans le régime incohérent $T = 2t$	114
4.4	Densité d'états pour différentes températures (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande et $n = 0.80$). La bande de Hubbard supérieure est située à des fréquences plus élevées qui ne sont pas tracées ici.	115
4.5	Fonction spectrale pour différentes valeurs de ϵ_k pour plusieurs températures dans le cas $U = 32t$ et $n = 0.80$. Les lignes pointillées rouges correspondent à $\pm 5T$	116

4.6	Fonction $S(\varepsilon, \omega)$ pour différentes valeurs de ε pour plusieurs températures dans le cas $U = 32t$ et $n = 0.80$. Les lignes pointillées rouges correspondent à $\pm 5T$	117
4.7	Pouvoir thermoélectrique en fonction de la densité à $T = 2t$ pour $U = 8t$ (noir) et $U = 32t$ (rouge tirets-tirets)	118
4.8	$1/L_{11}$ en fonction de la densité à $T = 2t$ pour $U = 8t$ (noir) et $U = 32t$ (rouge tirets-tirets)	119
4.9	$-L_{12}$ en fonction de la densité à $T = 2t$ pour $U = 8t$ (noir) et $U = 32t$ (rouge tirets-tirets)	120
4.10	Partie imaginaire de la <i>self-energy</i> divisée par T^2 en fonction de ω/T pour différentes températures à $U = 32t$	121
5.1	Représentation vectorielle du chemin $i \rightarrow j$	124
5.2	Chemin fermé du facteur de phase $\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_{ij}$	127
5.3	Les diagrammes de <i>self-energy</i> pour le modèle de Hubbard jusqu'au quatrième ordre. Les lignes solides sont pour les fonctions de Green sans interaction et les lignes pointillées représentent l'interaction de Coulomb. Reproduit de Phys. Rev. B 50, 6939 (1994)	129
5.4	Exemple de diagramme d'ordre 4	130
5.5	Vue du haut du premier plan	143
5.6	Vue 3d du premier plan	144
B.1	$T_f^{(2)}$ en fonction de l'énergie de Fermi	163
B.2	$T_f^{(2)}$ en fonction de la densité	164
B.3	Fonction $N'_0(\omega)$	166
B.4	Fonction $X'(\omega)$	167
B.5	Fonction $X''(\omega)$	168
B.6	Fonction $X'''(\omega)$	169

Introduction

Perspective sur les systèmes électroniques fortement corrélés et les phénomènes émergents

Dans un article de 2003, P. Coleman [1] déclare à propos de la physique à N-corps :

«The study of many-body physics has provided a scientific playground of surprise and continuing revolution over the past half century. The serendipitous discovery of new states and properties of matter, phenomena such as superfluidity, the Meissner, the Kondo and the fractional quantum hall effects, have driven the development of new conceptual frameworks for our understanding about collective behavior, the ramifications of which have spread far beyond the confines of terrestrial condensed matter physics to cosmology, nuclear and particle physics.»

Nous pouvons par exemple rappeler que le coeur des étoiles à neutrons est supraconducteur et superfluide à la fois. En effet, le modèle généralement accepté est que l'intérieur contient surtout des neutrons ainsi qu'un nombre moindre d'électrons et de protons. La nature de ces étoiles force les neutrons à former des paires de Cooper et devenir superfluide alors que les protons, chargés, forment aussi des paires de Cooper mais pour devenir supraconducteur [2]. De plus, les brisures spontanées de symétries (le mécanisme de Higgs) [3] et plus récemment la relation théorique entre un système critique quantique en d dimensions et un trou noir en $d+1$ dimensions [4] sont des liens directs reliant l'étude des phénomènes collectifs en mécanique quantique.

Le principe dominant en science depuis la Grèce antique (un des seuls exemples où débiter son texte par le fameux «Depuis la nuit des temps...» est acceptable.) est ce-

lui du réductionnisme, soit la notion qu'à partir du moment où les lois de la nature régissant le comportement au plus petit niveau possible sont connues, il est envisageable de connaître et prédire tous les phénomènes présents dans l'univers. Cette approche a été exceptionnellement fructueuse historiquement. Par contre, est-ce que la constatation empirique de cette réussite est suffisante pour prétendre que la nature adopte nécessairement ce principe ? La question reste ouverte.

Complémentaire (ou même en opposition pour certains) au réductionnisme apparaît dans les dernières décennies le concept des phénomènes émergents soit le principe d'émergence. Dans son article fondateur «More is different» [5] il y a maintenant 40 ans, Phil Anderson déclare :

«... at each new level of complexity, entirely new properties appear, and the understanding of these behaviors requires research which I think is as fundamental in its nature as any other.»

L'idée du phénomène émergent tient dans l'observation que si nous disposons d'un système composé d'un nombre énorme d'objets (des milliards de milliards pour les électrons par exemple) et que nous performons des mesures sur celui-ci, les propriétés physiques qui sont mesurées sont plus que la somme des propriétés individuelles des objets composant le système. Il existe un moment où le nombre de constituants est assez grand pour que de nouvelles propriétés émergent. Les objets individuels sont remplacés par un phénomène collectif. C'est le domaine où la physique découle de l'interaction plutôt que des propriétés individuelles des objets. Ce concept est large et était discuté par exemple dans le cadre de l'écologie bien avant qu'on s'y intéresse en mécanique quantique. La grande différence entre un phénomène collectif classique et quantique est que dans un système classique, les objets ne perdent jamais totalement leur unicité. En mécanique quantique, étant donné le phénomène émergent, l'objet individuel (électron) cesse vraiment d'exister en tant qu'entité et c'est vraiment seulement le phénomène collectif qui existe et ce que l'on pourrait peut-être appeler électron dans ce cas n'est que la représentation de cet état. Cela amène donc à se demander si la connaissance seule des lois microscopiques est suffisante ou si, pour prédire des phénomènes à plus grande échelle, des principes organisationnels généraux sont nécessaires ? Anderson [5] remarquait déjà en 1972 (les caractères gras sont de l'auteur du présent texte) :

«... The main fallacy in this kind of thinking is that the reductionist hypothesis does not by any means imply a *constructionis* one : The ability to reduce everything to simple fundamental laws does not imply the ability to start from those laws and reconstruct the universe. In fact, the more the elementary particle physicists tell us about the nature of the fundamental laws, the less relevance they seem to have to the very real problems of the rest of science, much less to those of society. The constructionist hypothesis breaks down when confronted with the twin difficulties of scale and complexity. The behavior of large and complex aggregates of elementary particles, it turns out, is not to be understood in terms of a simple extrapolation of the properties of a few particles. ... **At each stage entirely new laws, concepts, and generalizations are necessary, requiring inspiration and creativity to just as great a degree as in the previous one. Psychology is not applied biology, nor is biology applied chemistry...**»

La perspective d'Anderson telle que stipulée en 1972 en est une de complémentarité, le réductionnisme et l'émergence sont des principes essentiels et non mutuellement exclusifs. Avec le temps, certains ont commencé à adopter une philosophie plus «radicale» où l'émergence remplacerait tout simplement le réductionnisme. Le partisan principal de cette approche est Bob Laughlin. Dans un article résumant son opinion avec David Pines [6] :

«... So the triumph of the reductionism of the Greeks is a pyrrhic victory : We have succeeded in reducing all of ordinary physical behavior to a simple, correct Theory of Everything only to discover that it has revealed exactly nothing about many things of great importance...».

Plus loin, il déclare (encore une fois les caractères gras de l'auteur du présent texte) :

«... These things are clearly true, yet they cannot be deduced by direct calculation from the Theory of Everything, for exact results cannot be predicted by approximate calculations. This point is still not understood by many professional physicists, who find it easier to believe that a deductive link exists and has only to be discovered than to face the truth that there is no link. But it is true nonetheless. Experiments of this kind work because **there are higher organizing principles in nature that make them work.**

The Josephson quantum is exact because of the principle of continuous symmetry breaking. The quantum Hall effect is exact because of localization. Neither of these things can be deduced from microscopics, and both are transcendent, in that they would continue to be true and to lead to exact results even if the Theory of Everything were changed. Thus the existence of these effects is profoundly important, for it shows us that for at least some fundamental things in nature the Theory of Everything is irrelevant. . . . **The emergent physical phenomena regulated by higher organizing principles have a property, namely their insensitivity to microscopics, that is directly relevant to the broad question of what is knowable in the deepest sense of the term...** The belief on the part of many that the renormalizability of the universe is a constraint on an underlying microscopic Theory of Everything rather than an emergent property is nothing but an **unfalsifiable article of faith...** **It could very well turn out that the Big Bang is the ultimate emergent phenomenon, for it is impossible to miss the similarity between the large-scale structure recently discovered in the density of galaxies and the structure of styrofoam, popcorn, or puffed cereals.»**

Finalement, Laughlin conclut [6] (les caractères gras sont de l'auteur du présent texte) :

«In his book *The End of Science* John Horgan argues that our civilization is now facing barriers to the acquisition of knowledge so fundamental that the Golden Age of Science must be thought of as over. It is an instructive and humbling experience to attempt explaining this idea to a child. The outcome is always the same. **The child eventually stops listening, smiles politely, and then runs off to explore the countless infinities of new things in his or her world.** Horgan's book might more properly have been called the End of Reductionism, for it is actually a call to those of us concerned with the health of physical science to face the truth that in most respects the reductionist ideal has reached its limits as a guiding principle. . . .»

La question est ouverte, réductionnisme, réductionnisme+émergence ou émergence seule ? Il existe de plus aussi une composante sociologique importante à ce débat. En effet, comment définit-on science fondamentale versus science appliquée ? Est-ce seulement un concept qui a le moindre sens et non juste une construction sociale permettant d'établir une échelle d'importance, une chaîne alimentaire de l'activité intellectuelle ?

Si le réductionnisme est la réponse, la première impression (**simpliste**) que cela donne est qu'alors les scientifiques qui étudient vraiment des choses fondamentales sont seulement ceux qui travaillent sur les lois de l'absolu microscopique. Dans cette optique, il existe une différenciation claire entre science fondamentale et appliquée.

Le mot simpliste a été ajouté à cette assertion puisque même si le réductionnisme était finalement la bonne et seule approche, il apparaît clair que déclarer cette supposée séparation draconienne entre fondamental et appliqué n'est rien de plus qu'une construction sociale. Un argument allant dans cette veine est la comparaison entre ce qui se passait en Occident par opposition à l'Union Soviétique. En URSS où cette supposée dichotomie n'existait pas, les plus grands physiciens de ce pays seraient pour la plupart considérés comme des physiciens de la matière condensée aujourd'hui bien que pour eux, ça n'avait pas d'importance. Évidemment, leurs contributions sont utiles dans tous les domaines de la physique. Rien n'indique que la raison tient dans la différence de système politique, mais cela montre que dans deux sociétés relativement isolées l'une de l'autre, la sociologie des sciences s'est avérée être différente.

Réductionnisme ou pas, l'avancement dans un secteur a bien souvent un impact direct dans l'autre, voir plus souvent qu'autrement une correspondance un à un. Ainsi, si expliquer une chose explique finalement aussi autre chose, il devient difficile de déclarer l'une ou l'autre comme fondamentale. Dans les années 70, la qualité des semi-conducteurs qui sont fabriqués devient de plus en plus grande. Cela découle surtout de la demande de l'industrie de l'électronique. L'une des conséquences fut la possibilité de produire des systèmes de gaz d'électrons en deux dimensions de grande qualité. Il fut ainsi découvert que lorsque ceux-ci sont plongés, à très basse température, dans un champ magnétique intense, une surprise de taille apparaît, soit un phénomène appelé effet Hall quantique [7,8]. C'est un effet quantique nouveau, complètement inattendu, que personne n'avait prédit ou imaginé avant. Nous savons maintenant qu'un phénomène collectif où les électrons et des flux élémentaires de champs magnétiques se lient ensemble pour donner un nouveau type d'objet qui ressemble à des électrons avec des charges fractionnaires. Ces systèmes sont des candidats de choix pour observer toutes sortes d'états de la matière étranges étudiés en physique des particules en général, mais non accessibles pour eux. N'eut été de l'amélioration de la qualité de la fabrication des matériaux semi-conducteurs (ici nous parlons de matériaux de quelques centaines de couches atomiques d'épaisseur), ce nou-

veau phénomène quantique n'aurait probablement jamais été découvert.

Kamerlingh Onnes de l'université de Leiden et son équipe, après avoir été les premiers à liquéfier l'hélium, plongèrent en 1911 un fil de mercure (solide à cette température) dans l'hélium liquide et mesurèrent sa résistivité électrique. À leur grande stupéfaction, la résistivité électrique en fonction de la température, au lieu de tendre doucement vers zéro (proposé par Dewar), vers une constante à zéro température (proposé par Matthiessen) ou vers l'infini (proposé par Kelvin), présente plutôt une transition abrupte à 4.2 Kelvin (-268.8 Celcius) où elle passe d'une valeur finie à une valeur **identiquement** nulle et ce pour toutes les températures plus basses. Ce phénomène est appelé supraconductivité. Dans ce phénomène, la mécanique quantique s'applique au volume macroscopique du matériau. L'autre caractéristique fondamentale d'un supraconducteur est que celui-ci expulse tout champ magnétique qui essaie d'y pénétrer (effet Meisner). Par conséquent un supraconducteur dans un champ magnétique lévite. Avant de continuer, il est intéressant de mentionner que Kamerlingh Onnes [9] est : «le premier à construire un laboratoire académique quasi-industriel dédié à la cryogénie tout en réunissant des physiciens, chimistes et mécaniciens pour mener à bien ses expériences. Il ira même jusqu'à fonder une école de souffleurs de verre à Leyde, indispensables pour fabriquer les différentes parois en verre du dispositif.»

La supraconductivité est l'exemple type de ce qui est appelé aujourd'hui une brisure spontanée de symétrie. Ce concept est l'un des piliers du modèle standard et de la physique des particules en général. Le concept de symétrie est central dans la vision moderne de la physique. Emmy Noether, une très grande mathématicienne qui est malheureusement encore aujourd'hui méconnue en dehors du milieu des théoriciens travaillant en théorie quantique des champs/physique à N-corps [10](le NY Times nous fait un peu mentir là-dessus, voir [10]) énonça au 20^e siècle un théorème vraiment important liant symétries de la nature et lois de conservations. Elle montra que pour chaque symétrie continue découverte dans un système, une loi de conservation lui est associée. Par exemple, l'invariance en translation est la cause de la conservation de la quantité de mouvement et l'invariance sous translation du temps est ce qui explique la conservation de l'énergie. Évidemment, à cause de l'émergence et de l'apparition dans les systèmes macroscopiques de ce que nous appelons la dissipation (la friction est un exemple), le deuxième principe de la thermodynamique existe et exclut une stricte invariance sous translation du temps.

Mais, bien souvent, c'est une approximation bien utile pour des temps courts. Après les travaux de Landau sur les transitions de phases, il fut compris que les équations décrivant les lois de la physique présentent toujours un haut taux de symétrie, mais que l'expérience montre que la nature tend à choisir une solution de moindre symétrie. Ceci est bizarre puisque nous nous attendrions à ce que la solution pour l'état fondamental ait la même symétrie que les équations la décrivant.

Dans les années 30, il fut découvert que la résistance électrique de certains matériaux qui ne deviennent pas supraconducteur à basse température atteint bizarrement un minimum pour une faible température, non nulle, pour ensuite remonter pour les températures plus basses (effet Kondo) [11]. Plus de 80 ans plus tard, nous comprenons maintenant que le résultat de cette expérience simple n'est autre chose qu'un exemple de ce qui est appelé la liberté asymptotique (comme pour les quarks). Ce problème particulier (effet Kondo) a permis de développer un nombre incalculable d'outils mathématiques et de concepts essentiels dans tous les domaines de la physique. L'exemple le plus probant est ce que nous appelons aujourd'hui la renormalisation. C'est l'idée que dans un système il y a un grand nombre d'échelles d'énergies et que si nous sommes seulement intéressés à ce qui arrive à plus basse énergie (ce qui est le cas habituellement puisqu'ici basse et haute énergie ne sont pas des échelles absolues et donc elles sont définies pour chaque système particulier étudié.), il existe un moyen systématique de faire disparaître les degrés de liberté à haute énergie.

Ces exemples montrent bien que dans le domaine de l'émergence, chaque nouveau système est un univers différent et que nous ne savons jamais d'avance quelle mine d'information sur la physique travailler à sa compréhension peut contenir.

Dans la section suivante, nous allons voir qu'en pratique en physique de la matière condensée, dépendamment du matériau étudié (système), une approche alliant réductionisme et constructivisme ou une se concentrant plutôt sur l'émergence, où les détails microscopiques ne sont pas si importants, peut être utilisée. Nous verrons que ce qui dicte le choix est en général la présence d'interactions fortes entre les charges.

Problématiques nouvelles

Nous comprenons maintenant relativement bien (le désordre par exemple est toujours mal compris) les systèmes faiblement corrélés comme les métaux simples et les semi-conducteurs. Ceux-ci peuvent être considérés dans une perspective d'un électron sans interaction dont les paramètres sont renormalisés. Ainsi, l'information physique est contenue dans la structure de bande. L'applicabilité de cette approche nous est donnée par la théorie du liquide de Fermi qui montre comment un système dont l'Hamiltonien contient l'interaction pour N-corps (réductionisme) $H = -\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2m_i} + \sum_i V(\mathbf{r}_i) + \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$ peut être représenté dans certains cas, par le comportement d'un électron dans un réseau cristallin avec paramètres renormalisés. Nous remarquons ici que nous supposons l'applicabilité de l'approximation de Born-Oppenheimer qui permet de séparer la partie électronique de la partie ionique et de considérer l'influence des ions dans le H comme un champ statique. Les fluctuations quantiques dues au mouvement des ions et leur interaction avec les électrons sont traitées séparément. Cette approximation se justifie grâce au grand nombre d'ordres de grandeur séparant la masse des électrons et des ions. Ainsi, dans les systèmes faiblement corrélés, comme pour un gaz d'électron libre avec diffusion par des impuretés statiques, la chaleur spécifique et le pouvoir thermoélectrique sont linéaires en température (T) alors que la résistivité est quadratique en T .

La théorie du liquide de Fermi (FLT) montre de façon qualitative que les paramètres sont renormalisés. La façon moderne d'obtenir des valeurs quantitatives se fonde en premier sur une méthode appelée théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), qui allie réductionisme plus constructionisme. Elle est basée sur le théorème d'Hohenberg-Kohn [12] qui montre qu'existe une fonctionnelle de la densité électronique $n(\mathbf{r})$ et que celle-ci est minimisée pour le $n(\mathbf{r})$ physique et que la valeur de cette fonctionnelle au minimum donne l'énergie de l'état fondamental. Celle-ci peut être exprimée comme

$$\Phi[\{n(\mathbf{r})\}] = \Phi_{univ}[\{n(\mathbf{r})\}] + \int d\mathbf{r} V_{cristal}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}). \quad (1)$$

La partie universelle $\Phi_{univ}[\{n(\mathbf{r})\}]$ dépend seulement de la masse des électrons et de l'interaction alors que $V_{cristal}(\mathbf{r})$ spécifie le matériau particulier. Le problème est que $\Phi_{univ}[\{n(\mathbf{r})\}]$ est inconnue. Techniquement, la solution utilisée est de réécrire la condition de minimisation en terme de la solution d'un problème auxiliaire, c'est-à-dire sous

la forme d'une équation de Schrödinger à une particule avec un potentiel effectif dit de Kohn-Sham V_{KS} dont la partie effective est appelée d'échange-corrélation $V_{XC}[\{n(\mathbf{r})\}]$ déterminée par la densité. L'art de la méthode est de trouver une bonne approximation pour V_{XC} . La façon la plus simple proposée est d'utiliser la forme de dépendance en densité obtenue pour le cas d'un gaz d'électrons dans le modèle du Jellium ($\propto n^{1/3}$). Ainsi le potentiel de Kohn-Sham est donné par $V_{KS}[n(\mathbf{r})] = V_{cristal}(\mathbf{r}) + V_{Hartree}(\mathbf{r}) + V_{XC}[\{n(\mathbf{r})\}]$. Les bandes i sont déterminées par la solution de $[-\nabla + V_{KS}[n(\mathbf{r})]]\psi_{ki}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ki}\psi_{ki}(\mathbf{r})$, où k est la quantité de mouvement cristalline. Rigoureusement, les orbitales ψ_{ki} n'ont aucune signification physique puisqu'elles existent seulement comme fonctions pour construire la densité, mais dans le cas faiblement corrélé, le résultat ressemble à la réalité.

Une fois que les ψ_{kj} et les ε_{kj} sont connues, nous pouvons les utiliser comme ordre zéro de la théorie des perturbations. C'est-à-dire que nous pouvons construire une série perturbative en terme de $\sum_{ij} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_i V_{KS}(\mathbf{r}_i)$. Cette façon de procéder permet d'obtenir des valeurs de bandes interdites et de largeurs de bandes qui correspondent avec l'expérience de l'ordre de un pour cent. Cette approche permet aussi de calculer quantitativement les paramètres renormalisés que la théorie du liquide de Fermi donne qualitativement. Toute cette machinerie fonctionne bien pour les matériaux faiblement corrélés. Pour toute cette classe de matériaux, la présence d'un nombre impair d'électrons signifie que le matériau est métallique puisque chaque bande contient au plus deux électrons par vecteur d'onde selon le principe d'exclusion.

Mais, dans certains matériaux comme par exemple des oxydes de métaux de transition comme le *CoO*, *NiO*, *FeO*, *MnO*, *V₂O₃* pour ne nommer que ceux-là, malgré que la théorie des bandes prédise un métal, ces systèmes sont des isolants avec une large bande interdite de l'ordre de 2-4 eV. Les cuprates non dopés en sont aussi un exemple. Pour ces systèmes, l'approche DFT+FLT échoue lamentablement. Ce nouveau type d'isolant est appelé isolant de Mott et la nature de cette phase isolante se trouve dans l'interaction électron-électron, c'est-à-dire un effet de la partie particule de la dualité onde-corpuscule. Dans ces matériaux, la répulsion coulombienne est si forte qu'il est énergétiquement très peu favorable pour deux électrons d'être spatialement rapprochés. Si nous adoptons une vision du problème où les électrons peuvent seulement être situés sur un site du réseau et que le système est à demi-rempli soit un électron sur chaque site, le coût énergétique pour qu'un des électrons saute sur un autre site est trop élevé et il préférera rester à

sa position. D'où l'état isolant alors que les bandes ne sont que partiellement remplies. Dans le cas de l'isolant de Mott, c'est le point de vue de l'espace réel qui doit être adopté. Étant donné la forte interaction électron-électron, c'est une image de physique atomique qui doit être choisie comme nouvel ordre zéro de perturbation.

Si nous séparons l'Hamiltonien du système en deux termes, l'un représentant l'énergie cinétique et l'autre l'interaction de Coulomb soit

$$H = H_{cin} + H_{Coul}, \quad (2)$$

nous pouvons résumer que dans la limite de bande où $\left(\frac{H_{Coul}}{H_{cin}} \ll 1\right)$ nous pouvons effectuer la théorie des perturbations en interaction de Coulomb et les électrons se comportent comme des ondes dans l'espace de la quantité de mouvement. Dans ce cas, $H_{cin} + H_{Coul} \rightarrow H_{cin}^*$ est le point de départ de la théorie des perturbations et la nature des états est soit métallique ou isolant de bande. Dans la limite opposée, la limite atomique, la théorie des perturbations se fait maintenant en fonction de H_{cin} et les électrons ont la nature de particules. Les états de départ sont ceux localisés sur un atome soit aucun, un ou deux électrons i.e. $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ et $|\uparrow\downarrow\rangle$. Dans ce cas, nous obtenons des isolants de Mott ou des isolants de Mott dopés si nous forçons le système à être différent du demi remplissage. Mais qu'arrive-t-il si nous sommes entre ces deux limites bien définies ? C'est-à-dire lorsque $H_{cin} \approx H_{Coul}$. Dans ce cas, il n'existe pas de base pour effectuer une théorie des perturbations et le système est totalement non perturbatif.

Le modèle le plus simple qui capture cette physique est appelé le modèle de Hubbard à une bande [13]. Il est obtenu lorsque seul le terme dominant de l'interaction est conservé lorsque l'Hamiltonien standard est projeté sur un modèle sur réseau dit *tight-binding* (TB). Il fut proposé par Hubbard en 1963 dans le but de comprendre les effets de corrélation pour les électrons d dans les métaux. Comme nous avons déjà discuté, les métaux de transition qui présentent des bandes d partiellement remplies sont mieux décrits en fonction d'électrons localisés. Par contre, pour certaines mesures, le caractère ondulatoire semble être présent. Un modèle minimal doit donc intégrer la dualité onde-particule en son sein. Nous cherchons ici plutôt des phénomènes émergents, comme la transition de Mott, un phénomène qui dépend peu de tous les détails, mais plutôt de la structure de H .

Nous devons premièrement définir rapidement la deuxième quantification. Puisque c'est un sujet standard, nous nous contentons ici d'une présentation succincte (voir par exemple [14]). Imaginons un système d'électrons où un état particulier est appelé α . Étant donné le principe d'exclusion de Pauli, deux électrons au maximum peuvent se retrouver dans un état particulier. Une paire d'opérateurs pour agir sur ce système peut être définie, soit

$$c_{\alpha\sigma}^\dagger \quad \text{et} \quad c_{\alpha\sigma}, \quad (3)$$

qui permettent de créer et détruire un électron dans l'état α avec un spin σ . Ces opérateurs doivent respecter le principe d'exclusion de Pauli et ainsi suivent les relations

$$\begin{aligned} \{c_{\alpha\sigma}^\dagger, c_{\beta\sigma'}^\dagger\} &= \{c_{\alpha\sigma}, c_{\beta\sigma'}\} = 0 \\ \{c_{\alpha\sigma}, c_{\beta\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{\alpha\beta}\delta_{\sigma\sigma'}, \end{aligned} \quad (4)$$

où $\{A, B\} = AB + BA$ est l'anticommutateur. Dans ce travail, nous utiliserons la position d'un site i ou la quantité de mouvement cristalline k pour caractériser les états α .

Dans la méthode TB, nous considérons qu'un électron peut être localisé sur un site j du réseau et sauter vers un autre site i avec une amplitude de probabilité t_{ij} . Ce paramètre provient de l'écriture du terme $-\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2m_i} + \sum_i V(\mathbf{r}_i)$ de l'Hamiltonien dans une base localisée. Ainsi l'Hamiltonien incluant l'interaction s'écrit comme

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijj'\sigma\sigma'} \langle ii' | \frac{1}{\mathbf{r}_{12}} | jj' \rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{i'\sigma'}^\dagger c_{j'\sigma'} c_{j\sigma}, \quad (5)$$

où

$$\langle ii' | \frac{1}{\mathbf{r}_{12}} | jj' \rangle = e^2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\phi^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) \phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j) \phi^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{i'}) \phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{j'})}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (6)$$

Les fonctions $\phi(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i)$ sont des orbitales de Wannier. Pour des bandes étroites, ces fonctions sont très localisées autour de leur ion respectif. La grandeur typique est beaucoup plus petite que la distance inter-ion et ainsi le recouvrement sera faible. L'intégrale sera petite sauf si tous les indices de site sont les mêmes. L'approximation consiste donc à seulement conserver ce terme. Cela correspond à un écrantage parfait. Si de plus, nous ne considérons qu'une bande, nous obtenons un terme d'interaction de type densité-densité

dans lequel nous appelons la grandeur de l'interaction de Coulomb locale U

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (7)$$

avec $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$.

Les deux approximations principales sont de négliger l'interaction inter site entre deux plus proches voisins et de considérer une seule bande. À proprement parler, une seule bande ne peut que décrire des électrons s alors que nous supposons étudier des électrons d qui, puisqu'ils ont un moment cinétique non nul, requiert plus d'une bande. Mais nous désirons étudier le modèle le plus simple possible qui permet de capturer à tout le moins une bonne partie de la physique dans le cas $H_{cin} \approx H_{coul}$. D'un autre côté, lorsque nous tenons compte du champ cristallin, il est toujours possible qu'une seule orbitale suffise même pour des électrons d . C'est la supposition pour les supraconducteurs à haute température où le modèle de Hubbard est utilisé car nous nous concentrons sur l'orbitale $d_{x^2-y^2}$. Par contre, malgré son apparente simplicité, ce modèle n'a une solution connue qu'en une dimension [15, 16]. Pour un nombre supérieur de dimensions des méthodes approximatives mais non perturbatives sont nécessaires. Ici, contrairement à ce que nous avons discuté pour le cas faiblement corrélé, nous ne sommes pas dans le domaine du quantitatif, mais nous regardons plutôt des Hamiltoniens modèles. De plus en plus de groupes travaillent toutefois à l'élaboration de calculs quantitatifs [17], mais il y a encore plusieurs questions que les Hamiltoniens modèles peuvent aider à comprendre.

Importance du transport et plus spécifiquement du pouvoir thermoélectrique

Le pouvoir thermoélectrique, ou coefficient de Seebeck, est une mesure en circuit ouvert de l'amplitude d'un voltage créé en réponse à un gradient de température au travers d'un matériau. Il est défini comme

$$S = - \frac{\Delta V}{\Delta T} = \frac{E}{\nabla T}. \quad (8)$$

Dans les métaux ordinaires, il est linéaire en température sur une grande plage et dans des conditions normales est plus petit que l'unité fondamentale du pouvoir thermoélectrique $\frac{k_B}{|e|} \approx 87 \mu V/K$. De plus, S peut changer de signe et dans les systèmes faiblement corrélés, ce changement nous informe sur la nature des porteurs présents dans le système (électrons ou trous). Il est quand même possible de trouver certains comportements inusités où S changera de signe à plus haute T étant donné la dépendance en température de la diffusion par les impuretés ou celle de la diffusion par des phonons, mais rien de particulièrement incompréhensible. Le cas fortement corrélé est plus complexe et n'est pas encore bien compris. La dépendance en température sur une plage raisonnable est hautement non monotone et peut atteindre des valeurs bien supérieures à $\frac{k_B}{|e|}$ pour des températures raisonnablement basses. Le signe peut toujours changer, mais la nature de ce changement est beaucoup moins claire. Par contre, le pouvoir thermoélectrique est une bonne sonde pour analyser la destruction des quasi-particules puisque qu'un clair extremum apparaît à la température de passage entre les régimes cohérent et incohérent [18, 19]. Le pouvoir thermoélectrique est très sensible aux différents régimes possibles comme celui du liquide de Fermi par exemple. Le pouvoir thermoélectrique a été analysé dans un grand nombre de matériaux fortement corrélés tels que les cuprates [20], les cobaltates [21] et les semi-conducteurs corrélés à petite bande interdite [22]. Il est aussi un sujet de grand intérêt théorique. Dans cette thèse, nous nous intéressons plutôt à l'aspect théorique général plutôt que de se concentrer sur un matériau spécifique.

Nous pouvons quand même énumérer quelques résultats importants d'expériences dans les matériaux fortement corrélés. Pour les cuprates, le comportement du pouvoir thermoélectrique à la température de la pièce est très intéressant. À cette T , le matériau est dans l'état normal et la nature des excitations est probablement incohérente. La Fig. 1 recense S à $290K$ pour 10 cuprates différents et montre que pour un dopage plus petit qu'environ 20%, le pouvoir thermoélectrique suit bien une relation exponentielle alors que pour un dopage plus grand, une forme linéaire est plus appropriée. Une chose très importante est que S change de signe pour un dopage autre que demi-rempli soit environ $\delta = 0.25$. La nature particulière de l'isolant de Mott dopé est avancée comme explication de ce phénomène. Certains semiconducteurs, comme le FeSi, présentent des comportements propres aux matériaux à fortes interactions. Dans ce cas, la nature de la transition vers un métal à plus haute température n'est pas celle des semiconducteurs simples soit une activation thermique ou un déplacement du potentiel chimique dans la bande de

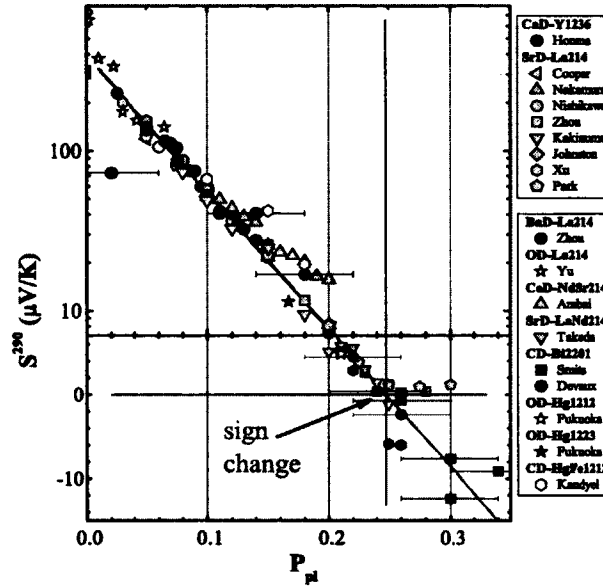


FIGURE 1 – Comportement universel du pouvoir thermoélectrique à 290K en fonction de la densité de trous dans le plan P_{pl} , pour différentes familles de cuprates dopés aux trous. Ils exhibent tous un changement de signe autour de $P_{pl} = 0.25$. Au-dessus de la ligne horizontale pleine, S obéit la forme fonctionnelle $S^{290}(P_{pl}) = 392e^{-19.7P_{pl}}$ pour $0.01 < P_{pl} < 0.21$. Au-dessous de la ligne horizontale pleine, $S^{290}(P_{pl}) = 40.47 - 163.4P_{pl}$ pour $0.21 < P_{pl} < 0.34$. La figure est tirée de Phys. Rev. B **82**, 214503 (2010) qui l'ont eux-mêmes tirée de Phys. Rev. B **75**(18), 184520 (2008)

conduction. Le processus est au contraire dû à l'émergence d'états incohérent qui ne sont pas des quasi-particules, dans la bande interdite [23]. Le pouvoir thermoélectrique est anormal et dépend beaucoup du dopage tel que montré à la Fig. 2. Dans cette famille, le $FeSb_2$ atteint un pouvoir thermoélectrique record de 45 000 $\mu V/K$. Les fermions lourds présentent aussi un comportement similaire comme le montre bien la Fig. 3. Finalement, nous pouvons mentionner une autre famille de matériaux fortement corrélés intéressants, les cobaltates. Ces matériaux se présentent comme des plans bidimensionnels et triangulaires. Des valeurs intéressantes de S sont obtenues comme par exemple dans le $NaCo_2O_4$ (Fig. 4)

Cette thèse est séparée en cinq Chapitres et cinq Annexes : Le Chapitre 1 décrit la méthodologie utilisée pour les calculs soit la méthode du champ moyen dynamique (DMFT) et la procédure utilisée pour le calcul du pouvoir thermoélectrique. Le Chapitre 2

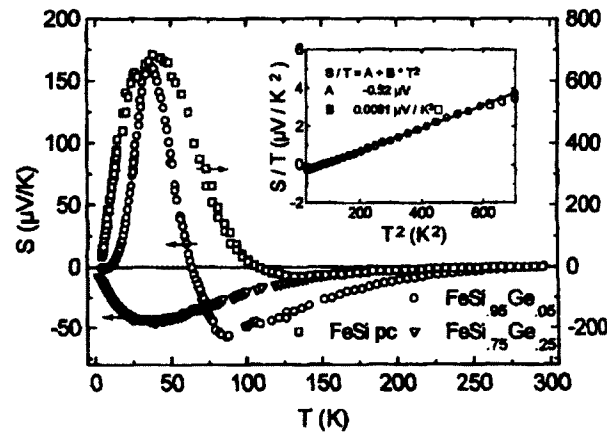


FIGURE 2 – Pouvoir thermoélectrique en fonction de la température pour $FeSi_{1-x}Ge_x$ ($x = 0.05, 0.25$: gauche, $x = 0$: droite). La figure insérée montre S/T en fonction de T^2 pour $x = 0.05$ pour des T de 2 à 25 K. La figure est tirée de Physica B : Condensed Matter **230**, 784 (1997)

est un article décrivant en détail une nouvelle approche pour implémenter le calcul de la DMFT. Une discussion détaillée des algorithmes d'implémentation est présentée en annexe. L'article composant le Chapitre 3 est plutôt une application de la DMFT pour calculer le pouvoir thermoélectrique dans un système tridimensionnel cubique à faces centrées (fcc). Nous offrons au Chapitre 4 un résumé des résultats du pouvoir thermoélectrique dans les isolants de Mott dopés plutôt destiné à une personne à la recherche d'un grand S . Dans le Chapitre 5, nous proposons deux approches pour inclure l'effet orbital du champ magnétique dans la DMFT. Cela n'a jamais été fait auparavant et permet d'étudier l'effet du champ d'une façon non biaisée. L'Annexe A donne plusieurs calculs intermédiaires par rapport à l'une des approximations du pouvoir thermoélectrique, celle à haute fréquence, discutée dans le Chapitre 1. L'Annexe B montre comment définir deux températures de Fermi spécifiques pour le pouvoir thermoélectrique du fcc 3d. Dans l'Annexe C, la méthode par approximants de Padé pour le prolongement analytique entre les fréquences imaginaires et réelles est discutée. Dans celle qui suit, l'Annexe D c'est plutôt le prolongement analytique par entropie maximale qui est décrite. Finalement, dans l'Annexe E, une dérivation manquante pour l'implémentation numérique de IPT est présentée.

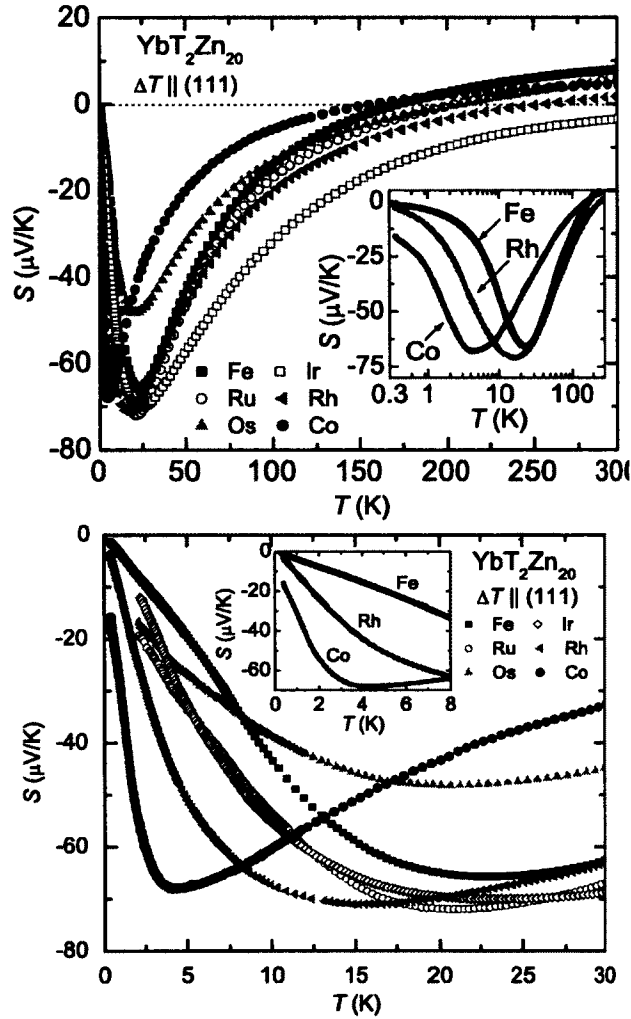


FIGURE 3 – (a) Dépendance en température du pouvoir thermoélectrique des Fermions lourds $\text{YbT}_2\text{Zn}_{20}$ où T est Fe, Ru, Os, Ir, Rh et Co. La figure insérée est $S(T)$ vs $\log(T)$ (ici T la température) pour Fe, Rh et Co. (b) Zoom à basse température. Figure insérée pour $T < 8\text{K}$. La figure est tirée de Phys. Rev. B **86**, 115110 (2012)

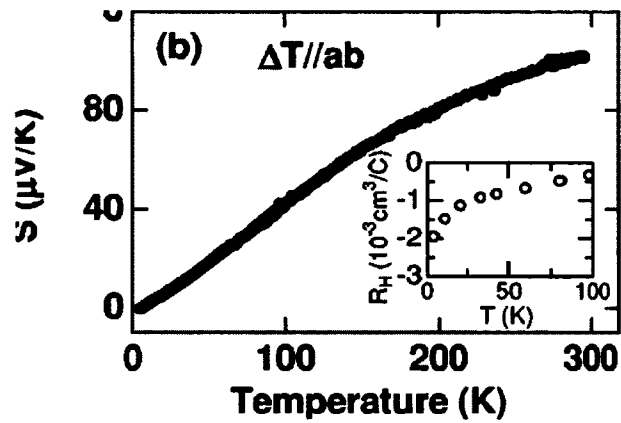


FIGURE 4 – Pouvoir thermoélectrique dans le plan de NaCo_2O_4 cristallin. La figure insérée montre le coefficient de Hall dans le plan (R_H) pour le même cristal. La figure est tirée de Phys. Rev. B **56**, R12685 (1997)

Chapitre 1

Méthodologie

Dans ce chapitre, nous introduisons et discutons les outils théoriques utilisés dans la thèse. Une connaissance pratique en mécanique quantique, physique statistique et matière condensée est présumée. Une courte introduction aux fonctions de Green est présentée. Ensuite, la théorie du champ moyen dynamique est dérivée de trois façons distinctes. Les deux solutionneurs d'impuretés suivent, soit le Monte Carlo quantique en temps continu, incluant une courte introduction à la méthode Monte-Carlo en général et la théorie des perturbations itérées. Nous dérivons finalement les équations du transport, discutons de prolongement analytique, des valeurs DC et de trois approximations importantes pour le calcul du pouvoir thermoélectrique, soit l'approche haute fréquence, l'approche Kelvin et une approche d'ajustement de courbe (*curve fitting*) sur l'axe de Matsubara/temps imaginaire.

1.1 Fonctions de Green

La fonction de Green à température nulle est définie comme

$$G_{\alpha\beta}(t_1, t_2) = -i \langle GS | T_t [c_\beta(t_2) c_\alpha^\dagger(t_1)] | GS \rangle, \quad (1.1)$$

où $|GS\rangle$ est l'état fondamental exact du système à N -corps et T_t est l'opérateur de produit chronologique. Par souci de simplicité de notation, nous avons choisi d'intégrer le spin dans la définition des α et β . Nous allons expliciter le spin quand nous le jugerons nécessaire. Cette définition représente l'ajout d'un électron dans l'état α au fondamental au temps t_1 alors qu'un autre dans l'état β est détruit au temps t_2 . Finalement, le tout

est reprojété sur l'état fondamental $|GS\rangle$. C'est l'amplitude de probabilité décrivant la propagation d'une excitation élémentaire entre deux états et à deux temps différents. La fonction de Green est aussi appelée propagateur. Il existe une similitude étonnante entre l'opérateur d'évolution de la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ qui est donné par e^{-iHt} et l'opérateur densité dans l'ensemble grand canonique qui est donné par $\hat{\rho} = e^{-\beta(H-\mu\hat{N})}$. Ainsi, si nous remplaçons dans le propagateur, H par $H - \mu\hat{N}$ et que nous définissons le temps comme étant sur l'axe imaginaire $\tau = it$, il devient utile de définir la fonction de Green en temps imaginaire par

$$G_{ij,\sigma}(\tau - \tau') = - \left\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle, \quad (1.2)$$

où T_τ est le produit chronologique en τ et la moyenne est sur l'ensemble grand-canonique. Une caractéristique très importante des fonctions de Green en temps imaginaire est qu'elles sont anti-périodiques lorsqu'elles décrivent des fermions, soit

$$G_{ij,\sigma}(-\tau) = -G_{ij,\sigma}(-\tau + \beta) \quad 0 < \tau < \beta. \quad (1.3)$$

La fonction étant définie sur un intervalle de temps imaginaire fini, nous pouvons l'écrire comme une série de Fourier

$$G_{ij,\sigma}(\tau) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} G_{ij,\sigma}(i\omega_n), \quad (1.4)$$

où $\omega_n = \pi T(2n + 1)$ est appelé fréquence de Matsubara fermionique. Ainsi, la relation inverse s'écrit

$$G_{ij,\sigma}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{ij,\sigma}(\tau). \quad (1.5)$$

Nous sommes intéressés à connaître la fonction sur l'axe réel. Analytiquement, cela est obtenu en remplaçant $i\omega_n \rightarrow \omega \pm i\delta$ où $\delta \rightarrow 0^+$. Avec le choix $+i\delta$, nous obtenons la fonction dite retardée soit celle qui est définie en temps réel comme

$$G_{\alpha\beta}^R(t_2 - t_1) = -i \left\langle \{c_\beta(t_2), c_\alpha^\dagger(t_1)\} \right\rangle \Theta(t_2 - t_1), \quad (1.6)$$

c'est-à-dire que l'excitation est créée avant qu'elle ne soit détruite.

Selon les relations de Kramers-Kronig

$$\begin{aligned}\operatorname{Im}G_{ij,\sigma}^R(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int \frac{\operatorname{Re}G_{ij,\sigma}^R(\omega')d\omega'}{\omega' - \omega} \\ \operatorname{Re}G_{ij,\sigma}^R(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int \frac{\operatorname{Im}G_{ij,\sigma}^R(\omega')d\omega'}{\omega' - \omega}.\end{aligned}\quad (1.7)$$

De plus, nous pouvons définir la densité spectrale qui informe sur les excitations à une particule

$$A_{ij,\sigma}(\omega) = -2\operatorname{Im}G_{ij,\sigma}^R(\omega) \quad (1.8)$$

et la densité d'états qui est donnée par le terme local de la densité spectrale

$$N_\sigma(\omega) = \frac{\pi}{2}A_{ii,\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}G_{ii,\sigma}^R(\omega). \quad (1.9)$$

Grâce à l'Eq. (1.8), nous pouvons aussi écrire la forme spectrale de la fonction de Green

$$G_{ij,\sigma}^R(z) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A_{ij,\sigma}(\omega)}{z - \omega}, \quad (1.10)$$

où z est une variable complexe.

En présence d'interaction (ou de désordre), il est possible de définir une fonction, appelée *self-energy* et représentée par le symbole Σ , qui contient l'information sur le terme d'interaction de l'Hamiltonien $H = H_0 + H_1$. Dans ce cas, la fonction de Green est donnée par une équation appelée équation de Dyson.

$$G_{ij,\sigma}(\tau - \tau') = G_{ij,\sigma}^0(\tau - \tau') + \sum_{mn} \int d\tau_1 d\tau_2 G_{im,\sigma}^0(\tau - \tau_1) \Sigma_{mn,\sigma}(\tau_1 - \tau_2) G_{nj,\sigma}(\tau_2 - \tau'), \quad (1.11)$$

où G^0 est la fonction de Green du système sans interaction. Dans cette courte présentation des fonctions de Green, nous avons toujours considéré qu'elles étaient symétriques en temps et donc nous avons seulement considéré des différences de temps. La fonction résultante dans son espace de Fourier (en ω) est diagonale. Si nous considérons aussi l'invariance sous translation et que nos fonctions ne dépendent que d'une différence de position $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, la transformée de Fourier est diagonale en vecteur d'onde \mathbf{k} (quantité de

mouvement cristalline) et dans cette base nous obtenons

$$\begin{aligned} G_{k\sigma}(i\omega_n) &= \frac{1}{[G_{k\sigma}^0(i\omega_n)]^{-1} - \Sigma_{k\sigma}(i\omega_n)} \\ &= \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma_{k\sigma}(i\omega_n)}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

où ε_k est la relation de dispersion du système sans interaction.

Nous allons finalement prendre quelques lignes pour définir les fonctions de corrélations. Soit A et B deux opérateurs. La fonction de corrélation est

$$\begin{aligned} \chi_{AB}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; t - t') &= i \langle [A(\mathbf{r}_i, t), B(\mathbf{r}_j, t')] \rangle \Theta(t - t') \\ \chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau - \tau') &= \langle T_\tau A(\mathbf{r}_i, \tau) B(\mathbf{r}_j, \tau') \rangle. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Cette fonction est périodique en temps imaginaire et ainsi

$$\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; -\tau) = \chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; -\tau + \beta) \quad \tau > 0. \quad (1.14)$$

Ceci implique

$$\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau) = T \sum_n e^{-i\Omega_n \tau} \chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; i\Omega_n), \quad (1.15)$$

avec $\Omega_n = 2\pi T n$ une fréquence de Matsubara bosonique.

1.2 DMFT à un site en l'absence de brisure de symétrie

L'idée centrale derrière la théorie du champ moyen dynamique (DMFT) est de projeter un modèle sur réseau sur un modèle d'impuretés avec un nombre moindre de degrés de liberté. Dans la version à un site qui est utilisée dans ce travail, il n'y a qu'une seule impureté. En conséquence, la *self-energy* obtenue est locale i.e. n'a pas de dépendance spatiale ou son corollaire en vecteur d'onde. Par contre, elle conserve toute sa dynamique temporelle (en fréquence). Il appert qu'en dimension infinie le modèle de Hubbard a bel et bien une *self-energy* locale [24] et ainsi, la DMFT à un site peut être vue comme l'ordre zéro d'un développement en $1/d$ où d est le nombre de dimensions du système. Puisqu'aucun développement autour d'un terme de l'Hamiltonien n'est effectué, l'approximation

est non perturbative. Appliquée à un système en dimension infinie ou avec un nombre de coordination infinie, la méthode est exacte et c'est en l'appliquant à un système en dimension finie que cela devient approximatif. Nous pouvons nous attendre à ce qu'en trois dimensions, avec plusieurs plus proches voisins, la méthode donne des résultats satisfaisants. Par contre en une et deux dimensions la méthode doit être modifiée [25].

1.2.1 Dérivation découlant de la fonctionnelle de Luttinger-Ward

Nous savons maintenant [17, 26–28] que cette méthode non perturbative peut être dérivée à partir de la fonctionnelle de Luttinger-Ward. Nous considérons, comme dans [26], un Hamiltonien en deux parties soit

$$H = H_0(\mathbf{t}) + H_1(\mathbf{U}), \quad (1.16)$$

où $H_0(\mathbf{t})$ est la partie cinétique, qui dépend seulement de la matrice des amplitudes de saut \mathbf{t} entre les sites du réseau et $H_1(\mathbf{U})$ est la partie représentant l'interaction, qui dépend de la matrice des interactions \mathbf{U} entre les électrons sur les différents sites du réseau. Pour le modèle de Hubbard dans la base de Wannier par exemple, la matrice \mathbf{U} est diagonale soit $\mathbf{U} = \mathbf{I}$ avec \mathbf{I} la matrice unitaire.

Luttinger et Ward [29] ont montré qu'il existe une fonctionnelle de la matrice de la fonction de Green \mathbf{G} , $\Phi_{LW}[\mathbf{G}]$ qui est universelle pour un modèle d'interaction particulier. La matrice des *self-energy* pour le modèle est donnée par la dérivée fonctionnelle de $\Phi_{LW}[\mathbf{G}]$ soit

$$\Sigma[\mathbf{G}] = \frac{1}{T} \frac{\delta \Phi_{LW}[\mathbf{G}]}{\delta \mathbf{G}}. \quad (1.17)$$

Le grand potentiel peut quant à lui s'écrire

$$\Omega[\mathbf{G}] = \Phi_{LW}[\mathbf{G}] + \text{Tr} \ln(-\mathbf{G}) - \text{Tr} \left((\mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{G}^{-1}) \mathbf{G} \right), \quad (1.18)$$

où $\text{Tr} \mathbf{A} = T \sum_{n,\alpha} A_{\alpha\alpha}$. La fonction de Green du modèle est donc donnée par l'équation variationnelle

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \mathbf{G}} = 0. \quad (1.19)$$

Cette construction est exacte mais peu utile puisque la fonctionnelle universelle $\Phi_{LW}[\mathbf{G}]$ n'est pas connue explicitement. Pour continuer, réécrivons nos équations comme des fonctionnelles de la *self-energy* plutôt. Dans ce cas nous obtenons

$$\Omega[\Sigma] = F_{LW}[\Sigma] + \text{Tr} \left(- (\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma)^{-1} \right), \quad (1.20)$$

où F_{LW} est la transformée de Legendre de Φ_{LW} soit

$$F_{LW}[\Sigma] = \Phi_{LW}[\mathbf{G}[\Sigma]] - \text{Tr}[\Sigma \mathbf{G}[\Sigma]]. \quad (1.21)$$

Cette fonctionnelle est universelle et ainsi, la seule partie à un corps dans le problème est le deuxième terme dans l'Eq. (1.20). Cette fois, la fonction de Green est donnée par

$$\mathbf{G}[\Sigma] = -\frac{1}{T} \frac{\delta F_{LW}[\Sigma]}{\delta \Sigma}. \quad (1.22)$$

Le principe variationnel s'énonce maintenant comme

$$\frac{\delta \Omega[\Sigma]}{\delta \Sigma} = 0, \quad (1.23)$$

ce qui définit

$$\mathbf{G}[\Sigma] = (\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma)^{-1}. \quad (1.24)$$

L'idée de Potthoff est de choisir un système de référence avec le même terme d'interaction mais un ensemble \mathbf{t}' différent de \mathbf{t} mais permettant de construire exactement la *self-energy*. C'est-à-dire que F_{LW} est calculé sur un sous-ensemble de tout l'espace fonctionnel disponible, soit celui généré par une partie à un corps \mathbf{t}' qui décrit un ensemble de sites découplés, mais chacun hybridé avec un bain. Cette idée est similaire à la méthode utilisée en DFT où un ensemble d'orbitales sans interactions, dites de Kohn-Sham sont choisies pour construire la densité. Dans les deux cas, en principe, ces fonctions ne sont qu'un moyen de générer la *self-energy*/densité et n'ont pas de significations physiques bien que le rapprochement soit souvent fait. Comme le terme d'interaction du système de référence est identique au modèle original, comme déjà mentionné, la fonctionnelle universelle de Luttinger-Ward Φ_{LW} demeure inchangée. Le grand potentiel devient donc

$$\Omega[\Sigma(\mathbf{t}')] = \Omega' - \text{Tr} \ln \left(- (\mathbf{G}'_0^{-1} - \Sigma(\mathbf{t}))^{-1} \right) + \text{Tr} \ln \left(- (\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma(\mathbf{t}))^{-1} \right), \quad (1.25)$$

où Ω' est le grand potentiel exact du système de référence et nous définissons $(\mathbf{G}'_0^{-1} - \Sigma(t))^{-1} \equiv \mathbf{G}'$, la fonction de Green exacte du système H' .

En conséquence, si nous pouvons résoudre H' , $\Omega[\Sigma]$ peut être évalué pour des *self-energy* d'essais du système de référence. Cela est obtenu en écrivant la condition d'extremum sous la forme $\partial\Omega_t[\Sigma(t)']/\partial t' = 0$ ce qui donne

$$\text{Tr} \left[\left(\frac{1}{\mathbf{G}'_0^{-1} - \Sigma(t')} - \mathbf{G}' \right) \frac{\partial \Sigma(t')}{\partial t'} \right] = 0. \quad (1.26)$$

L'idée de la DMFT est de regarder le réseau comme étant N amas identiques. Pour chaque amas, nous ajoutons N_s sites sans interactions. Pour l'instant, nous avons augmenté l'espace de Hilbert mais pas modifié le problème du réseau en tant que tel puisque les sites sans interactions sont découplés. La DMFT consiste à couper les amplitudes de saut t_{ij} entre les amas, à ajouter une hybridation avec les N_s sites sans interactions et finalement considérer $N_s \rightarrow \infty$. Nous avons donc maintenant un système d'impuretés de Anderson. Le terme d'interaction est le même. Ainsi, c'est une approximation de la vraie *self-energy*, mais qui est non perturbative, car la fonctionnelle est exacte pour un sous-espace des *self-energy* possibles. Nous considérons que la *self-energy* de ce système de référence est la bonne. À partir de l'Eq. (1.26), nous obtenons

$$\left(\frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma} \right)_{ii} = G'_{ii}. \quad (1.27)$$

En définissant la fonction de Green sans interaction du problème d'impureté comme \mathfrak{S}_0 , nous avons finalement

$$\mathfrak{S}_0^{-1} = \Sigma + G_{ii}^{-1}. \quad (1.28)$$

1.2.2 Approche à la Vollhardt

Nous présentons maintenant une autre dérivation de la DMFT à un site basée sur le grand potentiel, mais ne faisant pas intervenir de modèle d'impuretés, mais plutôt une moyenne sur un nombre infini de champs quantiques fluctuants. Pour ce faire, nous suivons attentivement la dérivation telle que donnée par Vollhardt [30]. L'idée est de considérer le problème d'électrons interagissant sur un réseau et de supposer que nous pouvons remplacer le tout par un électron se propageant dans un médium effectif dont la

nature est fixée pour que nous obtenions le bon propagateur. De plus, si nous considérons le problème en dimension infini, nous savons que le propagateur devient local. Nous considérons le mouvement d'une particule où celui-ci est affecté par les autres particules. Ce changement est décrit par une *self-energy* complexe et donc le problème est maintenant celui d'un électron sans interaction dans un potentiel homogène et cohérent $\Sigma_\sigma(\omega)$. Puisque le médium effectif est défini comme donnant la bonne description du système en $d = \infty$, si nous enlevons ce médium au site i et remplaçons par le potentiel d'interaction original, la diffusion devrait être nulle. Nous débutons donc par considérer un médium effectif homogène dont la densité d'énergie libre est $\frac{\Omega_{med}}{L}$ où L est le nombre de sites du réseau. Au site i , nous enlevons le médium et le remplaçons par un potentiel d'interaction original $V_i = Un_{i\bar{\sigma}}$. La densité d'énergie libre s'écrit ainsi

$$\frac{\Omega}{L} = \frac{\Omega_{med}}{L} - \Omega_i + \Omega_i^0. \quad (1.29)$$

Puisque le problème est local, $G_{ii,\sigma}(z) = G_{ii,\sigma}^0(z - \Sigma_\sigma(z))$. L'énergie libre du médium est donnée par

$$\frac{\Omega_{med}}{L} = -T \text{Tr} \sum_k \ln [G_{k\sigma}^0(i\omega_n - \Sigma_\sigma(i\omega_n))]^{-1}, \quad (1.30)$$

alors que celle du site avec le médium est

$$\Omega_i = -T \text{Tr} \ln [G_{ii,\sigma}^0(i\omega_n - \Sigma_\sigma(i\omega_n))]^{-1} = -T \text{Tr} \ln [G_{ii,\sigma}(i\omega_n)]^{-1}. \quad (1.31)$$

Pour le site avec l'interaction nous avons

$$\Omega_i^0 = -T \ln \mathcal{L}_i^0, \quad (1.32)$$

où

$$\mathcal{L}_i^0 = \int Dc_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^\dagger e^{-S^0}, \quad (1.33)$$

où S^0 est l'action

$$S^0 = -\text{Tr} [c_{i\sigma}^\dagger [G_{ii,\sigma}(i\omega_n)]^{-1} c_{i\sigma}] + U \int_0^\beta d\tau c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) - \text{Tr} [c_{i\sigma}^\dagger \Sigma_\sigma(i\omega_n) c_{i\sigma}]. \quad (1.34)$$

Si nous introduisons un propagateur local

$$\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1} \equiv G_{ii,\sigma}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_\sigma(i\omega_n) \quad (1.35)$$

nous pouvons réécrire

$$S^0 = -\text{Tr} \left[c_{i\sigma}^\dagger [\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1}(i\omega_n)]^{-1} c_{i\sigma} \right] + U \int_0^\beta d\tau c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau). \quad (1.36)$$

L'intégrale pour \mathcal{L}_i^0 est sur des variables de Grassman. En utilisant une transformation d'Hubbard-Stratonovich pour le terme en U dans S^0 , il est possible de réécrire le tout comme une intégrale fonctionnelle avec des variables ordinaires. Soit

$$\begin{aligned} & e^{-U \int_0^\beta d\tau c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau)} \\ &= \int D\eta D\zeta e^{-\frac{1}{2\beta} \int_0^\beta d\tau [\eta^2(\tau) + \zeta^2(\tau) - i\sqrt{2U\beta} \{ \zeta(\tau) [c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) + c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau)] - i\eta(\tau) [c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) - c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau)] \}]} \end{aligned} \quad (1.37)$$

Le problème a été réécrit en terme de particules sans interactions en présence d'une infinité de champs fluctuants. L'intégrale sur τ peut être obtenue puisque c'est quadratique en c . Le résultat est

$$S^0 = \frac{1}{2} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} (\zeta_\nu^2 + \eta_\nu^2) - \text{Tr} \left[\hat{\mathfrak{S}}_{0\sigma}^{-1} - \sqrt{\frac{U}{2\beta}} (\sigma\hat{\eta} + i\hat{\zeta}) \right]. \quad (1.38)$$

La densité d'énergie libre devient ainsi

$$\frac{\Omega}{L} = -T \text{Tr} \left[\int d\omega N(\omega) \ln [i\omega_n + \mu - \Sigma_\sigma(\omega) - \omega] - \ln [\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1} - \Sigma_\sigma(\omega)] \right] - T \ln \mathcal{L}_i^0. \quad (1.39)$$

Nous pouvons maintenant voir $\frac{\Omega}{L}$ comme une fonctionnelle de $\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1}$ avec la condition stationnaire

$$\frac{\delta\Omega}{\delta\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1}} = 0. \quad (1.40)$$

Cela permet d'écrire

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_\sigma(i\omega_n)} &= \frac{1}{\mathcal{L}_i^0} \int Dc Dc^\dagger c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} e^{-S^0} \\
&= \frac{1}{\mathcal{L}_i^0} \int D\eta D\zeta \left(\frac{1}{\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1} - \sqrt{\frac{U}{2\beta}} (\sigma\hat{\eta} + i\hat{\zeta})} \right)_{ii} e^{-S^0} \\
&\equiv \left\langle \left(\frac{1}{\mathfrak{S}_{0\sigma}^{-1} - \sqrt{\frac{U}{2\beta}} (\sigma\hat{\eta} + i\hat{\zeta})} \right)_{ii} \right\rangle_{\eta\zeta}
\end{aligned} \tag{1.41}$$

La *self-energy* est obtenue par un processus de moyenne, soit une intégration sur un nombre infini de champs fluctuants η et ζ qui simulent l'interaction. Celle-ci induit un couplage non trivial des énergies. Par conséquent, même si le problème est maintenant celui d'un électron avec un champ moyen effectif, il n'y a rien de simple. Ensuite la boucle de la DMFT est fermée en utilisant l'Eq. (1.35) et $G_{ii,\sigma}(z) = G_{ii,\sigma}^0(z - \Sigma_\sigma(z))$.

1.2.3 Dérivation à partir de la méthode de la cavité

Nous allons finalement présenter la dérivation originale [25], qui sera essentielle pour le développement de l'approche avec champ magnétique. Cette dérivation s'appelle celle de la cavité. Dans cette méthode, le réseau original Fig. 1.1-(a) est reformulé en enlevant un site à la position m . Le système est donc maintenant le réseau avec une cavité plus un site à l'externe Fig. 1.1-(b). Puisque les couplages sont toujours les bons, le problème est toujours le même, nous avons seulement réécrit l'Hamiltonien en mettant en évidence le terme du site m . L'approximation DMFT consiste à remplacer le réseau avec la cavité par un champ moyen dynamique c'est-à-dire un bain d'électrons sans interactions couplé au site de façon auto-cohérent Fig. 1.1-(c). Nous allons montrer exactement comment cela peut être fait mathématiquement. La fonction de partition du modèle de l'Hamiltonien de Hubbard est donnée en terme de l'action comme

$$Z = \int \prod_i Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S}, \tag{1.42}$$

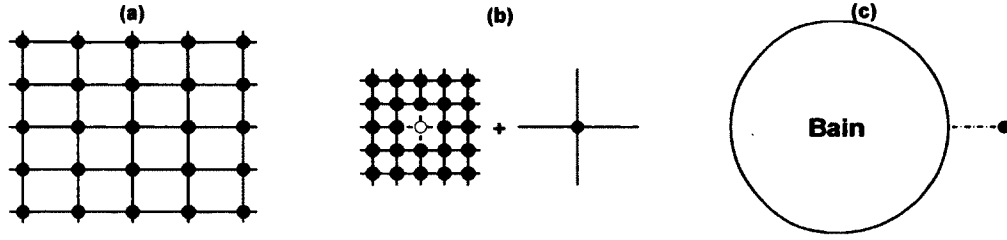


FIGURE 1.1 – Approximation de la cavité. (a) Le réseau original (b) Le réseau original est reformulé comme celui-ci moins un site plus un site seul. Les bons couplages sont conservés et donc le problème est toujours exact. (c) Le réseau sans le site est remplacé par un champ moyen dynamique soit un bain d'électrons sans interactions couplé au site seul.

où

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma} - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + U \sum_i n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right]. \quad (1.43)$$

Nous considérons donc la construction de la cavité Fig. 1.1-(b). Nous divisons l'action S en trois parties, S_0 la partie du site, ΔS l'interaction entre le site et le reste du système et S^0 le réseau avec la cavité.

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \sum_{\sigma} c_{m,\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{m,\sigma} + U n_{m\uparrow}(\tau) n_{m\downarrow}(\tau) \quad (1.44)$$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \left[t_{im} c_{i\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + t_{mi} c_{m\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right] \equiv \int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau) \quad (1.45)$$

$$S^0 = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i \neq m, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma} - \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i \neq m, j \neq m}} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + U \sum_{i \neq m} n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right]. \quad (1.46)$$

Nous pouvons donc écrire la fonction de partition comme

$$Z = \int Dc_{m\sigma}^\dagger Dc_{m\sigma} e^{-S_0} \int \prod_{i \neq m} Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S^0} e^{-\int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)}. \quad (1.47)$$

Nous développons $e^{-\int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)}$

$$e^{-\int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)} = 1 - \int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau) + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T_{\tau_1} \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) + \dots \quad (1.48)$$

et obtenons

$$Z = \int Dc_{m\sigma}^\dagger Dc_{m\sigma} e^{-S_0} Z^0 \left[1 - \int_0^\beta d\tau \langle \Delta S(\tau) \rangle^0 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle T_{\tau_1} \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) \rangle^0 + \dots \right]. \quad (1.49)$$

Les termes impairs du développement sont nuls et donc le premier terme non nul à être calculé sera celui contenant $\Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2)$

$$\begin{aligned} \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) = & \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} t_{im} t_{jm} c_{i\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{m\sigma}(\tau_1) c_{j\sigma'}^\dagger(\tau_2) c_{m\sigma'}(\tau_2) \\ & + t_{im} t_{mj} c_{i\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{m\sigma}(\tau_1) c_{m\sigma'}^\dagger(\tau_2) c_{j\sigma'}(\tau_2) \\ & + t_{mi} t_{jm} c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{i\sigma}(\tau_1) c_{j\sigma'}^\dagger(\tau_2) c_{m\sigma'}(\tau_2) \\ & + t_{mi} t_{mj} c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{i\sigma}(\tau_1) c_{m\sigma'}^\dagger(\tau_2) c_{j\sigma'}(\tau_2). \end{aligned} \quad (1.50)$$

Si nous supposons qu'il n'y a pas de brisure de symétrie (i.e. supraconductivité) et que nous sommes dans la phase paramagnétique, le premier et le quatrième terme de l'Eq. (1.50) sont zéro quand nous prenons la moyenne $\langle \rangle^0$. Nous obtenons donc pour le premier terme non nul présent dans Z

$$\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{\sigma} c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) \left[\sum_{ij} \left(t_{im} t_{mj} G_{ji}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) + t_{mi} t_{jm} G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \right) \right] c_{m\sigma}(\tau_2), \quad (1.51)$$

où $G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) = \langle T_{\tau_1} c_{i,\sigma}(\tau_2) c_{j,\sigma}^\dagger(\tau_1) \rangle^0$ est la fonction de Green's calculée en présence de la cavité (nous avons laissé tombé l'indice de spin).

Dans la limite de dimension infinie, c'est le seul terme non nul, les autres étant en

puissance de $\frac{1}{d}$. Ainsi

$$\begin{aligned}
S_{eff} &= \\
S_0 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) &\left[\sum_{ij} \left(t_{im} t_{mj} G_{ji}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) + t_{mi} t_{jm} G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \right) \right] c_{m\sigma}(\tau_2) \\
&= - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) \mathfrak{S}_0^{-1}(\tau_2 - \tau_1) c_{m\sigma}(\tau_2) + \int_0^\beta d\tau U n_{m\uparrow}(\tau) n_{m\downarrow}(\tau),
\end{aligned} \tag{1.52}$$

où nous avons défini

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(\tau_2 - \tau_1) \equiv - \left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \mu \right) \delta_{\tau_1 \tau_2} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(t_{im} t_{mj} G_{ji}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) + t_{mi} t_{jm} G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \right). \tag{1.53}$$

Ou, en fréquence de Matsubara

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(t_{im} t_{mj} G_{ji}^{(0)}(i\omega_n) + t_{mi} t_{jm} G_{ij}^{(0)}(i\omega_n) \right). \tag{1.54}$$

La fonction de Green du réseau avec la cavité peut être reliée à la fonction de Green du vrai réseau par la relation [25]

$$G_{ij}^{(0)} = G_{ij}^{int} - \frac{G_{im}^{int} G_{mj}^{int}}{G_{mm}^{int}}. \tag{1.55}$$

En effet, nous enlevons seulement les chemins possibles visitant le site. La présence du G_{mm}^{int} est nécessaire pour compter une seule fois la contribution du chemin quittant et retournant au site.

L'action effective Eq. (1.52) est l'action pour un site m . Nous pouvons imaginer la possibilité de trouver un problème d'impuretés donnant la même forme d'action et donc, nous pourrions projeter notre problème sur ce problème d'impuretés. La solution est simplement le problème bien connu de l'impureté d'Anderson. En effet, l'Hamiltonien pour ce problème est

$$H^{And} = \sum_{k,\sigma} \left(\varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V_k c_{k\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + V_k^* c_{m\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \right) - \sum_\sigma \mu c_{m\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + U n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} \tag{1.56}$$

et l'action est

$$\begin{aligned}
S = & \int_0^\beta d\tau \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \varepsilon_k \right) c_{k\sigma} + V_k c_{k\sigma}^\dagger(\tau) c_{m\sigma}(\tau) + V_k^* c_{m\sigma}^\dagger(\tau) c_{k\sigma}(\tau) \\
& + \underbrace{\int_0^\beta d\tau \sum_{\sigma} c_{m\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \mu \right) c_{m\sigma}}_{S_0} + U n_{m\uparrow} n_{m\downarrow}.
\end{aligned} \tag{1.57}$$

L'action est quadratique en c_k et peut donc être intégrée pour donner le résultat bien connu

$$S = S_0 - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{\sigma} c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) \left(\sum_k \frac{|V_k|^2 \delta_{\tau_1 \tau_2}}{\frac{\partial}{\partial\tau_1} + \varepsilon_k} \right) c_{m\sigma}. \tag{1.58}$$

Nous pouvons facilement montrer que l'action donnée par l'Eq. (1.58) est équivalente à l'action effective de l'Eq. (1.52) si nous avons l'égalité

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(\tau_2 - \tau_1) = - \left(\frac{\partial}{\partial\tau_1} - \mu \right) \delta_{\tau_1 \tau_2} + \sum_k \frac{|V_k|^2 \delta_{\tau_1 \tau_2}}{\frac{\partial}{\partial\tau_1} + \varepsilon_k}. \tag{1.59}$$

Le champ effectif est donc donné par les paramètres V_k and ε_k .

Nous retournons maintenant à la définition du champ effectif (champ de Weiss) en terme de la fonction de Green avec interaction (Eq. (1.54)), la fonction que nous voulons calculer. En utilisant l'Eq. (1.55), nous obtenons

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = & i\omega_n + \mu - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(t_{im} t_{mj} \left[G_{ji}^{int}(i\omega_n) - \frac{G_{jm}^{int}(i\omega_n) G_{mi}^{int}(i\omega_n)}{G_{mm}^{int}(i\omega_n)} \right] \right. \\
& \left. + t_{mi} t_{jm} \left[G_{ij}^{int}(i\omega_n) - \frac{G_{im}^{int}(i\omega_n) G_{mj}^{int}(i\omega_n)}{G_{mm}^{int}(i\omega_n)} \right] \right),
\end{aligned} \tag{1.60}$$

Puisque le problème est invariant sous translation $G_{ij} = G_{ji}$ et $t_{ij} = t_{ji}$ (à partir de maintenant, nous laissons tomber le *int* par simplicité)

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = & i\omega_n + \mu - \sum_{ij} t_{im} t_{mj} G_{ji}(i\omega_n) \\
& + \sum_{ij} t_{im} t_{mj} \frac{G_{jm}(i\omega_n) G_{mi}(i\omega_n)}{G_{mm}(i\omega_n)}.
\end{aligned} \tag{1.61}$$

Nous utilisons la représentation spectrale $t_{im} = \sum_{k'} \varepsilon_{k'} e^{ik' \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_i)}$ et $G_{ji} = \sum_q G_q e^{iq \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}$. Nous remplaçons dans l'Eq. (1.61) et nous obtenons le champ de Weiss

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \sum_k \varepsilon_k^2 G_k(i\omega_n) + \frac{(\sum_k \varepsilon_k G_k(i\omega_n))^2}{\sum_k G_k(i\omega_n)}. \quad (1.62)$$

Nous pouvons dériver les deux égalités suivantes en utilisant la définition $\xi \equiv i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)$:

$$\sum_k \varepsilon_k G_k = \sum_k \frac{\varepsilon_k - \xi + \xi}{\xi - \varepsilon_k} = -1 + \xi \sum_k G_k = -1 + \xi G_{mm} \quad (1.63)$$

$$\sum_k \varepsilon_k^2 G_k = \sum_k \frac{\varepsilon_k(\varepsilon_k - \xi) + \varepsilon_k \xi}{\xi - \varepsilon_k} = \xi \sum_k \frac{\varepsilon_k}{\xi - \varepsilon_k} = -\xi + \xi^2 G_{mm}, \quad (1.64)$$

ce qui permet de réécrire l'Eq. (1.62)

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \xi + G^{-1}(i\omega_n) = \Sigma(i\omega_n) + G^{-1}(i\omega_n), \quad (1.65)$$

où par simplicité $G_{mm} \equiv G$. Nous voyons bien que l'Eq. (1.65) est bien la même que l'Eq. (1.35) et l'Eq. (1.28). Cette dérivation nous montre par contre que le problème de la DMFT consiste à résoudre le problème de l'impureté d'Anderson. Cela est une tâche possible contrairement à l'approche d'une moyenne sur des champs fluctuants. Dans les deux sous-sections suivantes, nous allons présenter deux méthodes de solutionneur d'impuretés, une numériquement exacte et l'autre approximative.

1.3 Solutionneurs d'impuretés

1.3.1 Monte Carlo quantique en temps continu

Commençons par discuter de façon générale ce que représente une simulation Monte-Carlo en mécanique quantique. Nous allons suivre la présentation de Mathias Troyer [31] et aussi emprunter à celle de Millis [32]. Supposons que nous désirons calculer

$$A = \sum_{b \in E} A(b)p(b), \quad (1.66)$$

où $p > 0$ et $\sum_{b \in E} p(b) = 1$.

Si nous interprétons b comme étant une variable aléatoire avec distribution $p(b)$ alors

$$A = \langle A \rangle_p. \quad (1.67)$$

Le Monte Carlo consiste à estimer la quantité A en prenant M échantillons de b soit

$$A \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(b_i). \quad (1.68)$$

En physique statistique (classique et quantique), p est habituellement de la forme

$$p(b) = \frac{1}{Z} e^{-\beta F(b)}, \quad (1.69)$$

où F est l'énergie libre et Z la fonction de partition.

L'échantillon aléatoire b_i peut être généré en suivant une chaîne de Markov. Nous créons une marche aléatoire $b_0, b_1, b_2 \dots$ dans E avec les probabilités conditionnelles

$$p(b_n | b_{n-1} b_{n-2} \dots b_0) = p(b_n | b_{n-1}), \quad (1.70)$$

c'est-à-dire qu'il y a dépendance seulement sur le pas précédent.

L'échantillon $b_0, b_1, b_2 \dots$ sera bien généré selon $p(b)$ si nous avons un bilan détaillé, soit

$$p(x)p(y|x) = p(y)p(x|y), \quad (1.71)$$

si nous avons l'ergodicité, c'est-à-dire que l'application répétée de $p(y|x)$ permet d'aller de n'importe quel b vers n'importe quel autre b' et finalement, si $p(x|x) > 0$.

Pour obtenir un $p(y|x)$ qui satisfait bien le bilan détaillé, nous pouvons utiliser l'approche de Metropolis :

1. choisir une fonction candidate $q(y|x)$
2. étant donné x (étape $n - 1$), choisir y (étape n) selon $q(y|x)$
3. accepter $x \rightarrow y$ avec une probabilité $\min \left(1, \frac{p(y)q(x|y)}{p(x)q(y|x)} \right)$ sinon rester à x
4. contraindre $q(y|x)$ en utilisant la condition d'ergodicité

Une méthode Monte Carlo pour la mécanique quantique est numériquement exacte dans sa limite d'application, c'est-à-dire que sa seule source d'erreur est l'erreur statistique. L'un des avantages majeurs de toutes méthodes Monte Carlo est que l'erreur est $\Delta A = \sqrt{\frac{\text{Var}(A(b))}{M}}$ et est donc indépendante de l'ensemble E . Par exemple, pour résoudre des intégrales, c'est-à-dire si l'Eq. (1.66) est une somme de Riemann avec un nombre de b infini, l'ensemble E représente le nombre de dimensions et donc l'erreur est la même peu importe le nombre d'intégrales à résoudre.

Par contre, pour les problèmes concernant les fermions, il existe un désavantage majeur. En effet, quand nous traitons un problème de mécanique quantique

$$Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} \right] = \sum_i p_i \quad (1.72)$$

et nous pouvons avoir une problème de signe si certains des p_i satisfont la condition $p_i < 0$. Cela apparaît dans des systèmes fermioniques quand deux électrons échangent leur position. La solution consiste à échantillonner avec les valeurs absolues des poids

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i p_i}{\sum_i p_i} = \frac{\sum_i A_i \text{Sgn}(p_i) |p_i|}{\sum_i \text{Sgn}(p_i) |p_i|} \equiv \frac{\langle A \text{Sgn} \rangle_{|p|}}{\langle \text{Sgn} \rangle_{|p|}}. \quad (1.73)$$

La moyenne du signe est donnée par

$$\langle \text{Sgn} \rangle = \frac{\sum_i p_i}{\sum_i |p_i|} = \frac{Z}{Z_{|p|}}. \quad (1.74)$$

Z est la fonction de partition de fermions $Z = e^{-\beta F_{\text{ferm}}}$ alors que $Z_{|p|}$ est celle de particules sans signe (bosons) ayant le même Hamiltonien $Z_{|p|} = e^{-\beta F_{\text{bos}}}$. Comme il y a absence d'antisymétrie $F_{\text{bos}} < F_{\text{ferm}}$. Nous avons ainsi

$$\langle \text{Sgn} \rangle = e^{-\beta(F_{\text{ferm}} - F_{\text{bos}})}. \quad (1.75)$$

L'énergie libre est une quantité extensive et donc le signe moyen tend vers zéro exponentiellement quand la grandeur du système augmente et/ou la température diminue. Un Monte Carlo quantique (QMC) direct sur un système de fermions devient impraticable bien avant que la grandeur du système ne devienne intéressante ou la température assez basse. Nous pouvons remarquer la même chose à partir de l'erreur qui devient

exponentiellement grande.

$$\frac{\Delta Sgn}{\langle Sgn \rangle} = \frac{\sqrt{\langle Sgn^2 \rangle - \langle Sgn \rangle^2}}{\sqrt{M} \langle Sgn \rangle} \approx \frac{e^{\beta(F_{ferm} - F_{bos})}}{\sqrt{M}}. \quad (1.76)$$

D'où l'idée d'utiliser la DMFT où le QMC est appliqué à un système avec un nombre fini d'impuretés et où le reste du réseau est remplacé par un champ moyen dynamique. Il est aussi très important de noter que le cas de la DMFT à un site pour une bande est particulier puisqu'il est exempt de problème de signe.

Regardons maintenant la saveur particulière de QMC que nous utilisons ici, soit le Monte Carlo quantique en temps continu (CTQMC) avec le développement en hybridation. Nous n'allons pas présenter toutes les étapes de l'implémentation, cette tâche est faite en grands détails dans les notes de Werner [33]. Nous cherchons à résoudre le modèle d'une impureté d'Anderson tel que décrit par l'Eq. (1.56). Pour bien différencier les électrons du bain ($c_{k\sigma}$) de ceux de l'impureté ($c_{m\sigma}$) nous allons renommer ces derniers $d_\sigma, d_\sigma^\dagger$ puisque qu'il y a une seule impureté, un indice de position est inutile. Dans ce cas, le modèle d'Anderson s'écrit

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} \left(V_k c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + V_k^* d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \right) - \mu \sum_{\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow, \quad (1.77)$$

où $n_\sigma = d_\sigma^\dagger d_\sigma$.

Il y a ainsi quatre termes à l'Hamiltonien

$$H = H^0 + H_U + H_{bain} + H_{mixe}, \quad (1.78)$$

où $H^0 = -\mu(n_\uparrow + n_\downarrow)$, $H_U = U n_\uparrow n_\downarrow$ et forment ensemble l'Hamiltonien de l'impureté seule soit $H_{Loc} = H^0 + H_U$ alors que $H_{bain} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ est l'Hamiltonien du bain d'électrons libres et $H_{mixe} = \sum_{k,\sigma} \left(V_k c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + h.c. \right)$ est le terme qui permet l'échange d'électrons entre le bain et l'impureté. Comme dans [33], il est aussi possible de réécrire, sans rien changer, $H_U = U \left(n_\uparrow n_\downarrow - \frac{n_\uparrow + n_\downarrow}{2} \right)$ et $H^0 = - \left(\mu - \frac{U}{2} \right) (n_\uparrow + n_\downarrow)$.

Notre but est de calculer la fonction de partition

$$Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}], \quad (1.79)$$

où la trace est sur les deux types d'électrons soit $\text{Tr} = \text{Tr}_d \text{Tr}_c$ et seulement H apparaît dans l'exponentielle, le potentiel chimique est implicite dans celui-ci.

Nous voulons aussi calculer la fonction de Green de l'impureté, soit

$$g_\sigma(\tau) = \langle T_\tau d_\sigma(\tau) d_\sigma^\dagger \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [e^{-(\beta-\tau)H} d_\sigma e^{-\tau H} d_\sigma^\dagger]. \quad (1.80)$$

La CTQMC se base sur l'idée de produire un développement de la fonction de partition en une série de diagrammes et ensuite d'effectuer un échantillonnage stochastique dans l'espace de ces diagrammes. Dans cette méthode, fondamentalement, le temps n'est pas supposé discret d'où l'appellation *temps continu*. La fonction de partition Z est représentée comme une somme des configurations i avec un poids p_i

$$Z = \sum_i p_i, \quad (1.81)$$

ce qui est bien la forme désirée de l'Eq (1.72) et donc nous pouvons utiliser une chaîne de Markov pour résoudre le problème.

De façon précise pour notre cas, il faut écrire un développement diagrammatique de $H = H_0 + H_1$. En utilisant $O(\tau) = e^{\tau H_0} O e^{-\tau H_0}$ et $A(\beta) = T_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau H_1(\tau)}$

$$Z = \text{Tr} [e^{-\beta H_0} A(\beta)]. \quad (1.82)$$

Le développement en série de puissance donne

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n \text{Tr} [e^{-(\beta-\tau_n)H_0} (-H_1) \dots e^{-(\tau_2-\tau_1)H_0} (-H_1) e^{-\tau_1 H_0}]. \quad (1.83)$$

Cette forme est bien du type $Z = \sum_i p_i$, c'est-à-dire une somme sur toutes les configurations $i = \{\tau_1, \dots, \tau_n\}$, $n = 0, 1, \dots$ et $\tau_n \in [0, \beta]$ dont le poids est

$$p_i = \text{Tr} [e^{-(\beta-\tau_n)H_0} (-H_1) \dots e^{-(\tau_2-\tau_1)H_0} (-H_1) e^{-\tau_1 H_0}] d\tau_n. \quad (1.84)$$

Nous avons montré une façon générale de bâtir un Monte Carlo en temps continu comme un développement diagramatique. Nous devons ensuite déterminer autour de quel terme nous allons effectuer notre développement, soit quelle est la nature de H_1 . Ce choix détermine la saveur de CTQMC et, dans notre cas, nous utilisons un développement en hybridation puisque que notre série de puissance est en terme de l'hybridation du bain. Soit

$$H_0 = H^0 + H_U + H_{\text{bain}} \quad (1.85)$$

et

$$H_1 = H_{\text{mixe}}. \quad (1.86)$$

Comme H_1 est composé de deux termes $H_1 = \sum_{k,\sigma} (V_k c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + h.c.) = H_1^{d^\dagger} + H_1^d$ seulement les termes pairs contribuent dans le développement. De plus, l'évolution temporelle est régie par H_0 et celui-ci ne permet pas le *spin-flip*. Il doit donc y avoir un nombre égal d'opérateur de création et d'annihilation pour chacun des spins. Aussi, puisque les opérateurs c et d opèrent sur des espaces différents et que H_0 ne mélange pas les états de bain et de l'impureté, la fonction de partition peut être factorisée en deux termes qui se multiplient. Finalement, comme le bain est sans interaction, il existe un théorème de Wick pour celui-ci. La partie de Z donnée par la Tr_c sera donnée par le déterminant d'une certaine matrice dont la grandeur est égale à l'ordre de perturbation. Comme nous l'avons déjà mentionné plus haut, nous ne donnons pas tout le développement de la méthode mais référons le lecteur pour le reste à [33] où tout est fait en grands détails.

1.3.2 Théorie des perturbations itérées

La théorie des perturbations itérées originale est basée sur l'approximation que la *self-energy* de l'impureté est donnée par le diagramme d'ordre 2 du développement de l'impureté de Anderson autour de la solution Hartree-Fock soit où le propagateur G_0 est donné par

$$G_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu_0 - \Delta(i\omega_n)}, \quad (1.87)$$

où μ_0 contient la contribution Hartree-Fock et $\Delta(i\omega_n)$ est la fonction d'hybridation entre le niveau de l'impureté et le bain d'électrons libres. Cette fonction est définie comme le

second terme à droite de l'égalité de Eq (1.59), en fréquence de Matsubara,

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_k \frac{|V_k|^2}{i\omega_n - \varepsilon_k}. \quad (1.88)$$

Dans cette approximation, la *self-energy* de l'impureté avec interaction (celle du réseau en DMFT un site) est

$$\Sigma_\sigma(\tau) = \Sigma_\sigma^{(2)}(\tau) = U^2 G_0^\sigma(\tau) G_0^{-\sigma}(-\tau) G_0^{-\sigma}(\tau). \quad (1.89)$$

L'intérêt est que même si nous utilisons un développement perturbatif et donc exact par construction quand $U \rightarrow 0$, à demi-remplissage, il existe une égalité fortuite avec la limite très fort couplage (atomique) [34]. En effet, dans la limite $\frac{t}{U} \rightarrow 0$, $\Sigma(i\omega_n) \rightarrow (\frac{U}{2})^2 \frac{1}{i\omega_n}$ ce qui correspond à l'expression de la *self-energy* associée à la limite atomique à demi-remplissage soit $G_{at}^{1/2 \text{ rempli}} = \frac{1/2}{i\omega_n - \frac{U}{2}} + \frac{1/2}{i\omega_n + \frac{U}{2}}$. À demi-remplissage, l'Eq. (1.89) procure un schéma d'interpolation entre faible et large couplage. L'étape suivante est d'essayer de généraliser si possible au cas d'une densité quelconque. L'égalité fortuite avec la limite atomique n'existe plus dans ce cas. L'idée est de construire une approche de telle sorte que la limite atomique soit obtenue par construction. Un Ansatz a été proposé par Kajueter et Kotliar [35]

$$\Sigma(i\omega_n) = U \frac{n}{2} + \frac{A \Sigma^{(2)}(i\omega_n)}{1 - B \Sigma^{(2)}(i\omega_n)}. \quad (1.90)$$

Celui-ci peut être justifié en écrivant la *self-energy* comme un développement en fraction continue

$$\Sigma(i\omega_n) = \Sigma(i\infty) + \frac{a}{i\omega_n - b - \frac{c}{i\omega_n - d...}}, \quad (1.91)$$

où les constantes $a, b, c, d \dots$ sont obtenues en calculant les différents moments de la *self-energy*. L'approximation est de considérer que seulement quelques coefficients du développement en fraction continue (Eq. (1.91)) sont nécessaires pour relativement bien reproduire la dépendance en fréquence de la *self-energy*. En effet, nous savons qu'en général, à basse T , la densité d'états pour le cas non demi-remplissage devrait présenter deux bandes de Hubbard ainsi qu'un pic de quasi-particule. Dans le cas une bande, l'Eq. (1.90) est obtenue.

Les constantes A et B

$$\begin{aligned} A &= \frac{n(2-n)}{n_0(2-n_0)} \\ B &= \frac{(1-\frac{n}{2})U + \mu_0 - \mu}{\frac{n_0}{2}(1-\frac{n_0}{2})U^2}, \end{aligned} \quad (1.92)$$

où $n_0 = 2G_0(\tau = 0^-)$ et $n = 2G(\tau = 0^-)$, sont choisies de telle sorte que nous retrouvions la solution exacte dans la limite atomique en plus du résultat exact pour n'importe quel U dans la limite haute fréquence. La fonction de Green utilisée pour obtenir la densité n est

$$G(i\omega_n) = \sum_k \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma(i\omega_n)}. \quad (1.93)$$

Dans l'Eq. (1.92), μ est le potentiel chimique du réseau qui est déterminé en fixant la valeur de n alors que μ_0 est le potentiel chimique déterminé par la densité fictive n_0 .

Nous avons besoin d'une équation additionnelle pour fixer μ_0 . Ce problème a été étudié en détail dans les Refs. [36, 37]. Considérer $\mu = \mu_0$ n'est pas une bonne option. Fixer le théorème de Luttinger fonctionne seulement à très basse température [38]. Une approche communément utilisée [39] consiste à fixer $n = n_0$. Nous appelons cette approche IPT- n_0 . Celle-ci fonctionne plutôt bien pour un couplage plus petit que celui nécessaire pour obtenir un isolant de Mott à demi-remplissage U_{Mott} . Par contre, pour $U \geq U_{Mott}$ cette condition a pour conséquence que les résultats à basse température sont totalement inexacts. Il est possible de modifier la formule d'interpolation en exigeant la satisfaction du troisième moment de la fonction de Green. Dans ce cas, les problèmes de IPT- n_0 à fort couplage ne sont pas si sévères. Dans le Chapitre 2, nous montrons qu'il existe une autre condition simple, soit de forcer la double occupation à avoir sa valeur exacte, qui permet de conserver la forme simple de l'Eq. (1.90) tout en donnant des résultats satisfaisants pour $U \geq U_{Mott}$. Les détails de l'implémentation numérique de IPT sont donnés dans l'Annexe B du Chapitre 2 ainsi qu'une étape manquante dans l'Annexe E.

1.4 Transport

1.4.1 Définition générale

Dans l'approche linéaire, les courants créés par des forces externes appliquées au système sont linéairement proportionnelles à celles-ci. Nous considérons un système thermodynamique sur lequel des forces externes sont appliquées. Ces forces sont nommées F_i et la réponse à leur application, le courant, est appelé J_i . Les constantes de proportionnalité entre un courant J_a et une force F_b , sont elles nommées L_{ab} . Tel que montré dans [40], la condition importante à laquelle ces constantes doivent obéir est la relation d'Onsager $L_{ab} = L_{ba}$. Cette relation est vraie quand l'entropie interne générée est donnée par

$$\left. \frac{\partial s}{\partial t} \right|_{gen} = \sum_i J_i \cdot F_i. \quad (1.94)$$

Nous allons considérer ici seulement deux forces externes soit un gradient de température et un potentiel électrique. À partir de l'équation thermodynamique donnant la densité d'entropie $Tds = du - (\mu + q_e V)dn$ où u est l'énergie interne qui peut être calculé dans notre cas comme la moyenne de H , $\langle H \rangle$ dans l'ensemble grand canonique puisque le potentiel chimique μ apparaît explicitement. Le potentiel électrique est V , q_e est la charge et n est la densité de particules. Nous pouvons redéfinir le potentiel chimique comme $\tilde{\mu} = \mu + q_e V$ et dans une situation quasi-statique, la dérivée temporelle donne

$$\left. \frac{\partial s}{\partial t} \right|_{tot} = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \tilde{\mu} \frac{\partial n}{\partial t} \right). \quad (1.95)$$

Les équations de continuité pour les courants d'énergies J_{ener} et de particule J_{part} sont

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot J_{ener} &= 0 \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot J_{part} &= 0 \end{aligned} \quad (1.96)$$

et lorsque nous remplaçons dans l'Eq. (1.95), nous obtenons

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial s}{\partial t} \right|_{tot} &= \frac{1}{T} (-\nabla \cdot J_{ener} + \tilde{\mu} \nabla \cdot J_{part}) \\
&= -\nabla \cdot \left(\frac{1}{T} J_{ener} - \frac{\tilde{\mu}}{T} J_{part} \right) + \left(J_{ener} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - J_{part} \cdot \nabla \left(\frac{\tilde{\mu}}{T} \right) \right) \\
&= -\nabla \cdot J_s + \left(J_{ener} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - J_{part} \cdot \nabla \left(\frac{\tilde{\mu}}{T} \right) \right),
\end{aligned} \tag{1.97}$$

où nous avons défini le courant d'entropie $J_s \equiv \frac{1}{T} (J_{ener} - \tilde{\mu} J_{part})$. Puisque la chaleur est définie comme $dQ = TdS$, le courant de chaleur est donné par

$$J_Q = J_{ener} - \tilde{\mu} J_{part}. \tag{1.98}$$

Le deuxième terme à droite de l'égalité de l'Eq. (1.97) correspond bien à la forme nécessaire de l'Eq. (1.94) et donc nous avons

$$\left. \frac{\partial s}{\partial t} \right|_{tot} + \nabla \cdot J_s = \left. \frac{\partial s}{\partial t} \right|_{gen} \tag{1.99}$$

et nous pouvons définir les deux forces motrices associées aux deux courants J_{part} et J_Q soit, respectivement

$$F_{part} = -\nabla \left(\frac{\tilde{\mu}}{T} \right) \tag{1.100}$$

et

$$F_Q = \nabla \left(\frac{1}{T} \right). \tag{1.101}$$

Les courants J_{part} et J_Q , qui sont ici des objets phénoménologiques, sont donnés au niveau microscopique par les valeurs moyennes des opérateurs courants soit $\langle \hat{j}_x \rangle$ et $\langle \hat{j}_x^Q \rangle$. De plus, puisque le potentiel chimique est constant, $\nabla \tilde{\mu} = q_e \nabla V = -q_e E$ et donc

$$\begin{aligned}
\langle \hat{j}_x \rangle &= \frac{q_e}{T} L_{11} E_x + L_{12} \nabla_x \left(\frac{1}{T} \right) \\
\langle \hat{j}_x^Q \rangle &= \frac{q_e}{T} L_{21} E_x + L_{22} \nabla_x \left(\frac{1}{T} \right).
\end{aligned} \tag{1.102}$$

Les deux coefficients de transport qui nous intéressent particulièrement sont la conductivité et le pouvoir thermoélectrique.

1. La conductivité σ est le coefficient du courant de charge à température constante.

$$J_{elec} = q_e \langle \hat{j}_x \rangle = \frac{q_e^2}{T} L_{11} E_x = \sigma E_x. \quad (1.103)$$

Ainsi

$$\sigma = \frac{q_e^2}{T} L_{11}. \quad (1.104)$$

2. Tel que déjà discuté, le pouvoir thermoélectrique est la réponse en courant ouvert à l'application d'un gradient de température.

$$0 = \frac{q_e}{T} L_{11} E_x + L_{12} \nabla_x \left(\frac{1}{T} \right). \quad (1.105)$$

S étant défini par l'Eq. (8), nous obtenons de l'Eq. (1.105)

$$S = \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}}{L_{11}}. \quad (1.106)$$

La tâche consiste maintenant à calculer les L_{ab} à partir des modèles microscopiques. Les équations s'appellent formules de Kubo [41]. L'approche est montrée en détail dans [40] et nous nous contentons ici d'un bref survol. L'idée générale consiste à ajouter une perturbation externe P à l'Hamiltonien pour ensuite calculer la réponse du système à cet ajout. L'art réside dans la définition de cette perturbation. Dans une optique de réponse linéaire ce terme est de la forme du terme de droite de l'Eq. (1.94). Pour le champ électrique, cela est simple à comprendre, le couplage à un champ électromagnétique étant bien connu en mécanique quantique. L'opérateur quantité de mouvement \hat{p} est remplacé par $\hat{p} - q_e \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, où $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ est le potentiel vecteur. La perturbation est donc écrite à l'aide de \mathbf{A} , mais c'est bien de la même forme. Pour le cas du gradient de température, c'est plus mystérieux. En effet, F_Q (Eq. (1.101)) suggère que l'Hamiltonien de couplage devrait contenir un gradient de température. Comment est-ce possible? En effet, comment un objet T qui est un multiplicateur de Lagrange servant à déterminer l'énergie moyenne pour un système composé d'un grand nombre de particules pourrait-il se coupler à un opérateur quantique? La réponse à cette question tient dans l'idée de Luttinger [42, 43] d'introduire un couplage à un champ mécanique et de montrer que cela peut imiter le couplage à un gradient de température. Une démonstration pas à pas est présentée par Shastry dans [44]. D'un autre côté, il y a moyen d'éviter cette difficulté. Effectivement, sachant que $L_{12} = L_{21}$, nous pouvons calculer L_{21} qui est donné quand nous calculons le

courant de chaleur en présence d'une perturbation de champ électrique et donc le même couplage que pour L_{11} . Finalement, les coefficients L_{ab} sont donnés par les fonctions de corrélation courant-courant. En utilisant la définition des susceptibilités (Eq. (1.13)), nous avons en fonction du vecteur d'onde et de la fréquence (position et temps)

$$\chi_{ab}(\mathbf{q}, i\Omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_n \tau} \langle T_\tau \hat{J}_a(\mathbf{q}, \tau) \hat{J}_b(-\mathbf{q}, 0) \rangle \quad (1.107)$$

et en fréquence réelle

$$L_{ab} = T \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} \text{Im} \chi_{ab}(\mathbf{q} \rightarrow 0, i\Omega_n \rightarrow \omega + i0^+). \quad (1.108)$$

Les opérateurs courant sont définis pour un Hamiltonien particulier en suivant les lois de conservation

$$J_a = \frac{\partial O_a}{\partial t} = i[H, O_a], \quad (1.109)$$

où O_a représente l'opérateur de polarisation approprié, de particule ou de chaleur, ce qui donne un objet ressemblant à l'Eq. (1.98) par exemple pour le courant de chaleur. Ici, l'ordre dans lequel les limites ω et \mathbf{q} tendent vers zéro sont effectuées est très important. La limite thermodynamique (Volume $\rightarrow \infty$) $\mathbf{q} \rightarrow 0$ doit être prise avant la limite DC ($\omega \rightarrow 0$). Cette limite est appelée limite rapide. En effet, comme discuté dans [45], les deux limites ne commutent pas. Si nous définissons une vitesse de phase $v = \frac{\omega}{|\mathbf{q}|}$ de la perturbation externe et prenons $\mathbf{q} \rightarrow 0$ en premier, $v \rightarrow \infty$ et nous sommes dans la limite rapide. Si par contre nous essayons de prendre $\omega \rightarrow 0$ en premier, $v \rightarrow 0$, nous sommes dans la limite lente. Dans ce cas, la perturbation est adiabatique et les charges et l'énergie peuvent se redistribuer pour obtenir un état d'équilibre. Cette distinction sera importante dans la Section 1.5 où nous discutons d'approximations possibles pour le pouvoir thermoélectrique.

La question suivante est de savoir comment écrire les expressions lorsque nous avons un système discret comme dans la méthode *tight-binding* (TB) et que la méthode de solution est la DMFT et donc, de façon effective, en dimension infinie. Dans le cas TB, les opérateurs O_a deviennent

$$O_1^x = \sum_i R_i^x n_i, \quad (1.110)$$

$$O_2^x = \sum_i R_i^x (h_i - \mu n_i), \quad (1.111)$$

avec n_i et h_i les opérateurs locaux de charge et d'énergie. La dérivation a été considérée rigoureusement par Paul et Kotliar [46]. Ils ont montré que non seulement les termes appelés corrections de vertex s'annulent pour la conductivité comme c'était déjà connu, mais que c'est aussi le cas pour L_{12} . Les expressions obtenues pour le modèle de Hubbard à une bande sont (la limite $\mathbf{q} \rightarrow 0$ a été explicitement appliquée et toute référence à ce \mathbf{q} disparaît à partir de maintenant sauf si mentionné autrement)

$$\chi_{11}(i\Omega_l) = - \sum_{k,\sigma} v_k^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_{k\sigma}(i\omega_n) G_{k\sigma}(i\omega_n + i\Omega_l), \quad (1.112)$$

où Ω_l est une fréquence de Matsubara bosonique alors que ω_n en est une fermionique. La vitesse v_k est donnée par $v_k = \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x}$. Pour χ_{21} , nous avons

$$\chi_{21}(i\Omega_l) = - \sum_{k,\sigma} v_k^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \left(i\omega_n + \frac{i\Omega_l}{2} \right) G_{k\sigma}(i\omega_n) G_{k\sigma}(i\omega_n + i\Omega_l) + \underbrace{\sum_{k,\sigma} v_k^2 n_{k\sigma}}_?. \quad (1.113)$$

Le point d'interrogation pour le deuxième terme de droite de l'Eq. (1.113) sert à pointer qu'habituellement, il n'est pas présent dans la définition du terme dit de la bulle, comme par exemple dans Kontani [47] alors qu'il apparaît dans l'article de Paul et Kotliar [46]. Lorsque le prolongement analytique est fait à partir de résultats analytiques, cela n'a pas d'importance puisque celui-ci ne contribue pas à la partie réelle de L_{12} en fréquences réelles obtenue à partir de la partie imaginaire de χ_{12} (Eq. (1.108)). Par contre, nous voudrions écrire les expressions pour les coefficients du transport L_{11} and L_{12} de manière optimale pour les obtenir à partir d'un G provenant d'un calcul DMFT. Notre intention est d'effectuer tous les calculs en temps imaginaire (fréquence) et il deviendra évident si sa présence est importante ou non. Son existence peut être retracée à la façon dont nous choisissons de traiter $\tau = 0$ quand nous écrivons les expressions en fréquence de Matsubara. Une chose que nous pouvons immédiatement voir est que le terme avec $\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} i\omega_n G_{k\sigma}(i\omega_n) G_{k\sigma}(i\omega_n + i\Omega_l)$ dans l'Eq. (1.113) ne converge pas très bien puisque, asymptotiquement, il va comme $\frac{1}{i\omega_n}$. Ce fait devrait nous indiquer que si nous voulons effectuer le calcul en fréquence de Matsubara, le second terme à droite de l'égalité devrait être inclus pour s'assurer que tout converge bien.

Pour comprendre ce qui peut arriver i.e. que faire avec le deuxième terme de l'Eq. (1.113), considérons le cas sans interaction ($U = 0$). Nous connaissons le résultat exact pour la fonction de Green $G_k(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_k - \mu)}$. Concentrons-nous premièrement sur le terme $l = 0$ seulement

$$\chi_{12}^{U=0}(0) = -2 \sum_k v_k^2 \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{i\omega_n}{(i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_k)^2}, \quad (1.114)$$

où $\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k - \mu$. Cette fonction n'en est pas une avec des pôles simples, mais il existe un truc simple. En effet,

$$\chi_{12}^{U=0}(0) = -2 \sum_k v_k^2 \frac{\partial}{\partial \tilde{\varepsilon}_k} \left(\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{i\omega_n}{(i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_k)} \right), \quad (1.115)$$

qui est maintenant une fonction avec un pôle simple mais, malheureusement, elle est encore plus problématique que précédemment. En effet, son comportement asymptotique est maintenant 1, une constante et la somme ne devrait pas converger si nous voulons utiliser le théorème des résidus. Mais, pour le moment, oublions cela et trouvons la solution comme si tout était convergeant et nous discuterons le tout plus loin. Le résidu de cette fonction est $\tilde{\varepsilon}_k$ et nous pouvons calculer

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n \tau} i\omega_n}{(i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_k)} &= -\tilde{\varepsilon}_k f(-\tilde{\varepsilon}_k) e^{-\tilde{\varepsilon}_k \tau} \Theta(\tau) + \tilde{\varepsilon}_k f(\tilde{\varepsilon}_k) e^{-\tilde{\varepsilon}_k \tau} \Theta(-\tau) \\ &= -\tilde{\varepsilon}_k e^{-\tilde{\varepsilon}_k \tau} \left[(1 - f(\tilde{\varepsilon}_k)) \Theta(\tau) - f(\tilde{\varepsilon}_k) \Theta(-\tau) \right] \\ &= -\tilde{\varepsilon}_k e^{-\tilde{\varepsilon}_k \tau} \left[\Theta(\tau) - f(\tilde{\varepsilon}_k) \right]. \end{aligned} \quad (1.116)$$

Si nous prenons la dérivée par rapport à $\tilde{\varepsilon}_k$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \chi_{12}^{U=0}(0) &= \lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \left[2 \sum_k v_k^2 \left(-\frac{\partial f(\tilde{\varepsilon}_k)}{\partial \tilde{\varepsilon}_k} \right) \tilde{\varepsilon}_k e^{-\tilde{\varepsilon}_k \tau} + 2 \sum_k v_k^2 e^{-\tilde{\varepsilon}_k \tau} (\Theta(\tau) - f(\tilde{\varepsilon}_k)) \right] \\ &= 2 \sum_k v_k^2 \left(-\frac{\partial f(\tilde{\varepsilon}_k)}{\partial \tilde{\varepsilon}_k} \right) \tilde{\varepsilon}_k + \begin{cases} 2 \sum_k v_k^2 (1 - f(\tilde{\varepsilon}_k)) & \tau = 0^+ \\ - 2 \sum_k v_k^2 f(\tilde{\varepsilon}_k) & \tau = 0^- \end{cases}. \end{aligned} \quad (1.117)$$

Si nous regardons à Ω_l fini, nous pouvons réécrire, en voyant que la fonction a deux pôles simples.

$$\begin{aligned}
 \chi_{12}^{U=0}(i\Omega_l \neq 0) &= -2 \lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \sum_k v_k^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \frac{i\omega_n + \frac{i\Omega_l}{2}}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_k)(i\omega_n + i\Omega_l - \tilde{\epsilon}_k)} \\
 &= -2 \lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \sum_k v_k^2 \frac{[(\tilde{\epsilon}_k - \frac{i\Omega_l}{2}) e^{i\Omega_l \tau} - (\tilde{\epsilon}_k + \frac{i\Omega_l}{2})] e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau}}{i\Omega_l} ((1 - f(\tilde{\epsilon}_k))\Theta(\tau) - f(\tilde{\epsilon}_k)\Theta(-\tau)) \\
 &= \begin{cases} 2 \sum_k v_k^2 (1 - f(\tilde{\epsilon}_k)) & \tau = 0^+ \\ - 2 \sum_k v_k^2 f(\tilde{\epsilon}_k) & \tau = 0^- \end{cases} .
 \end{aligned} \tag{1.118}$$

Nous obtenons ainsi

$$\chi_{12}^{U=0}(i\Omega_l) = 2 \sum_k v_k^2 \left(-\frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_k)}{\partial \tilde{\epsilon}_k} \right) \tilde{\epsilon}_k \delta_{\Omega_l, 0} + \begin{cases} 2 \sum_k v_k^2 (1 - f(\tilde{\epsilon}_k)) & \tau = 0^+ \\ - 2 \sum_k v_k^2 f(\tilde{\epsilon}_k) & \tau = 0^- \end{cases} . \tag{1.119}$$

Il est clair qu'il y a un problème provenant de $\tau = 0$. Comme nous avons déjà proposé plus haut, le terme manquant de Eq. (1.113) devrait permettre que tout se comporte bien. Si nous effectuons de nouveau le calcul de $\chi_{12}^{U=0}$, mais avec $\sum_{k,\sigma} v_k^2 n_{k\sigma}$ inclus, nous obtenons

$$\begin{aligned}
 \chi_{12}^{U=0}(i\Omega_l) &= -2 \lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \sum_k v_k^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \left[\frac{i\omega_n + \frac{i\Omega_l}{2}}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_k)(i\omega_n + i\Omega_l - \tilde{\epsilon}_k)} - \frac{1}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_k} \right] \\
 &= -2 \lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \sum_k v_k^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \frac{\tilde{\epsilon}_k - \frac{i\Omega_l}{2}}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_k)(i\omega_n + i\Omega_l - \tilde{\epsilon}_k)} .
 \end{aligned} \tag{1.120}$$

Cette fonction se comporte comme $O\left(\frac{1}{(i\omega_n)^2}\right)$ asymptotiquement. Si Ω_l est non nul, nous avons une fonction avec deux pôles simples et alors le théorème des résidus nous donne

$$\begin{aligned}
 \lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \frac{\tilde{\epsilon}_k - \frac{i\Omega_l}{2}}{(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_k)(i\omega_n + i\Omega_l - \tilde{\epsilon}_k)} \\
 = \lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \frac{(e^{i\Omega_l \tau} - 1) e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau}}{i\Omega_l} \left[(1 - f(\tilde{\epsilon}_k))\Theta(\tau) - f(\tilde{\epsilon}_k)\Theta(-\tau) \right] = 0,
 \end{aligned} \tag{1.121}$$

puisque pour Ω_l fini et $\tau \rightarrow 0^\pm$, $\lim_{\tau \rightarrow 0^\pm} \frac{(e^{i\Omega_l \tau} - 1)e^{-\epsilon_k \tau}}{i\Omega_l} = 0$. Quand $\Omega_l = 0$, l'Eq. (1.120) a un pôle double et nous pouvons utiliser le truc de l'Eq. (1.115) et alors le calcul de l'Eq. (1.121) donnerait maintenant $-\tilde{\epsilon}_k \left(-\frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_k)}{\partial \tilde{\epsilon}_k} \right)$. Nous obtenons finalement pour Eq. (1.120)

$$\chi_{12}^{U=0}(i\Omega_l) = 2 \sum_k v_k^2 \tilde{\epsilon}_k \left(-\frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_k)}{\partial \tilde{\epsilon}_k} \right) \delta_{\Omega_l, 0}. \quad (1.122)$$

Il n'y a plus d'indétermination provenant de $\tau = 0$. Cela montre que si nous voulons effectuer le calcul en fréquence de Matsubara, nous devons impérativement conserver le $\sum_k v_k^2 n_k$ dans la définition de χ_{12} .

Nous allons maintenant réécrire χ_{11} (Eq (1.112)) et χ_{12} (Eq (1.113)) sous des formes qui nous seront utiles, c'est-à-dire qu'elles permettront un calcul numérique le plus efficace possible. Nous utiliserons le fait que la somme sur ω_n dans Eq (1.112)(Eq (1.113)) est, en fait, une convolution. En effet, en utilisant $G_{k\sigma}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau_1 e^{i\omega_n \tau_1} G_{k\sigma}(\tau_1)$ et $G_{k\sigma}(i\omega_n + i\Omega_l) = \int_0^\beta d\tau_2 e^{i(\omega_n + \Omega_l)\tau_2} G_{k\sigma}(\tau_2)$ nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_{k\sigma}(i\omega_n) G_{k\sigma}(i\omega_n + i\Omega_l) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 e^{i\omega_n \tau_1} e^{i(\omega_n + \Omega_l)\tau_2} G_{k\sigma}(\tau_1) G_{k\sigma}(\tau_2) \\ &= \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 e^{i\Omega_l \tau_2} \underbrace{\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n(\tau_1 + \tau_2)} G_{k\sigma}(\tau_1) G_{k\sigma}(\tau_2)}_{\delta(\tau_1 + \tau_2)} \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} G_{k\sigma}(\tau) G_{k\sigma}(-\tau) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} g_k(\tau) \\ &\equiv F_k(\Omega_l) \end{aligned} \quad (1.123)$$

Ainsi, nous obtenons

$$\chi_{11}(i\Omega_l) = - \sum_{k,\sigma} v_k^2 F_k(\Omega_l) \quad (1.124)$$

Attardons-nous maintenant à χ_{21} . En regardant l'Eq. (1.113) avec le deuxième terme puisque nous savons qu'il est nécessaire, nous voyons que nous pouvons séparer la somme en deux, c'est-à-dire (nous laissons tomber l'indice de spin étant donné que nous considé-

rons l'état paramagnétique, nous avons seulement à multiplier tout par deux)

$$\chi_{21}(i\Omega_l) = - \sum_k v_k^2 Q_k(\Omega_l). \quad (1.125)$$

En explicitant,

$$\begin{aligned} Q_k(\Omega_l) &= \frac{1}{\beta} \underbrace{\sum_{\omega_n} [i\omega_n G_k(i\omega_n) - 1] G_k(i\omega_n + i\Omega_l)}_I \\ &+ \frac{1}{\beta} \underbrace{\sum_{\omega_n} [(i\omega_n + i\Omega_l) G_k(i\omega_n + i\Omega_l) - 1] G_k(i\omega_n)}_{II} \\ &\equiv \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} M_k(i\omega_n) G_k(i\omega_n + i\Omega_l) + \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} N_k(i\omega_n + i\Omega_l) G_k(i\omega_n) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 e^{i\omega_n \tau_1} e^{i(\omega_n + \Omega_l) \tau_2} M_k(\tau_1) G_k(\tau_2) \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 e^{i\omega_n \tau_2} e^{i(\omega_n + \Omega_l) \tau_1} N_k(\tau_1) G_k(\tau_2) \\ &= \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 e^{i\Omega_l \tau_2} M_k(\tau_1) G_k(\tau_2) \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n(\tau_1 + \tau_2)} \\ &+ \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 e^{i\Omega_l \tau_1} N_k(\tau_1) G_k(\tau_2) \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n(\tau_1 + \tau_2)} \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} M_k(-\tau) G_k(\tau) + \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} N_k(\tau) G_k(-\tau) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_l \tau} h_k(\tau). \end{aligned} \quad (1.126)$$

Regardons $M_k(-\tau)$ et ensuite $N_k(\tau)$

$$\begin{aligned}
M_k(-\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \tau} (i\omega_n G_k(i\omega_n) - 1) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{\partial}{\partial \tau} e^{i\omega_n \tau} \left(G_k(i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n} \right) \\
&= \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n(-\tau)} \left(G_k(i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n} \right) \\
&= \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n(-\tau)} G_k(i\omega_n) - \underbrace{\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n(-\tau)}}{i\omega_n}}_{\text{constante}} \right] \\
&= \frac{\partial G_k(-\tau)}{\partial \tau}.
\end{aligned} \tag{1.127}$$

Cette dérivation est possible puisque $\left(G_k(i\omega_n) - \frac{1}{i\omega_n} \right)$ converge comme $\frac{cst}{(i\omega_n)^2}$. La même démarche est appliquée pour $N_k(\tau)$ et nous obtenons

$$N_k(\tau) = -\frac{\partial G_k(\tau)}{\partial \tau}. \tag{1.128}$$

Nous obtenons finalement pour $h_k(\tau)$

$$h_k(\tau) = \frac{\partial G_k(-\tau)}{\partial \tau} G_k(\tau) - \frac{\partial G_k(\tau)}{\partial \tau} G_k(-\tau). \tag{1.129}$$

Pour les calculs numériques, nous utiliserons la définition donnée par l'Eq. (1.125). Pour ce qui est de la façon exacte d'implémenter le calcul numérique, cela est discuté dans l'Annexe D du Chapitre 2.

1.4.2 Prolongement analytique

Une fois que nous avons calculé $\chi_{ab}(\Omega_l)$, pour obtenir L_{ab} donné par $\frac{\text{Im}\{\chi_{ab}(\omega)\}}{\omega}$, nous devons procéder à un prolongement analytique. Alors que cette action est facile lorsque nous sommes en présence d'expressions analytiques (i.e. $i\Omega_l \rightarrow \omega + i\delta$), pour des résultats numériques, cela est plus complexe. Dans ce travail, nous allons considérer les deux techniques standards.

En premier lieu, la méthode de l'entropie maximale qui est résumée dans l'Annexe D et qui permet, dans l'approche développée par Bergeron *et al.* [48] d'être appliquée directement à χ_{11} en fréquence de Matsubara bosonique. Malheureusement, elle ne peut être appliquée directement à χ_{12} puisque L_{12} n'est pas strictement positive en fonction de la fréquence. Dans ce cas, nous devrions appliquer l'entropie maximale à la *self-energy* et, à l'aide de celle-ci, calculer L_{12} . Comme nous allons étudier des isolants de Mott à fort couplage, le prolongement analytique est très difficile et dans le Chapitre 2, nous présentons un minimum de résultats là-dessus.

En deuxième lieu, nous pouvons essayer d'utiliser l'approximation de Padé à N points. Cette méthode ne sera applicable rigoureusement qu'aux résultats IPT puisque la CT-QMC ayant des erreurs statistiques, Padé n'est pas vraiment numériquement stable. Cette méthode est très rapide, mais comme le prolongement analytique est un problème mal conditionné, le Padé peut être douteux. Nous utilisons l'algorithme récursif de Vidberg and Serene [49] qui est présenté à l'Annexe C. Nous pourrions aussi définir le problème sous une forme matricielle comme dans [50], mais la matrice est toujours très mal conditionnée et nous obtenons de meilleurs résultats avec l'approche récursive hormis si nous pouvons considérer des dizaines de décimales. En appliquant Padé, nous obtenons $\chi_{ab}(\omega)$. Il est donc nécessaire d'obtenir $\frac{\text{Im}\{\chi_{ab}(\omega)\}}{\omega}$. Pour toutes les fréquences $\omega \neq 0$, nous prenons seulement $\chi_{ab}(\omega)$ et divisons par ω . Pour la limite DC ($\omega = 0$) nous devons être plus ingénieux. Si $\frac{\text{Im}\{\chi_{ab}(\omega)\}}{\omega}\Big|_{\omega=0}$ est un nombre fini, dans la limite $\omega \rightarrow 0$, $\text{Im}\{\chi_{ab}(\omega)\} \propto \omega$. Si nous définissons $f(\omega) \equiv \text{Im}\{\chi_{ab}(\omega)\}$ et appliquons un développement de Taylor autour de zéro, nous obtenons

$$f(\omega) \approx f(0) + f'(\omega)\Big|_{\omega=0} \omega + \frac{1}{2} f''(\omega)\Big|_{\omega=0} \omega^2 + \dots \quad (1.130)$$

Mais comme $f(0) = 0$ nous avons

$$\frac{\text{Im}\{\chi_{ab}(\omega)\}}{\omega}\Big|_{\omega=0} = f'(\omega)\Big|_{\omega=0}. \quad (1.131)$$

Notre tâche consiste donc à trouver la valeur de la dérivée de $\text{Im}\{\chi_{ab}(\omega)\}$ at $\omega = 0$. Nous la trouvons en utilisant une méthode de dérivé adaptative. Nous pouvons le faire car nous utilisons Padé et pouvons évaluer $\chi_{ab}(\omega)$ pour n'importe quelle fréquence ω . La méthode utilisée est la suivante. Nous commençons avec une approximation de la dérivée

de la fonction f appelée der à x avec un pas initial h et critère d'arrêt del . Nous divisons le pas par deux, $h' = \frac{h}{2}$. La nouvelle approximation de la dérivée est

$$der_1 = \frac{f(x + h') - f(x - h')}{2h'}. \quad (1.132)$$

Nous comparons der_1 et der et si le critère d'arrêt del est rencontré, nous retournons l'approximation Richardson de der et der_1 qui est appelée der_{final} i.e.

$$der_{final} = \frac{4der_1 - der}{3}. \quad (1.133)$$

Tant que le critère del n'est pas atteint, nous appelons récursivement la fonction, mais avec le nouveau der_1 et h' comme approximation de la dérivée et du pas initiaux. Par contre, le calcul de $\chi_{ab}(\Omega_l)$ peut être très long et donc il est apparu qu'il était préférable d'utiliser un calcul en fréquences réelles pour le transport avec IPT. Cela est discuté dans le Chapitre 2.

1.4.3 Évaluation de la limite DC en fréquences réelles

Ici nous montrons une autre façon de trouver la limite DC des coefficients L_{ab} . L'idée est de travailler en fréquence réelle en effectuant le prolongement analytique sur la *self-energy* en premier. Si nous avons la *self-energy* en fréquence réelle et indépendante de k , les équations pour les L_{ab} prennent la forme suivante

$$L_{ab} = \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \omega^{b-1} \left[\sum_{k,\sigma} v_k^2 N_k(\omega)^2 \right]^a, \quad (1.134)$$

où

$$N_k(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_k(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma(\omega)} \right\}.$$

Avec la DMFT, $\Sigma(\omega)$ est obtenue et ensuite $N_k(\omega)$ peut être trivialement obtenue. Les difficultés sont d'obtenir la bonne Σ en fréquences réelles et d'effectuer les intégrales/sommes. Dans notre cas, nous désirons L_{11} et L_{12} puisque $S = -\frac{k_B}{|q_e|T} \frac{L_{12}}{L_{11}}$. Nous voyons que le numérateur de S , L_{12} , implique un moment impair et donc S sera très sensible à une présence d'asymétrie particule-trou.

Nous pourrions effectuer le calcul numérique pour cette expression (Eq. (1.134)) en uti-

lisant une méthode d'intégration numérique adaptative et tridimensionnelle comme celle obtenue dans le Chapitre 2 en plus d'une autre routine d'intégration 1d. Mais, des calculs numériques nous ont montré qu'il y a une façon plus rapide de faire le calcul sans vraiment subir une perte de précision. Cette méthode est présentée et utilisée dans le Chapitre 2. En résumé, nous éliminons l'intégrale triple en la remplaçant par une intégrale 1d sur une variable d'énergie. Nous pouvons le faire puisque Σ est exclusivement une fonction de ω et donc nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} L_{1b} &= 2 \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \omega^{b-1} \int d\varepsilon N(\omega, \varepsilon)^2 \underbrace{\sum_k v_k^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}_{\equiv X(\varepsilon)} \\ &= 2 \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \omega^{b-1} \int d\varepsilon N(\omega, \varepsilon)^2 X(\varepsilon). \end{aligned} \quad (1.135)$$

Il est nécessaire de calculer la fonction $X(\varepsilon)$. Même si celle-ci n'inclut que la bande sans interaction, son calcul n'est pas évident. Dans le cas d'un cubique à face centrée en $3d$ nous n'avons pas de façon analytique pour faire le calcul. Nous devons nous tourner vers un calcul numérique. La forme générale de ce que nous voulons calculer est $\sum_k F(\mathbf{k})\delta(\varepsilon - \varepsilon_f)$. La question est donc de savoir comment numériquement considérer la fonction delta? L'approche la plus simple serait de remplacer la fonction delta par une Lorentzienne et d'effectuer l'intégrale en utilisant une approche adaptative. Mais, cette approximation pour la fonction delta n'est pas très bonne. Par exemple, nous n'obtenons pas les singularités de Van Hove dans $N(\varepsilon)$. Notre choix est d'utiliser une approche Monte Carlo. Celle-ci est expliquée dans l'Annexe C du Chapitre 2.

1.5 Approximations pour le pouvoir thermoélectrique

Dans cette section, nous allons discuter de trois approches possibles pour tenter d'approcher le pouvoir thermoélectrique. Dans le premier cas, nous allons regarder comment la limite haute fréquence ($\omega \rightarrow \infty$) de L_{ab} peut donner de l'information sur la limite DC, qui nous intéresse. Ensuite, nous allons regarder comment inverser l'ordre dans lequel les limites $\mathbf{q} \rightarrow 0$ et $\omega \rightarrow 0$ sont effectuées, c'est-à-dire considérer la limite lente, change le résultat. Finalement, nous allons nous intéresser à ce qui peut être fait uniquement en

fréquence de Matsubara ou en temps imaginaire.

1.5.1 Limite haute fréquence ; S^*

À première vue, s'intéresser à la limite de fréquence infinie pour chercher de l'information sur la limite DC peut sembler insensé. Mais, le pouvoir thermoélectrique (Eq. (1.106)) est un ratio. Bien que les L_{ab} puissent avoir une forte dépendance en fréquence, il est possible qu'une fois que nous formons le ratio approprié, la fonction obtenue soit faiblement dépendante de la fréquence. L'exemple du coefficient de Hall R_H est utile. En effet, celui-ci est formé du ratio entre la conductivité hors-diagonale σ_{xy} et le carré de la conductivité longitudinale σ_{xx}^2 . Dans le modèle très simple de Drude, σ_{xy} et σ_{xx} dépendent fortement de la fréquence alors que lorsque R_H est calculé, le résultat est indépendant de la fréquence. Conséquemment, nous pouvons calculer les σ à n'importe quelle fréquence et obtenir le bon R_H DC. Peut-être que R_H n'est pas fortement dépendant de la fréquence pour un système fortement corrélé. C'est l'idée développée par Shastry [51] et celle-ci s'est avérée utile. Shastry et collaborateurs [44] se sont appliqués à tester la même idée pour le pouvoir thermoélectrique. Leurs résultats pour les cobaltates modélisés par un modèle $t - J$ sur un réseau triangulaire se comparent bien avec l'expérience. Mais, qu'arrive-t-il pour un matériau modélisé par l'Hamiltonien de Hubbard est une question centrale de cette thèse. Nous résumons ici les résultats importants de la dérivation de la valeur haute fréquence du pouvoir thermoélectrique, que nous définissons par S^* . Celle-ci est détaillée par Shastry dans [44] et aussi par Xu *et al.* dans [45] qui se sont intéressés à une problématique similaire à la nôtre. Nous adoptons ici une notation plus proche de Xu *et al.* [45] alors que celle de Shastry [44] est majoritairement utilisée dans l'article composant le Chapitre 3.

Si nous prenons $L_{ab}(\omega)$ sans pour autant considérer la limite $\omega \rightarrow 0$, c'est-à-dire en enlevant $\lim_{\omega \rightarrow 0}$ dans l'Eq. (1.108) et en regardant plutôt une limite $\omega \gg \omega_c$, où ω_c est la plus grande énergie caractéristique du système, nous obtenons

$$\lim_{\omega \gg \omega_c} L_{ab}(\omega) = \frac{T}{\omega} \langle L_{ab}^* \rangle + O\left(\frac{1}{\omega^2}\right), \quad (1.136)$$

où les $\langle L_{ab}^* \rangle$ sont donnés par

$$L_{ab}^* = i \langle [J_a^x, O_b^z] \rangle, \quad (1.137)$$

J_a^x étant l'opérateur courant approprié et les O_b^x sont définis par les Eqs. (1.110) et (1.111). Shastry [44] définit plutôt les L_{ab}^* en utilisant les expressions en vecteurs d'onde. L'étape suivante consiste à trouver les expressions des L_{ab}^* pour les modèles particuliers qui nous intéressent. Avant même de continuer le calcul pour un modèle précis, nous pouvons déjà remarquer un avantage majeur de travailler à haute fréquence. En effet, nous voyons que les coefficients du transport (Eq. (1.137)) sont donnés par la moyenne de commutateurs d'opérateurs à temps égal. Cela donnera des fonctions de corrélation à temps égaux et aucun prolongement analytique ne sera nécessaire pour les L_{ab}^* . Par contre, quelques mots de prudence sont nécessaires. En effet, $\hat{K} = H - \mu\hat{N}$ semble être une définition raisonnable de l'opérateur polarisation de chaleur (Eq. (1.111) par exemple) pour les éléments de matrice à basse énergie. À plus haute énergie, cette correspondance n'est plus nécessairement appropriée. Pour être précis, en thermodynamique, le changement d'entropie est donné par la chaleur divisée par la température $\Delta S = \frac{Q}{T}$ et donc la variation de chaleur est $\delta Q = TdS$. En utilisant la relation thermodynamique $TdS = dE - \mu dN$, nous obtenons $\delta Q = dE - \mu dN$ et la variation temporelle est $\frac{\delta Q}{\delta t} = \frac{dE}{dt} - \mu \frac{dN}{dt}$. La façon de définir usuellement le courant de chaleur consiste à considérer que $\frac{\delta Q}{\delta t}$ est une dérivée exacte qui s'intègre pour donner $E - \mu N$ et donc le courant serait de la forme de l'Eq. (1.98). L'opérateur quantique serait défini comme $\hat{Q} = H - \mu\hat{N} = \hat{K}$. Mais, considérer cette dérivée exacte revient à considérer un système quasi-statique ce qui n'est sans doute pas le cas à très haute fréquence et peut avoir des conséquences importantes qui seront discutées plus loin. Cet éventuel problème n'apparaît pas habituellement puisqu'un calcul du pouvoir thermoélectrique à fréquence quelconque n'a jamais généré auparavant un grand intérêt. Expérimentalement S est une quantité DC ou très faiblement AC ($\omega \sim 1Hz$). Nous verrons plus loin comment cela influence probablement le résultat haute fréquence.

Dans [44], Shastry calcule les expressions pour L_{12}^* pour différents modèles dont celui de Hubbard qui nous intéresse ici. Il appelle $L_{12}^* \rightarrow \langle \Phi_{xx} \rangle$ et $L_{11}^* \rightarrow \langle \tau_{xx} \rangle$ et c'est aussi cette notation que nous adoptons dans l'article qui compose le Chapitre 3. Xu *et al.* [45] dérivent aussi les formes mathématiques des opérateurs L_{ab}^* pour le modèle de Hubbard.

En espace réel, nous obtenons

$$\begin{aligned}
L_{12}^* &= -\frac{1}{2} \sum_{ijl\sigma} t_{il} t_{lj} (R_j^x - R_i^x)^2 \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle - \mu \sum_{ij\sigma} t_{ij} (R_j^x - R_i^x)^2 \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle \\
&+ \frac{U}{2} \sum_{ij\sigma} t_{ij} (R_j^x - R_i^x)^2 \langle (n_{j\bar{\sigma}} + n_{i\bar{\sigma}}) (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \rangle.
\end{aligned} \tag{1.138}$$

En utilisant la définition de la fonction de Green en temps imaginaire (Eq. (1.2)) ainsi que sa dérivée

$$\frac{\partial G_{ji,\sigma}(\tau)}{\partial \tau} = -\delta_{ij} \delta(\tau) + \left\langle T_\tau \frac{\partial}{\partial \tau} c_{j\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^\dagger(0) \right\rangle, \tag{1.139}$$

où la dérivée de l'opérateur de destruction se calcule comme

$$\frac{\partial c_{i\sigma}(\tau)}{\partial \tau} = [H, c_{i\sigma}(\tau)], \tag{1.140}$$

nous obtenons

$$\begin{aligned}
L_{12}^* &= -\frac{1}{2} \sum_{ijl\sigma} t_{il} t_{lj} [(R_j^x - R_i^x)^2 - (R_l^x - R_i^x)^2 - (R_j^x - R_l^x)^2] G_{ji\sigma}(0^-) \\
&- \sum_{ij\sigma} t_{ij} (R_j^x - R_i^x)^2 \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{\partial G_{ji,\sigma}(\tau)}{\partial \tau}.
\end{aligned} \tag{1.141}$$

La même démarche est applicable pour L_{11}^* . Ensuite, avec des transformées de Fourier en espace et en temps imaginaire nous obtenons

$$L_{11}^* = \frac{1}{\beta} \sum_{n,\sigma,k} e^{i\omega_n 0^+} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \right) G_{k\sigma}(i\omega_n) \tag{1.142}$$

et

$$L_{12}^* = \frac{1}{\beta} \sum_{n,\sigma,k} e^{i\omega_n 0^+} \left[\left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 + i\omega_n \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \right] G_{k\sigma}(i\omega_n). \tag{1.143}$$

Puisque le terme $i\omega_n G_{k\sigma}(i\omega_n)$ n'est pas numériquement convergent nous allons réécrire l'expression de L_{12}^* de telle sorte que ce soit plus simple à calculer numériquement. Pour ce faire, nous considérons $G_{k\sigma}^{-1} = i\omega_n - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma_{k\sigma}(i\omega_n)$ et donc $i\omega_n G_{k\sigma}(i\omega_n) =$

$1 + (\varepsilon_k - \mu) + \Sigma_{k\sigma}(i\omega_n)$. En remplaçant dans l'Eq. (1.143), nous obtenons

$$L_{12}^* = \frac{1}{\beta} \sum_{n,\sigma,k} e^{i\omega_n 0^+} \left[\frac{\partial}{\partial k_x} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} (\varepsilon_k - \mu) \right) + \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \Sigma_{k\sigma}(i\omega_n) \right] G_{k\sigma}(i\omega_n). \quad (1.144)$$

Il est important de tirer le maximum d'informations possibles concernant les limites basse et haute température. Xu *et al.* [45] se sont aussi appliqués à considérer ces limites. Nous reviendrons sur leurs résultats à la vue des nôtres.

Pour obtenir une certaine compréhension de ce qui arrive quand la température approche zéro, nous allons supposer que le développement de Sommerfeld est applicable à notre problème. Le développement de Sommerfeld est expliqué dans l'Annexe C du livre d'Ascroft et Mermin [52]. En résumé, la méthode est appliquée à des intégrales de la forme

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega H(\omega) f(\omega), \quad (1.145)$$

où

$$f(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}} \quad (1.146)$$

ou

$$f(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\omega - \mu)}} \quad (1.147)$$

dépendemment du problème. Dans notre cas, c'est la première fonction de Fermi qui sera utilisée. Si c'est la deuxième, le résultat est le même sauf que nous regardons à μ au lieu de 0.

La première propriété nécessaire pour que la méthode soit applicable demande que $H(\omega)$ s'annule quand $\omega \rightarrow -\infty$ et diverge pas plus rapidement qu'une puissance de ω lorsque $\omega \rightarrow \infty$.

Si c'est le cas, la méthode donne

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega H(\omega) f(\omega) = \int_{-\infty}^0 d\omega H(\omega) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (k_B T)^{2n} \left. \frac{d^{2n-1}}{d\omega^{2n-1}} H(\omega) \right|_{\omega \rightarrow 0}, \quad (1.148)$$

où

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(2n)!} \left(-\frac{d}{dx} \frac{1}{e^x + 1} \right) dx = \left(2 - \frac{1}{2^{2(n-1)}} \right) \zeta(2n), \quad (1.149)$$

où $\zeta(n)$ est la fonction zeta de Riemann.

Nous allons premièrement réécrire l'opérateur thermoélectrique L_{12}^* en fréquences réelles. Nous partons de la forme de l'Eq. (1.143).

$$L_{12}^* = \frac{1}{\Omega} \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{1}{\beta} \sum_n i\omega_n G_{k\sigma}(i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} + \frac{1}{\Omega} \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \frac{1}{\beta} \sum_n G_{k\sigma}(i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \quad (1.150)$$

$$L_{12}^* = \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{1}{\beta} \sum_n [i\omega_n G_{k\sigma}(i\omega_n) - 1] e^{i\omega_n 0^+} + \underbrace{\sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n 0^+}}_{\text{somme sur k donne 0}} \quad (1.151)$$

$$+ \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \frac{1}{\beta} \sum_n G_{k\sigma}(i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+}.$$

En suivant Pruschke *et al.* (leur Annexe A) [53], nous pouvons écrire

$$L_{12}^* = \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \int d\omega \omega f(\omega) A_{k\sigma}(\omega) + \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \int d\omega f(\omega) A_{k\sigma}(\omega), \quad (1.152)$$

où

$$f(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}} \quad (1.153)$$

et

$$A_{k\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}(\omega) = N_{k\sigma}(\omega), \quad (1.154)$$

tel que déjà défini à l'Eq. (1.134).

Nous allons maintenant appliquer le développement de Sommerfeld aux intégrales de l'expression précédente. Cela pourrait être justifié puisque $A_{k\sigma}(\omega)$ est zéro quand $\omega \rightarrow -\infty$ et $\omega \rightarrow \infty$.

Nous commençons avec $\int \omega A_{k\sigma}(\omega) f(\omega) d\omega$

$$\int \omega A_{k\sigma}(\omega) f(\omega) d\omega \approx \int_{-\infty}^0 \omega A_{k\sigma}(\omega) d\omega + a_1(k_B T)^2 \left. \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega A_{k\sigma}(\omega)) \right|_{\omega \rightarrow 0}. \quad (1.155)$$

Nous avons

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega A_{k\sigma}(\omega)) \right|_{\omega \rightarrow 0} = \left[A_{k\sigma}(\omega) + \omega \frac{\partial A_{k\sigma}(\omega)}{\partial \omega} \right] \Big|_{\omega \rightarrow 0} = A_{k\sigma}(0) \quad (1.156)$$

et donc

$$\int \omega A_{k\sigma}(\omega) f(\omega) d\omega \approx \int_{-\infty}^0 \omega A_{k\sigma}(\omega) d\omega + a_1(k_B T)^2 A_{k\sigma}(0). \quad (1.157)$$

Maintenant, pour $\int A_{k\sigma}(\omega) f(\omega) d\omega$ nous obtenons

$$\int A_{k\sigma}(\omega) f(\omega) d\omega \approx \int_{-\infty}^0 A_{k\sigma}(\omega) d\omega + a_1(k_B T)^2 \left. \frac{\partial A_{k\sigma}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega \rightarrow 0}. \quad (1.158)$$

Ainsi

$$\begin{aligned} L_{12}^* &= \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \int_{-\infty}^0 \omega A_{k\sigma}(\omega) d\omega + a_1(k_B T)^2 \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} A_{k\sigma}(0) \\ &+ \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \int_{-\infty}^0 A_{k\sigma}(\omega) d\omega + a_1(k_B T)^2 \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \left. \frac{\partial A_{k\sigma}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega \rightarrow 0}. \end{aligned} \quad (1.159)$$

Avec

$$A_{k\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Sigma_I(k, \omega)}{[\omega - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma_R(k, \omega)]^2 + \Sigma_I^2(k, \omega)}, \quad (1.160)$$

où, à partir de maintenant, nous allons parfois utiliser une écriture simplifiée des parties réelles et imaginaires de la *self-energy* $\Sigma_R = \text{Re}\{\Sigma\}$ et $\Sigma_I = \text{Im}\{\Sigma\}$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial A_{k\sigma}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega \rightarrow 0} &= \\ \left. \frac{\partial \ln(\Sigma_I(k, \omega))}{\partial \omega} \right|_{\omega \rightarrow 0} A_{k\sigma}(0) &- \frac{2\pi(\varepsilon_k - \mu + \Sigma_R(k, 0)) \left(1 - \left. \frac{\partial \Sigma_R(k, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega \rightarrow 0}\right)}{\Sigma_I(k, 0)} A_{k\sigma}^2(0) \\ + 2\pi \left. \frac{\partial \Sigma_I(k, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega \rightarrow 0} & A_{k\sigma}^2(0) \\ &\equiv \eta(k) A_{k\sigma}(0) + \kappa(k) A_{k\sigma}^2(0). \end{aligned} \quad (1.161)$$

Donc

$$\begin{aligned} L_{12}^* &= \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \int_{-\infty}^0 \omega A_{k\sigma}(\omega) d\omega + \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \int_{-\infty}^0 A_{k\sigma}(\omega) d\omega \\ &+ a_1 (k_B T)^2 \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} A_{k\sigma}(0) + a_1 (k_B T)^2 \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \eta(k) A_{k\sigma}(0) \\ &+ a_1 (k_B T)^2 \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \kappa(k) A_{k\sigma}^2(0). \end{aligned} \quad (1.162)$$

En principe, nous nous attendons à ce que le pouvoir thermoélectrique tende vers zéro à température nulle et donc que L_{12}^* s'annule quand $T \rightarrow 0$. Étudions ce qui arrive dans cette limite. Si nous prenons $T = 0$ dans l'Eq. (1.162) nous avons

$$L_{12}^* = \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \int_{-\infty}^0 \omega A_{k\sigma}(\omega) d\omega + \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \int_{-\infty}^0 A_{k\sigma}(\omega) d\omega. \quad (1.163)$$

Il est loin d'être évident que cette expression s'annule et, en effet, comme c'est aussi discuté par Xu *et al.* [45], dans le cas général d'un système corrélé, ce ne sera pas nul. Par contre, pour les deux situations les plus simples, c'est bel et bien zéro à $T = 0$. Ces exemples sont le système sans interaction et celui avec une partie imaginaire constante de la *self-energy* et pas de partie réelle. C'est le cas de la diffusion de type *s* par des impuretés statiques par exemple. La partie réelle de la *self-energy* est constante et absorbée dans le potentiel chimique. La preuve pour ces deux cas est présentée en Annexe A.1.

Une fois le développement de Sommerfeld appliqué, le pouvoir thermoélectrique dans la limite fréquence infinie et basse température peut être écrit

$$S^* = \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}^*}{L_{11}^*} = \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}^{*0} + T^2 L_{12}^{*1} + O_{L_{12}^*}(T^4)}{L_{11}^{*0} + T^2 L_{11}^{*1} + O_{L_{11}^*}(T^4)}. \quad (1.164)$$

Réécrivons S^* comme

$$\begin{aligned} S^* &= \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}^{*0} + T^2 L_{12}^{*1} + O_{L_{12}^*}(T^4)}{L_{11}^{*0} \left(1 + T^2 \frac{L_{11}^{*1}}{L_{11}^{*0}} + \frac{O_{L_{11}^*}(T^4)}{L_{11}^{*0}} \right)} \\ &= \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}^{*0}}{L_{11}^{*0}} + T \left(\frac{L_{12}^{*1}}{L_{11}^{*0}} - \frac{L_{12}^{*0} L_{11}^{*1}}{(L_{11}^{*0})^2} \right) + \dots, \end{aligned} \quad (1.165)$$

où nous avons utilisé $\frac{1}{1+x} \approx 1 - x + x^2 + \dots$

Lorsque l'interaction est finie, $L_{12}^{*0} \neq 0$, non seulement il y a un terme non zéro quand $T \rightarrow 0$, mais le terme linéaire ainsi que tous les autres ordres ont eux aussi une correction. Pour le moment, nous allons appeler cette correction Ψ et nous y reviendrons plus loin. La signification physique de l'existence de L_{12}^{*0} n'est pas évidente, cela pourrait être dû à la définition des opérateurs courants, correcte à basse énergie, mais peut-être fautive pour les éléments de matrice à haute énergie, comme déjà discuté après l'Eq. (1.137). Une définition naturelle pour obtenir une valeur nulle à $T = 0$ serait d'enlever le terme constant L_{12}^{*0} . Nous pouvons définir un nouveau S haute fréquence soit

$$S^{**} \equiv \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}^* - L_{12}^{*0}}{L_{11}^*}, \quad (1.166)$$

qui devient à basse température, selon l'Eq. (1.165),

$$S_{T \rightarrow 0}^{**} = \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}^{*1}}{L_{11}^{*0}}. \quad (1.167)$$

Pour avoir une certaine compréhension de ce qui arrive, nous allons tenter de calculer S^{**} pour un liquide de Fermi. Dans ce cas, nous approximons la partie imaginaire de la

self-energy par

$$\text{Im}\{\Sigma(\omega)\} = -\gamma \left[\left(\frac{\omega}{\pi} \right)^2 + (k_B T)^2 \right] \Theta(|\omega| - \omega_c) + \Sigma_I^{inc}(\omega), \quad (1.168)$$

où ω_c est la fréquence de coupure d'application de la forme quadratique et Σ_I^{inc} est la partie incohérente qui est nulle pour $|\omega| < \omega_c$. En partant de l'Eq. (1.168), la partie réelle peut être obtenue en utilisant la propriété bien connue de la *self-energy*

$$\Sigma(\omega) = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im}\{\Sigma(\omega')\}}{\omega' - \omega + i\delta} + \Sigma_R(0). \quad (1.169)$$

Nous obtenons ainsi

$$\text{Re}\{\Sigma(\omega)\} = -\gamma \left[\frac{2\omega_c\omega}{\pi^3} + \frac{1}{\pi} \left[\left(\frac{\omega}{\pi} \right)^2 + (k_B T)^2 \right] \ln \left| \frac{\omega_c - \omega}{-\omega_c - \omega} \right| \right] + \Sigma_R(0) + \Sigma_R^{inc}(\omega). \quad (1.170)$$

Comme obtenu dans l'Eq.(1.162), nous pouvons écrire

$$L_{12}^{*1} = 2a_1(k_B)^2 \left[\sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} A_k(0) + \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \frac{\partial A_k(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0} \right]. \quad (1.171)$$

Puisque tout est à $\omega = 0$ dans cette équation, la partie incohérente de la *self-energy* ne contribue pas à L_{12}^{*1} . Nous avons besoin de calculer $\frac{\partial A_k(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0}$ pour notre modèle.

Nous commençons avec l'expression générale de la fonction spectrale

$$A_k(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Sigma_I(\omega)}{[\omega - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma_R(\omega)]^2 + \Sigma_I^2(\omega)}, \quad (1.172)$$

et nous prenons la dérivée. Nous obtenons

$$\frac{\partial A_k(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0} = \frac{\partial \ln(\Sigma_I(\omega))}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0} + \frac{2\pi(\varepsilon_k - \tilde{\mu})Z^{-1}}{\Sigma_I(0)} A_k^2(0) + 2\pi \frac{\partial \Sigma_I(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0} A_k^2(0), \quad (1.173)$$

où $\tilde{\mu} = \mu - \text{Re}\{\Sigma(0)\}$ et $Z^{-1} = 1 - \frac{\partial \Sigma_R(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0}$. Dans notre liquide de Fermi, $\frac{\partial \Sigma_I(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0} = 0$ et donc

$$\frac{\partial A_k(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0}^{\text{F.L}} = \frac{2\pi(\varepsilon_k - \tilde{\mu})Z^{-1}A_k^2(0)}{\Gamma}, \quad (1.174)$$

où $\Gamma \equiv \gamma(k_B T)^2$.

L_{12}^{*1} devient, avec $a_1 = \frac{\pi^2}{6}$,

$$L_{12}^{*1} = 2\frac{\pi^2}{6}(k_B)^2 \left[\sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} A_k(0) + \frac{2\pi Z^{-1}}{\Gamma} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 (\varepsilon_k - \tilde{\mu}) A_k^2(0) \right]. \quad (1.175)$$

Comme montré en Annexe A.2.1, nous obtenons finalement pour L_{12}^{*1}

$$L_{12}^{*1} = \frac{2\pi^2}{6}(k_B)^2 [1 + Z^{-1}] Y(\tilde{\mu}). \quad (1.176)$$

Nous allons maintenant nous pencher sur la fonction L_{11}^{*0} qui peut être écrite comme

$$L_{11}^{*0} = 2 \int_{-\infty}^0 d\omega \int d\varepsilon Y(\varepsilon) A(\varepsilon, \omega). \quad (1.177)$$

Dans ce cas, il y a une intégrale sur tous les ω et nous ne pouvons considérer que seulement la partie liquide de Fermi contribue. Dans l'Eq. (1.168), nous avons supposé que la *self-energy* pouvait être séparée en deux parties, l'une liquide de Fermi s'appliquant pour des $|\omega|$ plus petits que ω_c et l'autre incohérente, non nul pour $|\omega| > \omega_c$. Dans ce cas, la fonction spectrale (Eq. (1.172)) peut elle aussi être séparée en deux $A = A_{FL} + A_{inc}$. Cela nous permet d'obtenir (voir Annexe A.2.2)

$$L_{11}^{*0} = 2\pi (ZX(\tilde{\mu}) + L_{11}^{*0,inc}) \quad (1.178)$$

où nous avons intégré un facteur $\frac{1}{2\pi}$ à la définition de $L_{11}^{*0,inc}$. Nous ne l'avons pas mentionné, mais L_{11}^* est la règle de somme et donc L_{11}^{*0} est la règle de somme à $T = 0$. Mais, à $T = 0$, la fonction n_k n'est pas trop influencée par U et donc la contribution incohérente ne devrait pas être très importante à basse température. Nous la conservons quand même.

La fonction S^{**} prend la forme

$$\frac{|e|}{k_B} S^{**} \equiv \frac{\pi}{6}(k_B T) [1 + Z^{-1}] \frac{Y(\tilde{\mu})}{ZX(\tilde{\mu}) + L_{11}^{*0,inc}} \quad (1.179)$$

Nous allons maintenant nous occuper du premier terme à droite de l'égalité de l'Eq. (1.165). Nous devons calculer le terme L_{12}^{*0} . Son expression est

$$L_{12}^{*0} = 2 \left[\int_{-\infty}^0 d\omega \omega \int d\varepsilon A(\varepsilon, \omega) Y(\varepsilon) + \int_{-\infty}^0 d\omega \int d\varepsilon A(\varepsilon, \omega) X(\varepsilon) \right]. \quad (1.180)$$

Une fois encore, nous utilisons l'expression de l'Eq. (A.37) pour la fonction spectrale du liquide de Fermi, la remplaçons dans l'Eq. (1.180) et ajoutons une partie incohérente.

$$L_{12}^{*0} = 2 \left[\frac{\pi}{\beta^2} \int_{-\infty}^0 dx x Y \left(\frac{x k_B T}{Z} + \tilde{\mu} \right) + \frac{\pi}{\beta} \int_{-\infty}^0 dx X \left(\frac{x k_B T}{Z} + \tilde{\mu} \right) \right] + L_{12}^{*0,inc}. \quad (1.181)$$

Nous utilisons le changement de variable $y = \frac{x k_B T}{Z} + \tilde{\mu}$

$$\begin{aligned} L_{12}^{*0} &= 2 \left[\frac{\pi}{\beta^2} (Z\beta)^2 \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} dy (y - \tilde{\mu}) Y(y) + \frac{\pi}{\beta} Z\beta \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} dy X(y) \right] + L_{12}^{*0,inc} \\ &= 2\pi \left[Z^2 \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} dy y Y(y) - \tilde{\mu} Z^2 \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} dy Y(y) + Z \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} dy X(y) \right] + L_{12}^{*0,inc} \\ &= 2\pi \left[\tilde{\mu} Z (1 - Z) X(\tilde{\mu}) + Z(Z - 1) \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} dy y Y(y) \right] + L_{12}^{*0,inc}. \end{aligned} \quad (1.182)$$

Nous avons utilisé qu'en intégrant par partie, nous pouvons montrer que $\int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} dy y Y(y) = \tilde{\mu} X(\tilde{\mu}) - \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} X(y) dy$. Nous obtenons donc pour S^* de l'Eq. (1.165)

$$\frac{|e|}{k_B} S^* \approx \frac{1}{k_B T} \frac{L_{12}^{*0,inc}}{L_{11}^{*0,inc}} + (k_B T) \left[\frac{\pi}{6} [1 + Z^{-1}] \frac{Y(\tilde{\mu})}{ZX(\tilde{\mu}) + L_{11}^{*0,inc}} + \Psi \right]. \quad (1.183)$$

Sur des bases thermodynamiques, nous nous attendons que le pouvoir thermoélectrique devienne nul linéairement en T . Par contre, notre expression haute fréquence a un terme non nul à $T = 0$. Il apparaît probablement à cause de la distinction entre la chaleur et la densité d'énergie comme déjà discuté, où la définition quasi-statique du courant de chaleur peut causer problème à haute fréquence. Ce terme et Ψ ont la même origine, soit dans le terme constant présent dans L_{12}^* .

Palsson et Kotliar [54] ont obtenu pour un liquide de Fermi

$$\frac{|e|}{k_B} S^{dc} = \frac{E_2}{E_0} \frac{(k_B T)}{Z} \frac{Y(\tilde{\mu})}{X(\tilde{\mu})}, \quad (1.184)$$

où $E_0 \approx 0.82$ et $E_2 \approx 1.75$. Il n'y a pas de contributions incohérentes puisque dans la formulation DC, à basse température, seules les fréquences autour de zéro contribuent.

Si nous considérons seulement S^{**} , défini comme dans l'Eq. (1.167), oublions la contribution incohérente et prenons le ratio avec l'Eq. (1.184), nous obtenons

$$\frac{S^{**}}{S^{dc}} = \frac{\pi E_0}{6E_2} [1 + Z^{-1}]. \quad (1.185)$$

Si le terme constant et les contributions incohérentes sont éliminées, de l'information relativement comparable avec le cas DC est obtenue. Nous rappelons que la contribution incohérente devrait être relativement peu importante au dénominateur. Cela nous poussera à considérer seulement S^{**} dans l'article qui compose le Chapitre 3 et nous vérifierons sa pertinence. Le calcul avec le liquide de Fermi nous montre que moins la partie incohérente est importante, plus S^{**} est une bonne approximation. Plus U est petit, plus les contributions incohérentes et celle constante sont petites.

Dans notre application du développement de Sommerfeld, nous avons supposé une dépendance faible en T de la densité spectrale ce qui peut être faux. Par contre, à haute température nous pouvons considérer une densité spectrale constante, indépendante de la température et du potentiel chimique. Cette limite est considérée par Xu *et al.* [45] et ils obtiennent que $S_{T \rightarrow \infty}^* = -\frac{1}{q_e} \frac{\mu}{T}$. C'est le même résultat que celui bien connu de Mott-Heike (S_{MH}) [55]. Mais, comme nous le verrons dans le Chapitre 3, nous n'atteignons pas vraiment cette limite dans un cas plus réaliste d'un isolant de Mott à grande température, mais non infinie.

1.5.2 Limite lente ; S_{Kelvin}

Dans cette section, nous revenons à la définition de la susceptibilité donnée par l'Eq. (1.108). Nous allons prendre la limite lente soit considérer la limite $\omega \rightarrow 0$ en premier, contrairement à ce qui est fait dans l'Eq. (1.108). Comme déjà discuté, dans cette situation, la perturbation est adiabatique et les charges et l'énergie peuvent se redistribuer pour obtenir un état d'équilibre. Cette limite est appelée limite de Kelvin. Comme nous regardons explicitement la limite fréquence nulle, il n'y a pas ici de problème avec la définition quasi-statique de l'opérateur courant de chaleur. Considérons L_{12} , soit

L_{12}^{Kelvin} [56]. Nous devons ainsi calculer

$$L_{12}^{Kelvin} = T \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\omega} \text{Im} \chi_{12}(\mathbf{q}, i\Omega_n \rightarrow \omega + i0^+) \Big|_{\omega \rightarrow 0} \right]. \quad (1.186)$$

Dans la notation de Peterson et Shastry [56] et en utilisant la représentation de Lehmann, nous avons

$$L_{12}^{Kelvin} = \lim_{q_x \rightarrow 0} \sum_{n,m} \frac{p_n - p_m}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \langle n | \hat{\rho}(q_x) | m \rangle \langle m | \hat{K}(-q_x) | n \rangle, \quad (1.187)$$

où $p_n = \frac{e^{-\beta \varepsilon_n}}{Z}$, $\hat{\rho}$ est l'opérateur densité et $\hat{K} = H - \mu \hat{N}$ est l'Hamiltonien dans l'ensemble grand canonique. Dans la limite $q_x \rightarrow 0$ l'opérateur densité devient l'opérateur nombre, une quantité conservée qui ne mélange pas les états de différentes énergies.

$$\begin{aligned} L_{12}^{Kelvin} &= \lim_{\varepsilon_m \rightarrow \varepsilon_n} \sum_{n,m} \frac{p_n - p_m}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \langle n | \hat{\rho}(q_x \rightarrow 0) | m \rangle \langle m | \hat{K}(-q_x \rightarrow 0) | n \rangle \\ &= \lim_{\varepsilon_m \rightarrow \varepsilon_n} \sum_{n,m} p_n \frac{1 - e^{\beta(\varepsilon_n - \varepsilon_m)}}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \langle n | \hat{\rho}(q_x \rightarrow 0) | m \rangle \langle m | \hat{K}(-q_x \rightarrow 0) | n \rangle \\ &= \sum_{n,m} \beta p_n \delta_{\varepsilon_m, \varepsilon_n} \langle n | \hat{N} | m \rangle \langle m | \hat{K} | n \rangle \\ &= \beta \left[\langle \hat{N} \hat{K} \rangle - \langle \hat{N} \rangle \langle \hat{K} \rangle \right] = \frac{d\langle H \rangle}{d\mu} - \mu \frac{d\langle \hat{N} \rangle}{d\mu}. \end{aligned} \quad (1.188)$$

De façon similaire, nous obtenons

$$L_{11}^{Kelvin} = \beta \left[\langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle \langle \hat{N} \rangle \right] = \frac{d\langle \hat{N} \rangle}{d\mu}. \quad (1.189)$$

Ainsi, le pouvoir thermoélectrique dans la limite de Kelvin est

$$S_{Kelvin} = \frac{1}{q_e T} \frac{\frac{d\langle H \rangle}{d\mu} - \mu \frac{d\langle \hat{N} \rangle}{d\mu}}{\frac{d\langle \hat{N} \rangle}{d\mu}} \quad (1.190)$$

En utilisant la relation thermodynamique $\langle H \rangle = Ts + \mu n$ nous obtenons $\left(\frac{\partial u}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \mu \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,V} + T \left(\frac{\partial s}{\partial \mu} \right)_{T,V}$ en plus de celle $dF = -sdT - pdV + \mu dn$ et en se rappelant que

$\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial n} = \frac{\partial^2 F}{\partial n \partial T}$ nous obtenons finalement

$$S_{Kelvin} = \frac{1}{q_e} \left(\frac{\partial s}{\partial n} \right)_{T,V} = -\frac{1}{q_e} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{n,V}. \quad (1.191)$$

Ce résultat est très intéressant puisqu'il est seulement nécessaire de calculer des quantités thermodynamiques pour obtenir S_{Kelvin} . En plus, en DMFT un site, le potentiel chimique en fonction de la température est un sous-produit du calcul si nous fixons le densité d'électrons n . Encore une fois, nous avons présenté une approximation ne nécessitant pas de prolongement analytique. À première vue, l'Eq. (1.191) peut ressembler à une autre expression bien connue du pouvoir thermoélectrique valide dans la limite quasi-atomique et à large température. Cette expression est appelée Mott-Heike (S_{MH}) [55]. Elle est dérivée en considérant l'Eq. (1.108) à très haute température $\beta \rightarrow 0$ et dans la limite où $U \gg t$. Dans ce cas, $S_{MH} = \frac{1}{q_e} \left(\frac{\partial s}{\partial n} \right)_{E,V} = -\frac{1}{q_e} \frac{\mu}{T}$. Considérer une dérivée à température fixe comme dans S_{Kelvin} est beaucoup plus naturel que de la considérer à énergie fixe. Nous verrons cependant que dans la limite atomique ces formules sont identiques

Il peut être très instructif dans ce cas de regarder directement la limite atomique et comparer le résultat Kelvin avec ceux de Chaikin et Beni [55]. Dans la limite atomique du modèle de Hubbard, le paramètre de saut t est zéro. Dans ce cas, nous avons des sites indépendants les uns des autres ce qui permet d'en traiter un seul. Le système a quatre états différents. Aucune occupation, un électron de spin σ ou $\bar{\sigma}$ ou double occupation.

$$|0\rangle \quad |\uparrow\rangle \quad |\downarrow\rangle \quad |\uparrow\downarrow\rangle$$

Nous pouvons écrire la fonction de partition comme

$$Z = 1 + 2e^{\beta\mu} + e^{-\beta(U-2\mu)} \quad (1.192)$$

L'occupation est calculée en utilisant

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \\ &= \frac{2(x + e^{-\beta U} x^2)}{1 + 2x + e^{-\beta U} x^2}, \end{aligned} \quad (1.193)$$

où $x = e^{\beta\mu}$. De l'Eq. (1.193) nous pouvons écrire

$$e^{-\beta U}(n-2)x^2 + 2(n-1)x + n = 0. \quad (1.194)$$

Nous définissons maintenant $y \equiv 1/x$ et obtenons

$$ny^2 + 2(n-1)y + e^{-\beta U}(n-2) = 0. \quad (1.195)$$

La solution de cette équation est

$$e^{-\beta\mu} = \left(\frac{1}{n} - 1\right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{n} - 1\right)^2 + e^{-\beta U} \left(\frac{2}{n} - 1\right)}, \quad (1.196)$$

ce qui mène à

$$\mu = -\frac{1}{\beta} \ln \left[\left(\frac{1}{n} - 1\right) + \sqrt{\left(\frac{1}{n} - 1\right)^2 + e^{-\beta U} \left(\frac{2}{n} - 1\right)} \right]. \quad (1.197)$$

C'est la même expression que dans Leon et *al.* [57]. Par contre, ils l'ont obtenue par une dérivation différente. En effet, ils ont pris comme point de départ la fonction de Green atomique

$$G_{at}(i\omega_n) = \frac{1 - n/2}{i\omega_n + \mu} + \frac{n/2}{i\omega_n - (U - \mu)}. \quad (1.198)$$

En utilisant

$$n = 2 \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n 0^-} G_{at}(i\omega_n), \quad (1.199)$$

nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} n &= (2-n) \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n 0^-}}{i\omega_n - (-\mu)} + n \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n 0^-}}{i\omega_n - (U - \mu)} \\ &= (2-n)f(-\mu) + nf(U - \mu) \\ &= \frac{2-n}{1+y} + \frac{n}{1+e^{\beta U}y}. \end{aligned} \quad (1.200)$$

Nous obtenons pour y

$$ny^2 + 2(n-1)y + e^{-\beta U}(n-2) = 0, \quad (1.201)$$

ce qui est la même équation que l'Eq. (1.195) et μ est aussi donné par l'Eq. (1.197).

Regardons deux limites différentes selon la relation entre T et U . Nous commençons par considérer $t \ll T \ll U$. Dans ce cas, $\beta U \rightarrow \infty$ et donc $e^{-\beta U} \rightarrow 0$. Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned}\mu &= -\frac{1}{\beta} \ln \left[2 \left(\frac{1}{n} - 1 \right) \right] \\ &= \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{n}{2(1-n)} \right].\end{aligned}\tag{1.202}$$

L'entropie s est donnée par

$$\begin{aligned}s &= \frac{\partial F}{\partial T} = -k_B \ln(1 + 2e^{\beta\mu}) - \underbrace{\frac{\mu}{T} \frac{2e^{\beta\mu}}{1 + 2e^{\beta\mu}}}_n \\ &= k_B \ln \left(1 + \frac{n}{1-n} \right) - \frac{\mu n}{T} \\ &= \ln \left(\frac{1}{1-n} \right) - n \ln \left(\frac{2}{2(1-n)} \right) \\ &= -(1-n) \ln(1-n) - n \ln \left(\frac{n}{2} \right).\end{aligned}\tag{1.203}$$

Nous pouvons vérifier la relation de Maxwell $\left(\frac{\partial s}{\partial n} \right)_T = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_n$.

$$\left(\frac{\partial s}{\partial n} \right)_T = -\ln \left(\frac{n}{2(1-n)} \right)\tag{1.204}$$

et

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_n = \ln \left(\frac{n}{2(1-n)} \right).\tag{1.205}$$

Ainsi donc

$$\left(\frac{\partial s}{\partial n} \right)_T = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_n = -\frac{\mu}{T}.\tag{1.206}$$

Nous avons aussi la relation générale $du = Tds + \mu dn$. Si l'énergie est constante :

$$\mu = -T \left(\frac{\partial s}{\partial n} \right)_E\tag{1.207}$$

et donc, dans ce cas

$$\left(\frac{\partial s}{\partial n}\right)_E = \left(\frac{\partial s}{\partial n}\right)_T = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_n = -\frac{\mu}{T}. \quad (1.208)$$

Chaikin et Beni [55] ont démontré que le pouvoir thermoélectrique va comme $\frac{\mu}{T}$ et donc, dans cette limite, $S_{Kelvin} = S_{Kubo}$.

Nous continuons en regardant $t \ll U \ll T$. C'est la limite où la température est la plus grande échelle d'énergie. Évidemment, pour un isolant de Mott dopé, cela représente une température énorme. Dans cette limite, $\beta U \rightarrow 0$ et $e^{-\beta U} \rightarrow 1$. Cela permet d'écrire

$$\begin{aligned} \mu &= -\frac{1}{\beta} \ln \left[\left(\frac{1}{n} - 1\right) + \sqrt{\left(\frac{1}{n} - 1\right)^2 + \left(\frac{2}{n} - 1\right)} \right] \\ &= -k_B T \ln \left(\frac{2-n}{n} \right) \end{aligned} \quad (1.209)$$

Une fois encore, $\frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\mu}{T}$ ce qui implique de nouveau $S_{Kelvin} = S_{Kubo}$.

1.5.3 Approximation DC sans prolongement analytique

Nous proposons finalement quelques façons approximatives de calculer la valeur DC des fonctions de transport L_{11} et L_{12} sans passer par le prolongement analytique. Nous discuterons aussi dans quelle mesure ces approximations peuvent nous être utiles dans cette thèse. Dans la Ref. [58], ils proposent deux voies. La première utilise un Ansatz pour la conductivité optique à basse fréquence. Cela s'applique seulement à $\sigma(\omega)$ puisque nous n'avons pas d'Ansatz pour la fonction thermique L_{12} qui puisse avoir les deux signes à zéro. Leur deuxième proposition consiste à regarder la valeur à $\tau = \frac{\beta}{2}$ de la susceptibilité $\chi_{ab}(\tau)$ qui donne l'intégral de $L_{ab}(\omega)$ pondéré par une fonction piquée autour de zéro et donc, à basse température, une approximation de $L_{ab}(0)$. Nous proposons une voie dans l'esprit de la première de [58], mais sans utiliser un Ansatz spécifique. Nous proposons plutôt d'ajuster une fonction plus douce que $\chi_{ab}(\Omega_n)$. Nous présentons aussi une méthode qui utilise la valeur à $\tau = \frac{\beta}{2}$.

Nous commençons avec la définition spectrale de la susceptibilité

$$\chi_{ab}(i\Omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega^2}{\omega^2 + \Omega_n^2} L_{ab}(\omega), \quad (1.210)$$

où L_{ab} est le coefficient de transport en fréquences réelles et est défini comme $L_{ab}(\omega) = \frac{\chi_{ab}''(\omega)}{\omega}$.

Nous calculons la différence avec la valeur à fréquence nulle.

$$\begin{aligned}\chi_{ab}(i\Omega_n) - \chi_{ab}(0) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(\frac{\omega^2}{\omega^2 + \Omega_n^2} - 1 \right) L_{ab}(\omega) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\Omega_n^2}{\omega^2 + \Omega_n^2} L_{ab}(\omega).\end{aligned}\quad (1.211)$$

Nous définissons la fonction

$$\gamma_{ab}(\Omega_n) \equiv \frac{\chi_{ab}(0) - \chi_{ab}(i\Omega_n)}{\Omega_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\Omega_n}{\omega^2 + \Omega_n^2} L_{ab}(\omega).\quad (1.212)$$

La raison pour laquelle nous avons défini cette fonction va maintenant devenir claire. En utilisant la définition de la fonction delta $\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}$, nous pouvons écrire

$$\lim_{\Omega_n \rightarrow 0} \gamma_{ab}(\Omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega) L_{ab}(\omega) = L_{ab}(0)\quad (1.213)$$

Le coefficient de transport DC est donc donné par

$$L_{ab}(0) = \lim_{\Omega_n \rightarrow 0} \gamma_{ab}(\Omega_n).\quad (1.214)$$

Nous pouvons remarquer que si nous remplaçons la variable discrète Ω_n par une variable continue z , l'Eq. (1.214) correspondrait à

$$\lim_{\Omega_n \rightarrow 0} \gamma_{ab}(\Omega_n) \rightarrow \lim_{z \rightarrow 0} \gamma_{ab}(z) = -\chi'_{ab}(z) \Big|_{z \rightarrow 0}.\quad (1.215)$$

Cela signifie que si nous ajustons χ avec une fonction quelconque à variable continue, la valeur DC du transport est donnée par la pente à fréquence nulle. Le problème est évidemment de choisir une bonne fonction pour l'ajustement parce que plusieurs fonctions peuvent avoir les bonnes valeurs à Ω_0 et Ω_1 , mais présenter des comportements vraiment différents entre ces deux fréquences. Ce problème peut être important ici puisque la valeur à fréquence nulle (Ω_0) de χ_{ab} tend à être très loin de la valeur à Ω_1 contrairement à la différence entre toutes les autres fréquences. Ainsi, c'est une tâche difficile de choisir une bonne fonction d'ajustement. Un exemple est présenté à la Fig. 1.2 où nous avons

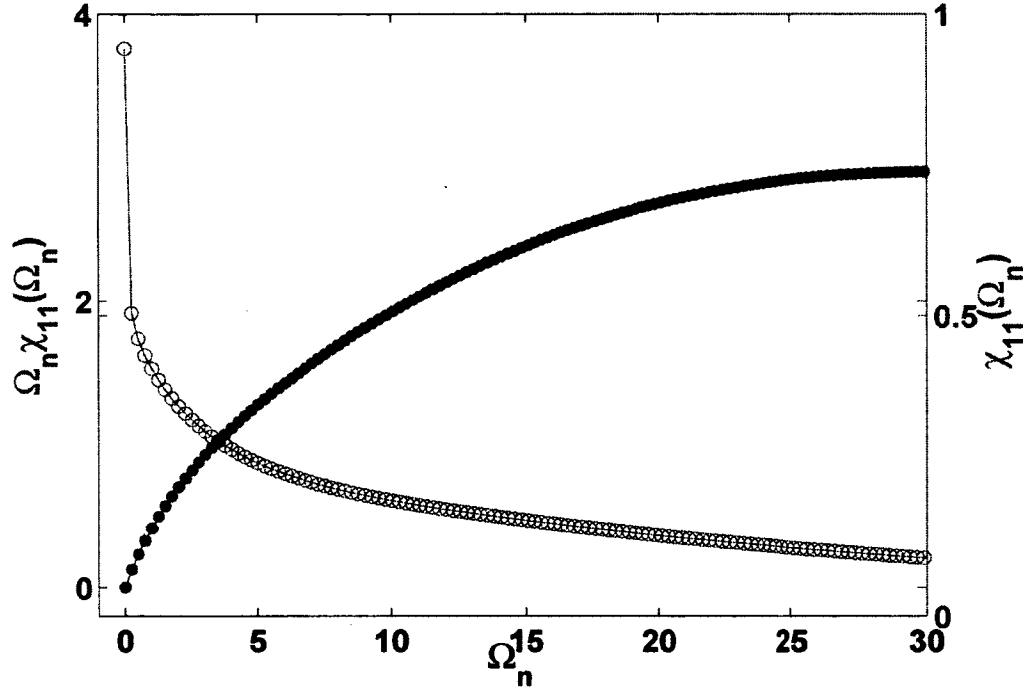


FIGURE 1.2 – $\Omega_n \chi_{ab}(\Omega_n)$ et $\chi_{11}(\Omega_n)$ en fonction de Ω_n à basse fréquence pour $U = 32t$, $n = 0.80$ et $\beta = 25$ pour le modèle de Hubbard à une bande sur le réseau fcc solutionné avec la DMFT à un site en utilisant la CTQMC.

tracé $\chi_{11}(\Omega_n)$ en fonction de Ω_n à basse fréquence pour $U = 32t$, $n = 0.80$ et $\beta = 25$ pour le modèle de Hubbard à une bande sur le réseau fcc obtenu avec la DMFT à un site, en utilisant la CTQMC. Par contre, nous pouvons facilement déterminer le signe de S avec cette approche puisque l'inspection visuelle de $\chi_{ab}(\Omega_n)$ nous renseigne sur le signe de sa dérivée à $\Omega_n = 0$.

Si, par contre, nous définissons la fonction $\Gamma_{ab}(\Omega_n) = \Omega_n \chi_{ab}(\Omega_n)$, nous obtenons usuellement (excepté peut-être à très haute température) une fonction vraiment plus douce avec valeur nulle à la fréquence nulle. La Fig. 1.2 montre aussi $\Gamma_{ab}(\Omega_n) = \Omega_n \chi_{ab}(\Omega_n)$ pour les mêmes paramètres. Il est plus facile de définir pour cette quantité une fonction continue qui peut faire l'ajustement à basse température. Si nous voulons utiliser un ajustement de $\Gamma_{ab}(\Omega_n)$ i.e. $\Gamma_{ab}(z)$ au lieu d'un de type $\chi_{ab}(z)$ nous devons trouver comment $\chi'_{ab}(z)|_{z \rightarrow 0}$ se transfère en terme de $\Gamma_{ab}(z)$. Nous considérons l'existence de fonctions d'ajustements

pour χ et Γ qui sont continues et dérivables.

$$\lim_{z \rightarrow 0} \chi'_{ab}(z) = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{z\Gamma'_{ab}(z) - \Gamma_{ab}(z)}{z^2} = \frac{0}{0} = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\Gamma'_{ab}(z) + z\Gamma''_{ab}(z) - \Gamma'_{ab}(z)}{2z} = \frac{\Gamma''_{ab}(z)}{2} \Big|_{z \rightarrow 0} \quad (1.216)$$

Notre approximation pour la valeur DC du transport est donnée par la dérivée seconde de la fonction d'ajustement choisie pour $\Gamma_{ab}(\Omega_n)$, une fonction, que nous rappelons être vraiment plus douce que $\chi_{ab}(\Omega_n)$. La nécessité d'obtenir une dérivée seconde est par contre inquiétante.

$$L_{ab}(0) = \lim_{\Omega_n \rightarrow 0} \gamma_{ab}(\Omega_n) \approx -\chi'_{ab}(z) \Big|_{z \rightarrow 0} = -\frac{1}{2} \Gamma''_{ab}(z) \Big|_{z \rightarrow 0}. \quad (1.217)$$

Nous regardons finalement la méthode à $\tau = \frac{\beta}{2}$. Nous débutons à partir de la représentation spectrale de la susceptibilité

$$\chi_{ab}(i\Omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{ab}(\omega)}{\omega - i\Omega_n} \quad (1.218)$$

et en temps imaginaire

$$\chi_{ab}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\Omega_n \tau} \chi_{ab}(i\Omega_n). \quad (1.219)$$

En remplaçant l'Eq. (1.218) dans l'Eq. (1.219) nous avons

$$\chi_{ab}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\Omega_n \tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{ab}(\omega)}{\omega - i\Omega_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi''_{ab}(\omega) \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\Omega_n \tau}}{\omega - i\Omega_n}. \quad (1.220)$$

La fréquence Ω_n est bosonique et donc

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\Omega_n \tau}}{\omega - i\Omega_n} = \frac{e^{-\omega \tau}}{1 - e^{-\beta \omega}} \quad (1.221)$$

et ainsi

$$\chi_{ab}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{ab}(\omega)}{\omega} \frac{\omega e^{-\omega \tau}}{1 - e^{-\beta \omega}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega e^{-\omega \tau}}{1 - e^{-\beta \omega}} L_{ab}(\omega). \quad (1.222)$$

Si nous regardons plutôt la fonction $\frac{\beta^2 \chi_{ab}(\tau = \frac{\beta}{2})}{\pi}$ nous avons

$$\frac{\beta^2 \chi_{ab}(\tau = \frac{\beta}{2})}{\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega}{2T^2 \pi^2 \sinh(\frac{\omega}{2T})} L_{ab}(\omega). \quad (1.223)$$

La fonction $F(\omega) = \frac{\omega}{2T^2 \pi^2 \sinh(\frac{\omega}{2T})}$ est piquée à $\omega = 0$ et son intégrale est toujours $\int F(\omega) d\omega = 1$ pour tout T . Pour $T \rightarrow 0$, $F(\omega)$ sera vraiment similaire à une fonction delta centrée à zéro. Par conséquent, pour $T \rightarrow 0$,

$$L_{ab}(0) \rightarrow \frac{\beta^2 \chi_{ab}(\tau = \frac{\beta}{2})}{\pi}. \quad (1.224)$$

Pour que cela soit une approximation du transport DC à T finie, $L_{ab}(\omega)$ ne doit pas changer sur une région où $F(\omega)$ est non nulle. Considérons ω_c pour laquelle $F(\omega)$ est à la moitié de son maximum comme un bon point de départ. À $\omega = 0$, $F(0) = \frac{1}{\pi^2 T}$. Conséquemment, ω_c est donnée par la solution de l'équation $T \sinh(\frac{\omega_c}{2T}) = \omega_c$. Si nous définissons $x \equiv \beta \omega_c$, nous solutionnons $\sinh(\frac{x}{2}) = x$. Le résultat est $x = 4.354637969932075$ et donc $\omega_c \approx 0.693(2\pi T)$. Dans le cas d'un isolant de Mott dopé avec un U grand, cette approximation est peu utile puisqu'il y a un changement rapide de la conductivité optique (voir par exemple [59]).

Tous les outils nécessaires sont maintenant en place pour poursuivre avec le coeur de la thèse, soit les deux chapitres suivants, sous forme d'articles.

Chapitre 2

Étalonnage d'une théorie des perturbations itérées modifiée sur le réseau cubique à face centrée à couplage fort

Ce chapitre présente sous forme d'article les modifications qui ont été nécessaires d'apporter à la théorie des perturbations itérées (IPT) pour que cette méthode approximative pour résoudre le problème intermédiaire de l'impureté d'Anderson, nécessaire en théorie du champ moyen dynamique (DMFT), soit utilisable dans le cas d'un isolant de Mott dopé.

Après une introduction discutant de différents solveurs d'impuretés et des implémentations antérieures d'IPT, une première section (Section II) est consacrée à présenter le modèle de Hubbard (II.A), la CTQMC (II.B) et IPT (II.C) en plus de détails. La section III montre comment la IPT traditionnelle échoue lamentablement dans le cas d'un isolant de Mott dopé à basse température. En III.A, nous montrons comment définir les différents paramètres d'un liquide de Fermi. En III.B, nous montrons comment doivent se comporter ces paramètres en utilisant CTQMC et en III.C, nous montrons à partir des résultats de III.B, comment ceux obtenus par IPT traditionnel sont faux. Dans la section IV nous proposons notre solution pour IPT soit de fixer la double occupation D . En IV.A, nous proposons deux possibilités pour fixer D . Dans les autres sous-sections, nous présentons les résultats pour diverses quantités physiques soit les paramètres du liquide

de Fermi (IV.B), la densité d'états et le potentiel chimique (IV.C), l'énergie et la chaleur spécifique (IV.D), la résistivité DC (IV.E) et la conductivité optique (IV.F). Les résultats sont discutés et comparés avec CTQMC lorsque cela est possible. Finalement, la Section V propose une possible application de notre méthode au cas multi-orbitales. Désirant implémenter les calculs de façon la plus efficace possible, nous avons utilisé divers trucs et astuces mathématiques et numériques. Pour CTQMC et IPT, nous avons développé une méthode d'intégration adaptative inusitée précisément pour le calcul d'intégrales triples sur un volume cubique. L'Annexe A présente l'algorithme. Dans l'Annexe B, nous montrons les astuces (Transformées de Fourier rapides et splines cubiques) que nous avons utilisées pour implémenter IPT optimalement. En annexe C, nous montrons comment nous pouvons calculer deux fonctions importantes qui ne dépendent que de la structure de bande, soit la densité d'états sans interaction et la fonction de transport nécessaire pour la résistivité et la conductivité optique. Finalement, en Annexe D, similairement à l'implémentations de IPT, nous montrons comment utiliser des transformées de Fourier rapides et splines cubiques pour efficacement calculer la conductivité optique.

Contribution des auteurs : Le présent auteur et premier auteur de l'article est responsable d'avoir imaginé la modification nécessaire à IPT. Il est de plus responsable de l'implémentations numérique de la méthode avec les algorithmes nécessaires au calcul le plus rapide possible. Il est de plus responsable de la majeure partie de l'écriture de l'article et de la production de tous les résultats. Le deuxième auteur, Patrick Sémon, a modifié son code de CTQMC pour tirer parti des astuces existantes dans le cas de la DMFT un site et il l'a rendu applicable au cas fcc 3d. Le premier et le deuxième auteur sont responsables de l'implémentations de la nouvelle méthode adaptative pour résoudre numériquement des intégrales triples. Le dernier auteur, le professeur André-Marie Tremblay, a supervisé le travail de l'article en tant que directeur de thèse et il a participé à l'écriture de l'article et à l'interprétation des résultats.

Cet article est publié dans la revue *Physical Review B : Condensed Matter*, publiée par l'*American Physical Society*. La référence est [59].

Benchmark of a modified iterated perturbation theory approach on the fcc lattice at strong coupling

Louis-François Arsenault¹, Patrick Sémon¹, and A.-M. S. Tremblay^{1,2}

¹ *Département de Physique and RQMP, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, QC, Canada*

² *Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario, Canada.*

The dynamical mean-field theory approach to the Hubbard model requires a method to solve the problem of a quantum impurity in a bath of noninteracting electrons. Iterated perturbation theory (IPT) has proven its effectiveness as a solver in many cases of interest. Based on general principles and on comparisons with an essentially exact continuous-time quantum Monte Carlo (CTQMC) solver, here we show that the standard implementation of IPT fails away from half-filling when the interaction strength is much larger than the bandwidth. We propose a slight modification to the IPT algorithm that replaces one of the equations by the requirement that double occupancy calculated with IPT gives the correct value. We call this method IPT-*D*. We recover the Fermi liquid ground state away from half-filling. The Fermi liquid parameters, density of states, chemical potential, energy and specific heat on the fcc lattice are calculated with both IPT-*D* and CTQMC as benchmark examples. We also calculated the resistivity and the optical conductivity within IPT-*D*. Particle-hole asymmetry persists even at coupling twice the bandwidth. A generalization to the multiorbital case is suggested. Several algorithms that speed up the calculations are described in appendices.

I. INTRODUCTION

Within the last 15 years or so, the dynamical mean field theory approach (DMFT)¹⁻³ and its cluster generalizations⁴⁻⁷ have become some of the most powerful techniques to study strongly correlated electrons. In these approaches, a single-site hybridized to a bath or a cluster hybridized to a bath must be solved. The bath of noninteracting electrons is determined self-consistently. At the heart of the DMFT approach then, one finds so-called impurity solvers. There are now very powerful impurity solvers, for example, continuous time quantum Monte Carlo (CTQMC) methods⁸. These methods are exact within statistical errors and, for the one-band Hubbard model, certain versions⁹ at the single-site level do not suffer from sign problem. Yet, these approaches require sizeable computational resources and, in addition, real frequency information must be obtained through analytical continuation of data with statistical uncertainties, an ill-posed problem¹⁰. It is thus still of great interest to work with approximate solvers that are reliable and do not suffer from statistical uncertainties. This facilitates the calculation of real frequency quantities with Padé approximants¹¹ or directly in real-frequency and also enables one to quickly explore phase diagrams and pinpoint interesting regions of parameter space where state of the art solvers would be useful. Among possible approximate solvers, one finds exact diagonalization, slave bosons, noncrossing approximation (NCA), numerical renormalization group (NRG) and others³. They all have advantages and disadvantages. For example, exact diagonalization can consider only a limited number of bath sites, NCA is limited to high temperatures and NRG to low energies.

Here we consider iterated perturbation theory (IPT)¹², an interpolation approach that generalizes the original^{13,14} IPT applicable only at half filling. This me-

thod gives direct access to real-frequency properties, has a continuous spectrum of bath degrees of freedom and is computationally efficient, properties that are interesting for special applications. IPT has been, and still is, widely used^{7,15}. The interpolation is constructed so that the self-energy recovers both the exact result in the atomic limit and the high-frequency limit of the Hubbard model. There is one parameter however that cannot be determined from these constraints. There have been several proposals to fix this parameter. At $T = 0$ one can impose that Luttinger's theorem be satisfied (IPT-*L*) as was done in [12] but when this condition is applied at finite temperature, the results are not satisfactory¹⁶. Another very popular approach for nonzero temperature fixes the occupation n_0 of the noninteracting part of the Anderson impurity problem used in the perturbative calculation to be equal to the lattice occupation $n = n_0$ ^{17,18} (IPT- n_0). This condition is arbitrary since there is no general principle relating these two numbers, but it turns out to be quite satisfactory in the case of correlated metal i.e. $U < U_{Mott}$ ^{17,19,20}. U_{Mott} is the coupling for which the metal to insulator Mott transition occurs at half-filling.

Despite this success, it is known¹⁷ that when U is larger than the critical value for the Mott transition at $n = 1$ ($U > U_{Mott}$), then IPT breaks down for $n > 1$ at low T when the condition $n = n_0$ is applied. This happens even if, in principle, IPT is constructed to respect the atomic limit $U \gg t$. It has been proposed¹⁷ that preserving the third moment of the spectral weight improves the results. Here we show that IPT- n_0 is unsatisfactory for $U \gg U_{Mott}$ close to half-filling for both $n > 1$ and $n < 1$. We propose a way to circumvent this problem by using the fact that when U is large enough, the double occupancy becomes almost temperature independent in the paramagnetic state with a value that is, to a high degree of accuracy, a simple function of the density. This provides us with a condition different from $n = n_0$ that

allows one to close the IPT equations even for large coupling. This approach, IPT- D , is applicable at all temperatures contrary to the approach that enforces Luttinger's theorem, and it recovers the atomic limit at strong coupling and the order U^2 result at weak coupling. It can in principle be improved further by enforcing the third-moment sum rule¹⁷.

In Sec. II we summarize the DMFT approach, the solvers that we use and the manner in which Fermi liquid parameters are extracted. Sec. III demonstrates the failure of IPT at large coupling. In this section and throughout the text, numerical examples are obtained with the 3-dimensional fcc lattice. Amongst lattice presenting electronic frustration, the fcc lattice is important because of its prevalence in nature. Our main contribution appears in Sec. IV where we show that double occupancy can be accurately determined from simple arguments at very strong coupling and then used to fix the remaining parameter in IPT. We call this approach IPT- D . Fermi liquid parameters, density of states, chemical potential, energy, and specific heat on the fcc lattice are calculated with both IPT- D and CTQMC as benchmark examples. Resistivity and optical conductivity obtained with IPT- D are physically reasonable. Sec. V proposes a generalization to the multiorbital case. Appendix A contains details on the three-dimensional adaptive integrator we developed for both IPT and CTQMC calculation. Appendix B contains details of the implementation of IPT- D . Appendix C explains how to calculate the different noninteracting functions and Appendix D gives details on the calculation of the optical conductivity.

II. MODEL, DMFT AND IMPURITY SOLVER

A. Model and DMFT

We study the one-band Hubbard model,

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} d_{i,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

where $t_{i,j}$ is the hopping matrix between sites i and j , U the onsite Coulomb repulsion, $d_{i,\sigma}^\dagger$ the creation (annihilation) operator for an electron of spin σ on site i and $n_{i\sigma} = d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma}$ is the number operator.

The dynamical mean-field theory (DMFT) provides a solution of the Hubbard model that describes the Mott transition in three dimensions and has predictive power for real materials^{3,7}. Drawing from ideas on the solution of the Hubbard model in infinite dimension²¹, the self-energy in this approach depends only on frequency. One first solves the problem of a single site with the Hubbard U , hybridized with an infinite bath of noninteracting electrons, the so-called Anderson model. One extracts the frequency-dependent self-energy of the Anderson model, which is then taken as the self-energy in

the lattice Green's function. The bath is determined self-consistently by requiring that projection of the lattice Green's function on a single site is identical to the single-site Green's function of the Anderson model. The Anderson impurity problem can be solved numerically with a very high precision. DMFT has been justified with a variety of approaches³ including a variational one²². The single-site DMFT is exact in infinite dimension³. Benchmarks against the Bethe ansatz solution in one-dimension shows that DMFT can be an accurate solution of the Hubbard model also in lower dimensions^{23,24}.

Mathematically, the partition function for the Anderson impurity problem is given by the imaginary-time Grassmann path integral

$$Z = \int \mathcal{D}[\psi^\dagger, \psi] e^{-S_0 - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \psi^\dagger(\tau) \Delta(\tau, \tau') \psi(\tau')}, \quad (2)$$

with $\hbar = 1$, $\beta^{-1} = k_B T$, Δ the bath hybridization and S_0 the action of the impurity, which consists of a single site with repulsion U . The self-consistency condition in Matsubara frequency reads

$$\Delta(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)} \right]^{-1}. \quad (3)$$

with Σ the self-energy. On the fcc lattice the single-particle dispersion is given, with lattice spacing $a = 1$, by $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -4t[\cos(k_x)\cos(k_y) + \cos(k_x)\cos(k_z) + \cos(k_y)\cos(k_z)]$. In single-site DMFT, the self-energy is local ($\Sigma(\omega)$) which enables one to transform the integrals over the Brillouin zone entering the self-consistency relation into an integral over the noninteracting density of states $N_0(\omega)$. However, in the case of a 3d fcc lattice, there is no analytic form for $N_0(\omega)$ and its accurate numerical calculation using a Monte-Carlo binning procedure is cumbersome and only produces a fixed finite numbers of points. On the other hand, if we used a Lorentzian as an approximation for the delta function, the band-edges and the Van-Hove singularities would suffer from accuracy problems that could be transferred to the DMFT calculation. We thus performed the calculation with the full k space integration. We devised an adaptive 3d fifth order Gaussian quadrature for a cube. This integration method is explained in Appendix A. For comparisons in calculation of transport properties, we have nevertheless calculated $N_0(\omega)$ using Monte Carlo integration as explained in Appendix C. The resulting noninteracting density of state for the fcc lattice with nearest-neighbor hopping only is shown in Fig. 1.

We have used two "impurity solvers" for the auxiliary Anderson model. They are described in the following subsections.

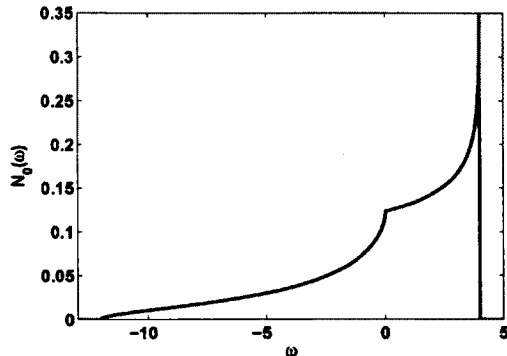


FIGURE 1: Noninteracting density of states for the fcc lattice with nearest-neighbor hopping only. The large particle-hole asymmetry caused by frustration is apparent.

B. CTQMC

The first method is the numerically exact continuous time quantum Monte Carlo method (CTQMC)²⁵, a finite temperature approach that relies on the Monte Carlo summation of all diagrams obtained from the expansion of the partition function in powers of the hybridization Δ . This method does not have a sign problem, and does not have errors associated with time discretization or bath parametrization. It is therefore exact within statistical errors but computationally expensive. We refer to the literature for an explanation of the approach^{8,9}.

C. IPT

We describe the second approach, Iterated Perturbation Theory (IPT), in more details since it is the focus of this paper. IPT is an approximation method that relies on an interpolation from 2nd order perturbation theory for the Anderson impurity problem¹². The interpolation preserves the correct high-frequency limit for the self-energy and is exact in both the noninteracting and the atomic limits. We only consider paramagnetic solutions.

The self-energy in this approach is parametrized by

$$\Sigma(i\omega_n) = U \frac{n}{2} + \frac{A\Sigma^{(2)}(i\omega_n)}{1 - B\Sigma^{(2)}(i\omega_n)}, \quad (4)$$

where

$$\Sigma^{(2)}(i\omega_n) = U^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G_0^\sigma(\tau) G_0^{-\sigma}(-\tau) G_0^{-\sigma}(\tau), \quad (5)$$

with

$$G_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu_0 - \Delta(i\omega_n)} \quad (6)$$

and Δ the hybridization function. The constants A and B

$$\begin{aligned} A &= \frac{n(2-n)}{n_0(2-n_0)} \\ B &= \frac{(1-\frac{n}{2})U + \mu_0 - \mu}{\frac{n_0}{2}(1-\frac{n_0}{2})U^2}, \end{aligned} \quad (7)$$

where $n_0 = 2G_0(\tau = 0^-)$ and $n = 2G(\tau = 0^-)$, are chosen such that one recovers the exact solution in the atomic limit as well as the exact result for arbitrary U in the high-frequency limit. One of the great advantages of IPT is that it also recovers the weak-coupling behaviour of the self-energy to order U^2 for any filling. The Green's function used to obtain the density n is

$$G(i\omega_n) = \sum_k \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma(i\omega_n)}. \quad (8)$$

In Eq. (7), μ is the chemical potential of the lattice that is determined by fixing the value of n while μ_0 is the chemical potential determined by the fictitious density n_0 .

We need an additional equation to fix μ_0 . This problem has been studied carefully in Refs.[17,19]. Setting $\mu = \mu_0$ is not a good option. Indeed, as mentioned in the introduction, fixing Luttinger's volume works only at very low temperature¹⁶. A widely used approach¹⁸ consists in fixing $n = n_0$. We call this approach IPT- n_0 . One can also modify the formula for the interpolated self-energy by requiring that the third moment, appearing in the high-frequency expansion of the Green's function, be satisfied exactly. In this case, the deficiencies of IPT- n_0 at strong coupling are not as severe. We will see below that requiring that double-occupancy takes its exact value is an easier solution that does not modify the simplicity of the original scheme and gives accurate results.

IPT can be implemented efficiently, as described in Appendix B, so that the solution can be obtained in a very short time.

III. BREAKDOWN OF IPT

In this section, we first define the physical parameters that will be used to demonstrate the breakdown of IPT- n_0 . Then we take advantage of the existence of the exact CTQMC impurity solver to characterize the solution of the DMFT equation. The last subsection demonstrates that for U much larger than the bandwidth, IPT- n_0 fails to reproduce even qualitatively the exact solution.

A. Extracting the Fermi liquid parameters

At low T and finite doping, it is known that DMFT predicts a Fermi liquid regime no matter how strong the interaction³. In other words, a quasiparticle peak always

appears at $\omega = 0$ at low T except at half-filling when $U > U_{Mott}$. We characterize the Fermi liquid with three parameters namely the effective chemical potential,

$$\tilde{\mu} = \mu - \Sigma'(0), \quad (9)$$

the quasiparticle weight,

$$Z = \left(1 - \frac{\partial \Sigma'(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega \rightarrow 0}\right)^{-1} \quad (10)$$

and the scattering rate $\Sigma''(0)$, where real and imaginary parts are defined by $\Sigma = \Sigma' + i\Sigma''$. In the DMFT treatment of the Hubbard model, Luttinger's theorem is satisfied at $T = 0$ when $\tilde{\mu}$ takes the value of the noninteracting chemical potential that gives the same density.

All of the above parameters are calculated with the self-energy on the real frequency axis and thus, in principle, one needs to perform an analytical continuation from the data in Matsubara frequencies and then extrapolate to zero temperature. In practice, we calculate the values of the self-energy for a few very low temperatures and use them to extrapolate to zero frequency and zero temperature. For the retarded $\Sigma'(0)$ and $\Sigma''(0)$ we take $\Sigma(\omega_{n=0})$ at the smallest positive $\omega_{n=0}$ for three low temperatures and extrapolate to $T = 0$ using the fact that $\Sigma(\omega_n \rightarrow 0^+) = \Sigma^R(\omega \rightarrow 0)$. For Z , the spectral definitions of the self-energies

$$\begin{aligned} \Sigma'(\omega) &= P \int \frac{d\omega' \Sigma''(\omega')}{\pi \omega' - \omega} \\ \Sigma(i\omega_n) &= \int \frac{d\omega' \Sigma''(\omega')}{\pi \omega' - i\omega_n}, \end{aligned} \quad (11)$$

allow one to prove

$$\frac{\text{Im}[\Sigma(i\omega_n)]}{\omega_n} \Big|_{\omega_n \rightarrow 0} = \int \frac{d\omega' \Sigma''(\omega')}{\pi \omega'^2} = \frac{\partial \Sigma'(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} \quad (12)$$

which, for a linear dependence of $\text{Im}[\Sigma(i\omega_n)]$ on ω_n , also follows from the Cauchy-Riemann relation for holomorphic functions of a complex variable. This last equation with three low temperatures allows us to calculate $\text{Im}[\Sigma(i\omega_{n=0})]/\omega_{n=0}$, extrapolate to $T = 0$ and obtain Z .

B. Expected behavior, as obtained from CTQMC

Consider the one-band Hubbard model on the fcc lattice, where the single particle dispersion is given by $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -4t[\cos(k_x)\cos(k_y) + \cos(k_x)\cos(k_z) + \cos(k_y)\cos(k_z)]$. We present the DMFT results obtained with the CTQMC impurity solver for $U = 8t$ and $U = 32t$, below and above U_{Mott} for the Mott transition at half-filling. The bandwidth is $16t$ for the 3d fcc lattice.

Fig.2 displays the Fermi liquid parameters. In Fig.2 (a) the red solid line shows the noninteracting chemical potential as a function of density. The effective chemical potential $\tilde{\mu} = \mu - \Sigma'(0)$ is shown with blue circles for

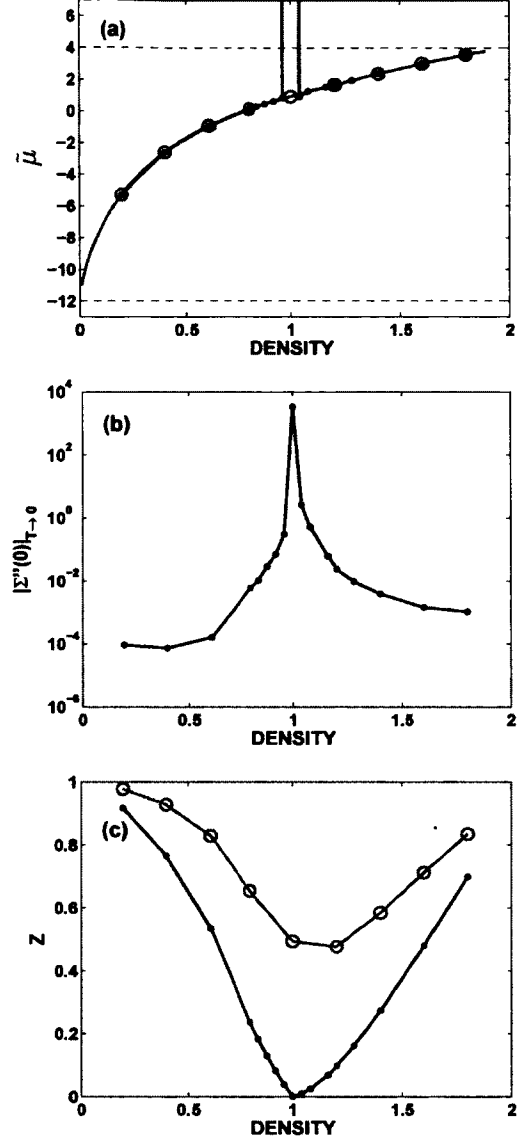


FIGURE 2: (Color online) Results obtained with CTQMC as impurity solver are plotted as a function of density and shown in blue with circles and line for $U = 8t$ and in black with dots and line for $U = 32t$. In all numerical results, energy units are such that $t = 1$. Boltzmann's constant and the lattice spacing are also taken as unity. We obtain the zero-frequency limit from a poor man's approach : we take $\beta t = 25, 50$ and 75 and use the value of the function at the lowest Matsubara frequency in the three cases to perform the extrapolation. (a) Check for Luttinger's theorem : The effective chemical potential $\tilde{\mu} = \mu - \Sigma'(0)$ is equal to the noninteracting chemical potential shown in red except at half-filling where there is a Mott gap for $U = 32t$. (b) At $U = 32t$ the imaginary part of the self-energy at zero frequency $\Sigma''(0)$ should be zero away from half-filling and infinite at half-filling. (c) The single-particle spectral weight Z vanishes only at $n = 1$, $U = 32t$ where there is a Mott gap.

$U = 8t$ and black points for $U = 32t$. The dashed lines indicate the position of the band edges for the 3d fcc lattice. As expected, except at half-filling for $U = 32t$, Luttinger's theorem is satisfied. In Fig.2-(b), the extrapolated scattering rate $\Sigma''(\omega)$ is negligibly small, except for $U = 32t$ at $n = 1$. For $U = 8t$, (not shown) it is of the order 1×10^{-4} and has essentially no density dependence. The value of Z , shown in Fig.2-(c), behaves as expected: For $U > U_{Mott}$, Z vanishes when the occupation approaches half-filling while it is close to the noninteracting value $Z = 1$ when the lattice is almost empty or full. We can also see that even for coupling as large as $U = 32t$, the absence of particle-hole symmetry in the dispersion relation still leads to a value of Z that is not symmetric with respect to half-filling. Clearly, electronic frustration plays an important role in the doped Mott insulator.

C. Breakdown of IPT- n_0

The IPT equations Eqs. (4)-(8) do not determine the value of n_0 . As mentioned previously, for $T = 0$ the requirement that Luttinger's theorem be satisfied (IPT- L) provides an additional independent equation, except at half-filling for $U > U_{Mott}$. However, Luttinger's theorem is in general not satisfied at finite temperature and the method becomes inaccurate. The condition $n = n_0$ has thus been proposed^{17,18} (IPT- n_0). It gives satisfactory results for correlated metals (not for the insulator at half-filling).

The results for the low-temperature extrapolations of $\bar{\mu} = \mu - \Sigma'(0)$ and Z for $U = 8t$ and $U = 32t$ are shown in Fig. 3. Below the Mott transition, $U = 8t$, the $n = n_0$ results (brown (*)) are shown. One can detect only a very small difference with the solid red line. Luttinger's theorem is thus essentially satisfied.

On the other hand, IPT- n_0 for $U = 32t$ (kaki (\square)) gives non-physical results not only¹⁷ for $n > 1$ but, quite generally, close to half-filling. Not only is Luttinger's theorem strongly violated, but for a large range of densities, $n > 1$, $\bar{\mu}$ is outside the band. Many properties of the Fermi liquid are proportional to functions of the noninteracting system evaluated at $\bar{\mu}$. But these functions are zero outside the band and so if $\bar{\mu}$ is outside the band we obtain zero. For example, this would predict an insulator away from half-filling. The situation is not better for Z , especially around half-filling where it vanishes for a finite range of densities when $n > 1$. This demonstrates that at low T , when U is large, IPT- n_0 in its simplest form cannot be applied. We must thus search for a new condition to explore this region of parameter space.

IV. IPT DOUBLE OCCUPANCY : IPT- D

Imposing exact results such as sum-rules, whenever possible, is desirable for any physical theory. Whereas

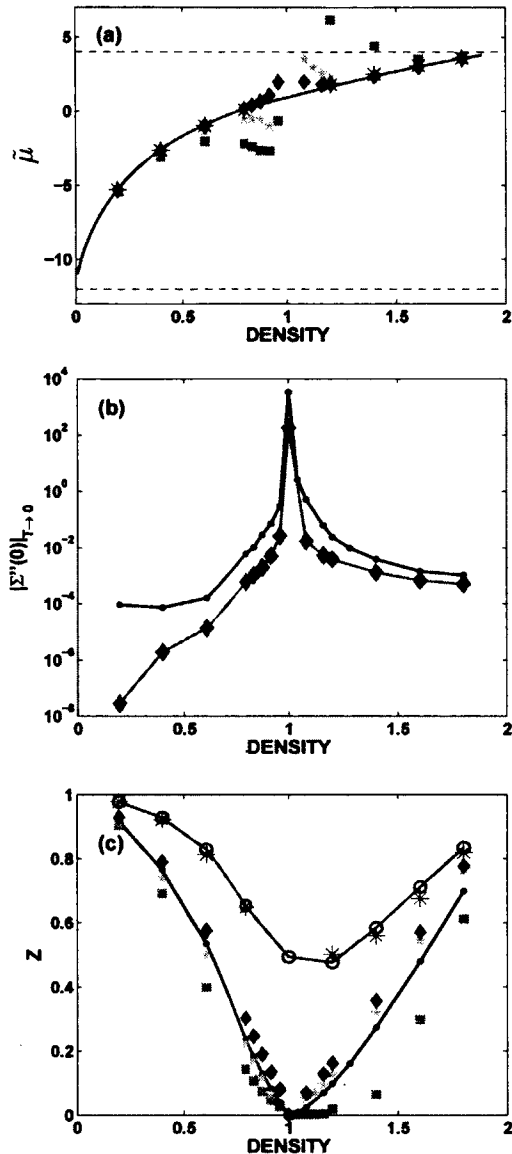


FIGURE 3: (Color online) Fermi liquid parameters as a function of density. Zero frequency results are obtained with the same extrapolation method as in Fig. 2. (a) Check of Luttinger's theorem. The effective chemical potential $\bar{\mu} = \mu - \Sigma'(0)$ should equal the noninteracting value, shown in red, when the theorem is satisfied. For $U = 8t$, the brown asterisks (*) obtained with IPT $n = n_0$ satisfy the theorem. For $U = 32t$ results for three different methods are shown: in kaki (\square) for IPT $n = n_0$, in cyan (*) for IPT D_{naive} and in magenta (\diamond) for IPT $\langle D \rangle_{CTQMC}$. (b) $\Sigma''(0)$ is plotted for $U = 32t$ in magenta (\diamond) for IPT $\langle D \rangle_{CTQMC}$ as above, and compared with the CTQMC results shown previously in Fig.2 (black dots joined by a line). (c) Quasiparticle spectral weight Z computed for different methods and displayed with the same symbols as in (a). We compare with the CTQMC results of Fig. 2, namely blue symbols (\circ) with line for $U = 8t$ and black symbols (\circ) with line for $U = 32t$. The results for IPT $n = n_0$ at $U = 32t$ are un-physical since they predict an insulator away from half-filling.

the condition $n = n_0$ is not required by any fundamental principle, the self-energy must always obey

$$D = \frac{T}{U} \sum_n e^{i\omega_n 0^+} \Sigma(i\omega_n) G(i\omega_n). \quad (13)$$

where $D = \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$ is double occupancy. Enforcing this consistency condition between single-particle properties, such as Σ and G , and a two-particle property, D , has been successful in other approaches, such as the Two-Particle-Self-Consistent theory^{26,27} and multi-orbital IPT²⁸. In the regime of interest here, strong coupling, D can be accurately estimated and is only very weakly dependent on temperature, as discussed in the following subsection. There, we assess the accuracy of the approach in the strong coupling limit. In the weak-coupling limit, the approach will also be useful since when $U \rightarrow 0$, it was shown by Kajueter and Kotliar¹² that the self-energy ansatz Eq.(4) has the correct U^2 behaviour. Their proof just needs to assume that μ_0 and n_0 recover their noninteracting value to zero'th order in U . The choice of fixing D to the exact value as $U \rightarrow 0$ will also force these zero'th order in U results.

A. Exact and naive values of double occupancy at strong coupling

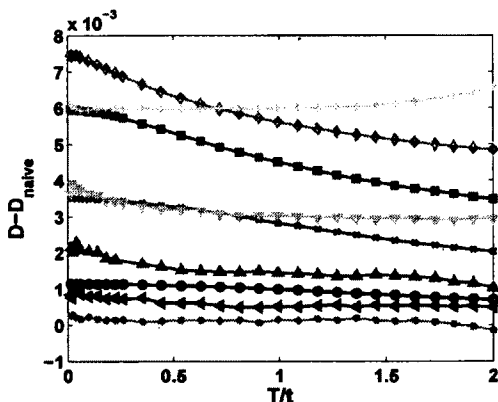


FIGURE 4: (Color online) CTQMC results at $U = 32t$ for double occupancy $D - D_{naive}$ plotted as a function of temperature. We define $D_{naive} = 0$ for fillings $n < 1$ and $D_{naive} = n - 1$ for $n > 1$. The various densities are represented by different symbols : $n = 0.2$ (black (o)), 0.4 (blue (x)), 0.6 (red (□)), 0.8 (green (◇)), 1.0 (yellow (+)), 1.2 (cyan (∇)), 1.4 (magenta (Δ)), 1.6 (brown (◁)) and 1.8 (kaki (*)). The largest deviations from the naive value, occurring close to $n = 1$, are less than 10^{-2} in absolute value.

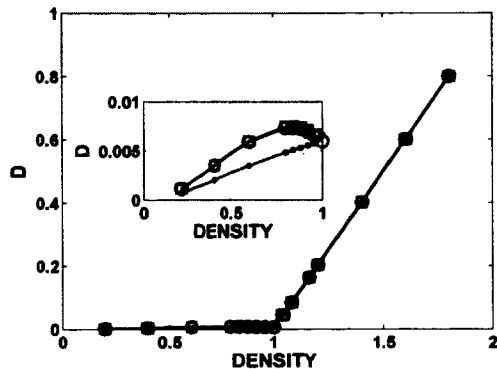


FIGURE 5: (Color online) Double occupancy D as a function of density obtained from CTQMC for $U = 32t$ for three temperatures : $\beta = 25/t$ (black (□)), $\beta = 10/t$ (blue (o)) and $\beta = 0.5/t$ (red (·)). On this scale, the naive value of D is very accurate. The inset is a zoom for densities $n \leq 1$.

For very large U , it is easy to guess that D should depend only very weakly on temperature. In addition, the value of D can be estimated quite accurately. Indeed if $n < 1$ there are unoccupied sites in the lattice and since U is large, D should naively be zero. For $n > 1$, D is necessarily non-zero. If we start from the half-filled, Mott insulator, with one electron per site and add electrons, they must go to a site which is already occupied. Thus D should simply equal the excess number of electrons measured from half-filling, $D = n - 1$. These estimates are called D_{naive} . In reality for $n < 1$ there are corrections of order t/U to double occupancy, giving rise to exchange interaction, and D is slightly larger than zero. For analogous reasons, D for $n > 1$ will always be a bit larger than $n - 1$ i.e. $D = (n - 1) + \delta D$. This is obvious for models with particle-hole symmetry, but it will be true as well, even in the absence of particle-hole symmetry.

We can verify our estimates with the CTQMC results for $U = 32t$. Within CTQMC, D is calculated directly on the impurity by the Monte-Carlo sampling. Fig.4 displays $D - D_{naive}$ as a function of temperature for different densities. We see that $D - D_{naive}$ is small and that the T dependence is on the third significant digits. So, for all practical purposes, we can assume D to be independent of T although it differs from D_{naive} . The values of D obtained are very close to the naive expectation but always slightly larger. In Fig.5 we show the double occupancy D as a function of the density for three different temperature from $T = 0.04t$ to $T = 2t$. This figure confirms again that even if we have some dependence on T , it is quite small and the result is a fairly simple function of the density. Very similar results have been obtained in Ref. [29] in the case of a 3d simple cubic lattice. We thus have a rather simple constraint that we can take into account in IPT to fix all parameters. We call this approach IPT- D . In the next subsection, we will assess the accuracy of this approach and verify how the results are modified when

the exact value of D is used instead of the naive one.

B. Accuracy of Fermi liquid parameters IPT- D

We first set D to its naive values, i.e zero for $n \leq 1$ and $n - 1$ for $n > 1$. The results for $\tilde{\mu}$ and Z are shown in Fig. 3 as cyan stars. Clearly, the value obtained for $\tilde{\mu}$ is in much better agreement with Luttinger's theorem than in the case IPT- n_0 , although it is still incorrect for densities near half-filling. The biggest improvement is that we avoid values of $\tilde{\mu}$ outside the band. Furthermore, in the case of Z , IPT- D is close to the CTQMC results while for IPT- n_0 it is quite far¹⁷ from the correct result, leading in particular to an un-physical insulator over a finite range of densities for $n > 1$.

As we now show, one can improve the results further by using an accurate value of D . That value can be obtained from a number of methods, in particular CTQMC. It can be computed quite accurately and does not require a large number of Matsubara frequencies. Even if CTQMC is available, it may be desirable to use IPT- D because the calculation can either be done directly in real frequency or analytically continued from Matsubara frequencies using simple methods such as Padé approximants¹¹, whereas with CTQMC, Maximum entropy² is necessary. In addition, since D has negligible temperature dependence in strong coupling, only one value of D may be sufficient with IPT- D to compute other quantities for a wide range of temperatures.

Since D is not completely T independent, we use an average called $\langle D \rangle_{CTQMC}$ calculated between $\beta = 75/t$ and $\beta = 0.5/t$ for the purpose of comparison with the naive approach. It is calculated from the arithmetic mean of the numerical values of $D(T)$. Note that the values of $D(T)$ for each n are taken as the arithmetic mean of the last four DMFT iterations. The results are shown in Fig. 3 as magenta lozenges. We see that the results for $\tilde{\mu}$ are in excellent agreement with Luttinger's theorem except very close to half-filling where it deviates, but not too much. Surprisingly, Z is not as accurate as that obtained from the naive estimate of D . But if we look at the results for densities between 0.8 and 1.2, the difference between $Z_{\langle D \rangle_{CTQMC}}$ and Z_{CTQMC} is small and constant and $Z_{\langle D \rangle_{CTQMC}}$ correctly extrapolates to zero at half-filling. A small difference in D can have a quantitative impact on Z , without affecting qualitative trends. For example for $n = 0.84$, the D given by CTQMC is $D = 0.00619$ instead of the naive $D = 0$, whereas for $n = 1.16$, CTQMC gives $D = 0.1637$ instead of $D = 0.16$. We could imagine that because these quantities are at low T , it would be better to take a D that is in the low temperature range. If we do this, we obtain a $\langle D \rangle_{CTQMC}$ slightly larger. We then find that $\tilde{\mu}$ is not really affected while Z is a little bit worse than that obtained from the average D over the larger T range. Some tuning of D would allow us to get a best possible set of $\tilde{\mu}$ and Z , but that is clearly not the purpose of the exercise. Finally, for $\Sigma''(0)$ Fig. 3-

(b) shows that IPT- D is qualitatively correct while being always smaller than CTQMC.

C. Accuracy of the Density of States and Chemical Potential

It is instructive to look at the Density of States obtained from IPT with fixed D and Padé analytical continuation¹¹. We show $n = 0.84$ and $\beta = 25/t$ as typical values in Fig.6. We compare to the CTQMC values obtained from Maximum Entropy analytical continuation of $G(i\omega_n)$. That Green's function is an average over several converged DMFT iterations. The Maximum Entropy implementation that was used here is somewhat crude and thus we must not really focus on the details. The CTQMC results have different errors at different scale, i.e very precise at low ω_n , fluctuating at intermediate ω_n while at large ω_n the results are analytical. Hence, we choose the weight of the entropy term based on heuristic considerations, depending on the real-frequency range we are interested in.

As was noted previously^{12,16}, in IPT there are states in the Mott gap at finite frequency, but their weight is small compared to the states everywhere else, namely near zero frequency and in the lower and upper Hubbard band. Overall, IPT with fixed D compares well with CTQMC, but, at low temperature, what really matters is the region near $\omega = 0$. We thus zoom on this region in Fig. 6-(b). There, we see that in the vicinity of $\omega = 0$, when $D = \langle D \rangle_{CTQMC}$, we are quite close to the CTQMC values. When we use the naive D , the quasi-particle peak is shifted a little bit to the right and so is this why the low T results are different even if the shape and values of the peaks are similar.

We also compare the results for an integrated quantity, $\mu(T)$, that is obtained in general by solving $n = 2 \int f(\omega) \rho(\omega) d\omega$ with $f(\omega)$ the Fermi function and $\rho(\omega)$ the density of states. In our case, this is a byproduct of the DMFT calculation. No analytical continuation is involved. In Fig. 7 we show the results for three densities. In Fig. 7(a) and (b) we note that the numerical values obtained with the different methods differ by at most about 10%. The best results are for IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$ since the curves are qualitatively very similar to the CTQMC ones with a derivative quantitatively quite close for all T . The absolute difference between IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$ and CTQMC is almost doping and temperature independent. The derivative with respect to temperature for both IPT- n_0 and IPT- D_{naive} is not as good. At high enough temperature, all methods give similar results. Fig. 7(c) shows the result closer to half-filling, comparing CTQMC with IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$, the best IPT method. As already discussed, IPT- n_0 gives un-physical results in the vicinity of half-filling.

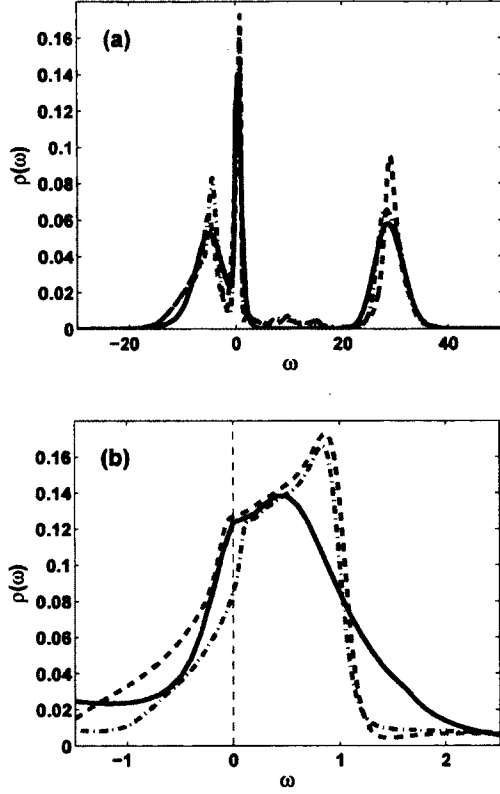


FIGURE 6: (Color online) Density of states for $n = 0.84$, $\beta t = 25$ and $U = 32t$ obtained with three methods : black (solid line) with CTQMC maxent, blue (- -) with IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$, and red (-.) with IPT- D_{naive} . (b) is a zoom of (a) around $\omega = 0$. The value at zero frequency is improved when a more accurate value of D is used in IPT.

D. Energy and Specific Heat

In this section we compare internal energy and specific heat in IPT- D with CTQMC. Within CTQMC, energy can be calculated quite accurately with a reasonable number of Matsubara frequencies. Indeed, it was shown by Haule³⁰ that the kinetic energy $\langle K \rangle$ is proportional to the average perturbation order $\langle k \rangle$ for a given set of parameters. As already discussed, the double occupancy is calculated directly by CTQMC and thus the total energy is given by

$$E_{CTQMC}(T) = -T\langle k \rangle + UD. \quad (14)$$

In general, for a many-body system, the energy is given by the thermal average, in the grand-canonical ensemble,

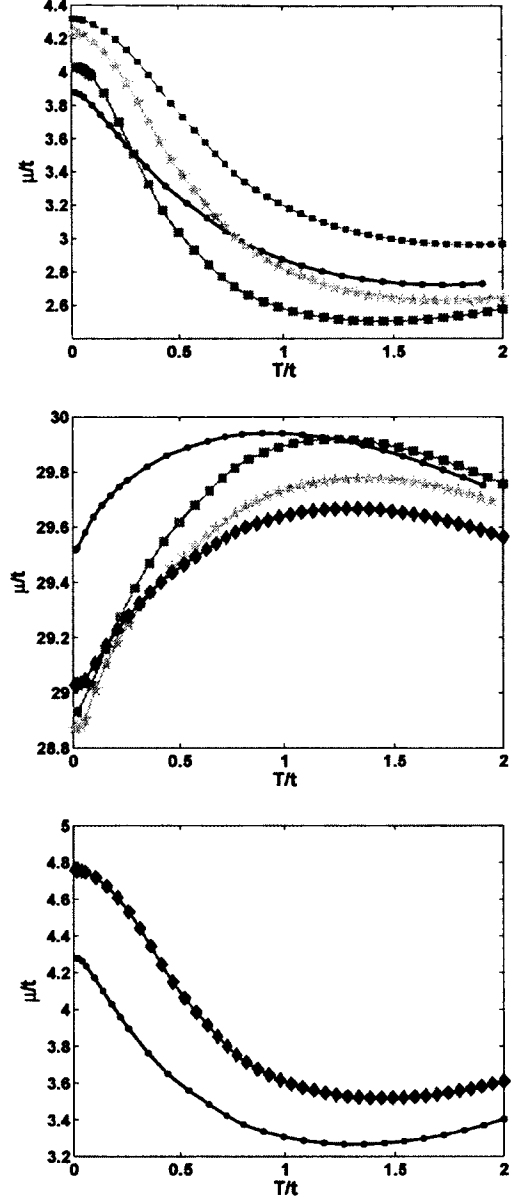


FIGURE 7: (Color online) Chemical potential as a function of temperature for different IPT approximations, compared with the reference CTQMC calculations as black dots with line obtained for $U = 32t$ and different densities : (a) $n = 0.80$, (b) $n = 1.2$ and (c) $n = 0.84$. The three different IPT approximations are given in kaki (\square) for IPT- n_0 , in cyan ($*$) for IPT- D_{naive} , and in magenta (\diamond) for IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$. The latter approximation in magenta (\diamond) is best, having a more or less doping and temperature independent offset $\delta\mu/t \sim 0.5$ when compared with the reference CTQMC in black.

of the Hamiltonian. For the Hubbard model we may write

$$\begin{aligned}
 E(T) &= \frac{1}{N} \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k (d_{k,\sigma}^\dagger d_{k,\sigma}) + \frac{U}{N} \sum_i \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle \\
 &= \mu n + \frac{1}{N} \sum_k \varepsilon_k G_k(\tau=0^-) - \frac{1}{N} \sum_k \left. \frac{\partial G_k(\tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0^-} \\
 &= \frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \sum_{k,n} e^{-i\omega_n 0^-} [i\omega_n + \varepsilon_k + \mu] G_k(i\omega_n).
 \end{aligned} \tag{15}$$

For IPT- D , we use directly the imaginary time expression. Since we generally compute Green's functions only for positive imaginary time, we use the equivalent expression

$$\begin{aligned}
 E(T) &= \mu n + U n - \mu + \frac{1}{N} \sum_k \varepsilon_k G_k(\tau=0^+) \\
 &\quad - \frac{1}{N} \sum_k \left. \frac{\partial G_k(\tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0^+},
 \end{aligned} \tag{16}$$

where we used that for the fcc lattice $\sum_k \varepsilon_k = 0$. Once the energy is calculated, the specific heat C_n is given by $C_n = \frac{dE(T)}{dT}$.

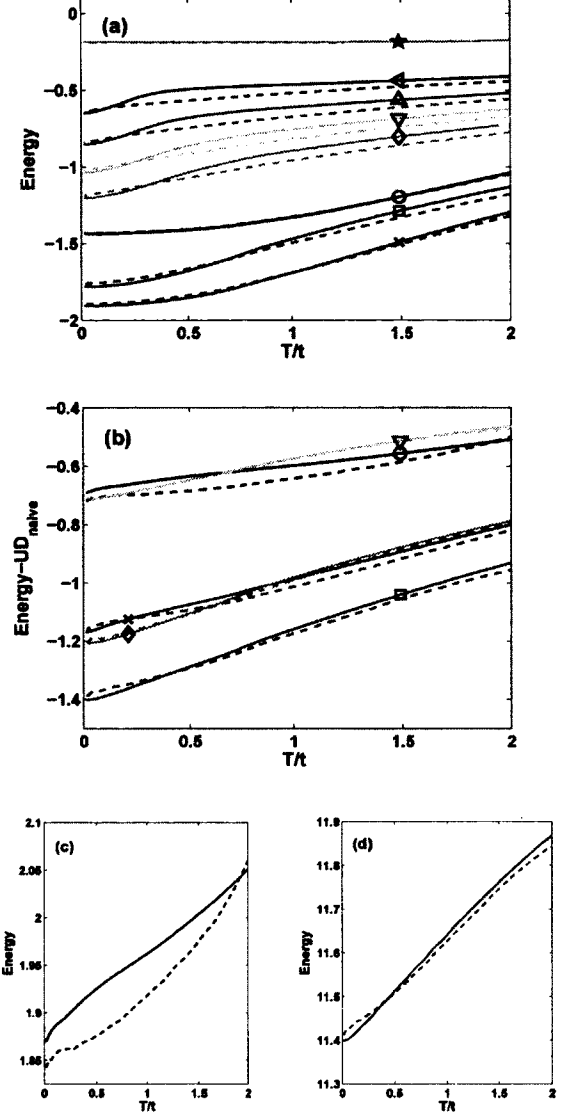


FIGURE 8: (Color online) Energy as a function of temperature obtained from IPT- D (solid lines) and CTQMC (dashed lines) for $U = 32t$. (a) Densities equal to, or below half-filling $n = 0.2$ (black \circ), 0.4 (blue \times), 0.6 (red \square), 0.8 (green \diamond), 0.84 (cyan ∇), 0.88 (magenta \triangle), 0.92 (brown \triangleleft) and 1.0 (kaki \star). For densities above half-filling, displayed in (b), $n = 1.08$ (black \circ), 1.2 (blue \times), 1.4 (red \square), 1.6 (green \diamond), 1.8 (cyan ∇), the quantity UD_{naive} is subtracted from the energy to allow the results to fit on the same scale. (c) is a zoom for $n = 1.08$ and (d) a zoom for $n = 1.4$.

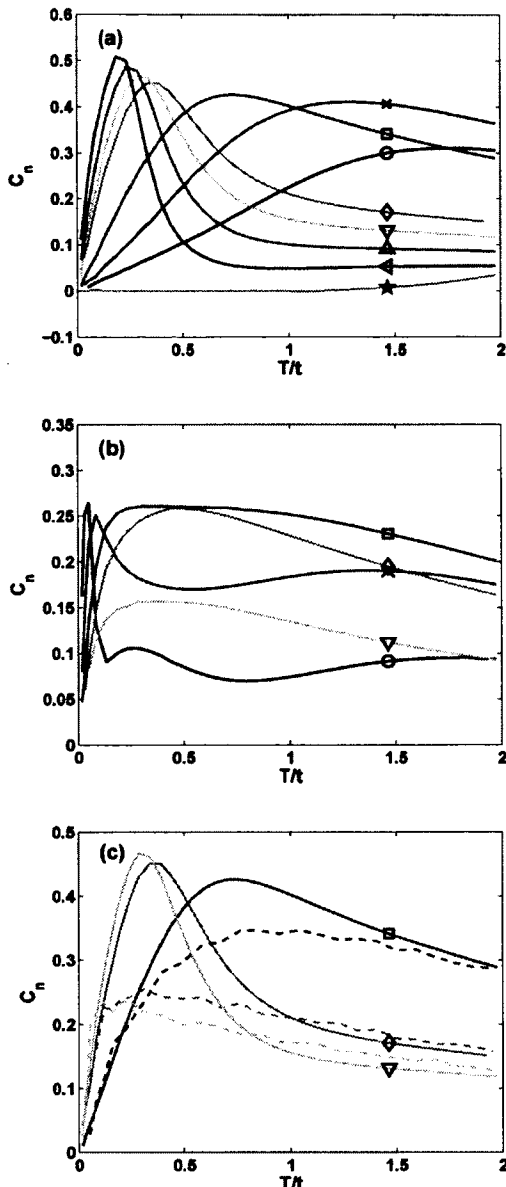


FIGURE 9: (Color online) Specific heat at constant filling as a function of temperature for $U = 32t$. (a) Results from IPT- D (solid line) for densities below half-filling: $n = 0.2$ (black (o)), 0.4 (blue (x)), 0.6 (red (□)), 0.8 (green (◇)), 0.84 (cyan (▽)), 0.88 (magenta (△)), 0.92 (brown (◁)) and 1.0 (kaki (★)), (b) Specific heat from IPT- D (solid line) for densities above half-filling $n = 1.08$ (black (o)), 1.2 (blue (x)), 1.4 (red (□)), 1.6 (green (◇)), 1.8 (cyan (▽)), (c) Comparison between IPT- D as solid lines and CTQMC as dashed lines for $n = 0.6$ (red (□)), 0.8 (green (◇)) and 0.84 (cyan (▽)). The peak positions and shape coincide, even though the absolute values differ. In this case, since CTQMC values come from differentiation of Monte Carlo data, there is a rather large uncertainty, especially for peaks.

To obtain values for all temperatures, we have considered the fixed D as the one given by the average over $0.5 \leq \beta \leq 75/t$ of the CTQMC results. This is what we called IPT- $\langle D \rangle_{CTQMC}$ previously. We use IPT- D for brevity. We present the comparison in Fig.8 for different densities. Note the change in color code (see the legend). In Fig.8-(a) we display results for densities $n \leq 1$ while in Fig.8-(b), the density is above half-filling $n > 1$. The energy scale for the latter case is shifted by a filling dependent quantity UD_{naive} so that the various fillings can be displayed on the same scale. In Fig.8-(c) and (d) we zoom on $n = 1.08$ and $n = 1.4$ respectively without energy shift to emphasize the differences between IPT- D and CTQMC. Comparing those differences in Fig.8-(c) with those in Fig.8-(d), we see that the further we are from half-filling, the better the agreement.

In Fig.9 we plot the specific heat as predicted by IPT- D . Once again we consider separately $n \leq 1$ in Fig.9-(a) and $n > 1$ in Fig.9-(b). The closer we are to half-filling, the lower the temperature at which the peak that signals the appearance of the Fermi liquid regime appears. Despite the strong coupling, the particle-hole asymmetry is noticeable.

In Fig.9-(c) we can compare the IPT- D and the CTQMC results for three densities $n = 0.60, 0.80$ and 0.84 . The CTQMC results for the energy are not completely smooth especially at low T because of statistical errors in the data. Thus, if we were to calculate the specific heat C_n for CTQMC, we would, for many of the values of n , have to be very careful before calculating the derivative. Here, we just performed a simple derivative on the raw CTQMC data to verify the trend. From the results for the energy, Fig.8-(a) we already knew that even if the change of curvature in the coherent-incoherent region exists also for CTQMC, it is much smoother than the one obtained from IPT. This is apparent indeed in C_n . Nevertheless, the transition temperature for the coherent-incoherent crossover given by the position of the maximum is quite similar for both methods even if, for CTQMC, its exact value is hard to really pinpoint due to the statistical errors in the raw data.

We end this subsection by noting that the inadequacy of IPT- n_0 also shows when the energy is calculated. One finds an increase of the energy with decreasing T at low T , which is of course non physical since this corresponds to a negative specific heat.

E. DC resistivity

Analytical continuation of response functions obtained with CTQMC is in general very difficult. With IPT, one can calculate response functions by first analytically continuing the self-energy with Padé approximants and using the real-frequency expressions in terms of spectral weight. In this section, we obtain results for the electrical resistivity ρ within IPT- D to verify whether they are physically sensible at strong coupling. With IPT- n_0

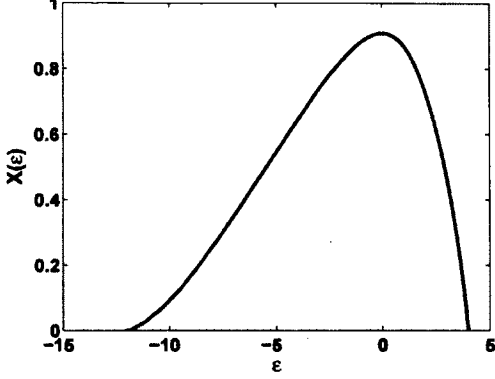


FIGURE 10: Transport function $X(\varepsilon) = \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$, as calculated in appendix C.

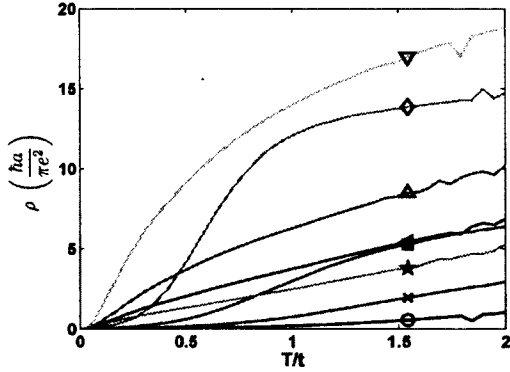


FIGURE 11: (Color online) Resistivity as a function of temperature for $U = 32t$ as calculated by IPT- D for different values of density: $n = 0.2$ (black \circ), 0.4 (blue \times), 0.6 (red \square), 0.8 (green \diamond), 1.2 (cyan ∇), 1.4 (magenta \triangle), 1.6 (brown \triangleleft) and 1.8 (black \star). The resistivity are largest close to half-filling where they exhibit low coherence temperatures.

they are not: One obtains an insulator at finite filling on the electron-doped side. Since vertex corrections vanish in single-site DMFT, the conductivity can be obtained from

$$\sigma_{xx}(0) = \sigma_0 \int d\omega \left(-\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \right) \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 A^2(k, \omega), \quad (17)$$

where $\sigma_0 = \frac{\pi e^2}{\hbar a}$ and $A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma(\omega)} \right\}$. We have restored the lattice spacing a to exhibit the units. Because the self-energy is local, we can also replace the triple sum over k by a one dimensional integral

over an energy variable.

$$\sigma_{xx}(0) = \sigma_0 \int d\varepsilon X(\varepsilon) \int d\omega \left(-\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \right) A^2(\varepsilon, \omega), \quad (18)$$

where the so called transport function that includes the effect of the lattice is $X(\varepsilon) = \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$. For a simple cubic lattice in any dimension, the calculation of this function can be brought in the form of a one-dimensional integral³¹, but on the fcc lattice this is not possible. If one wishes to use the expression Eq. (18) instead of keeping the full three dimensional integrals in Eq. (17), X must be calculated numerically. We explain in Appendix C an efficient way to do this. The result for the fcc lattice is shown in Fig. 10. We have tested both ways of obtaining $\sigma_{xx}(0)$, i.e. Eq. (18) and Eq. (17) and they give essentially the same answer. They cannot give exactly the same number because $X(\varepsilon)$ is calculated for a fixed number of points and we must thus interpolate between these points when performing the integral over ε . This adds another source of numerical error not present in Eq. (17). But, contrary to the noninteracting density of states (Fig. 1), $X(\varepsilon)$ is a smooth function (Fig. 10) and thus the process of interpolation will only induce a negligible error. When the integrals are performed in the order shown in Eq. (18), i.e. integrate over ω first, the resulting integrand for the ε integration is smooth and $X(\varepsilon)$ need not be obtained with extreme accuracy. For these reasons, for the conductivity we preferred to use Eq. (18). Using Eq. (17) increases dramatically the calculation time here contrary to $G(i\omega_n)$ or $\chi_{11}(i\Omega_n)$ discussed in the next section.

At low temperature and finite doping, the conductivity is proportional to $X(\bar{\mu})$. Thus, if $\bar{\mu}$ is such that its value is outside the noninteracting band $-12 \dots 4$, $X(\bar{\mu}) = 0$ and thus $\sigma_{xx}(0) = 0$. In an exact implementation of single-site DMFT, a null conductivity can only happen at half-filling for $U > U_{Mott}$. At any finite doping, there is a quasi-particle peak and Luttinger's theorem is respected (Fig.2-(a)). As IPT- n_0 fails with respect to Luttinger's theorem (Fig.3-(a)) in that case ρ start diverging at low T for the densities with $\bar{\mu}$ outside the band while it should exhibit the T^2 behavior of a Fermi liquid.

We show in Fig.11 the result for IPT- D . We see that it has the correct T^2 behavior at low temperature. For clarity, we omitted values of densities between $n = 0.80$ and $n = 1.2$. Nothing very different happens there. We still have the low temperature T^2 behavior and, as is already obvious from the figure, the absolute values of ρ obtained are larger and larger when we approach half-filling, the Mott insulating state. Note that close to half-filling, even though there is a tendency for the resistivity to saturate at very high temperature³², this occurs at values of the resistivity much larger than the Mott-Ioffe-Regel limit $\rho \sim \hbar a / e^2$. This is characteristic of incoherent transport in strongly correlated systems.

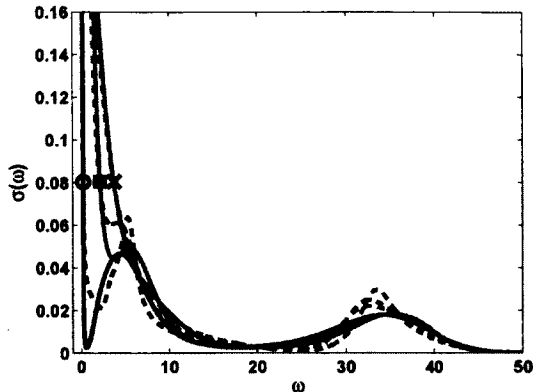


FIGURE 12: (Color online) Optical conductivity for $U = 32t$ and $n = 0.80$, as calculated from IPT- D for three different temperatures using two analytical continuation approaches for each temperature. The maximum entropy results are represented with solid lines and the Padé analytical continuations with dashed lines. The broadest zero-frequency peak (red (\times)) is for the largest temperature, $\beta = 1/t$, and the narrowest one (black (\circ)) for the lowest temperature, $\beta = 25/t$. The intermediate case, $\beta = 2.3/t$ is in blue (\square). The features in the optical conductivity can be identified with transitions between the Fermi level and peaks in the single-particle density of states.

F. Optical conductivity

We analyzed the performance of our new solver IPT- D for Fermi surface properties at $T = 0$ (Z, Σ', Σ''), for integrated quantities like chemical potential μ , energy, specific heat, resistivity and frequency-dependent functions such as the density of states. To finish, we look at the optical conductivity. Appendix. D explains how it is calculated using the susceptibility $\chi_{11}(i\Omega_n)$ in bosonic Matsubara frequency and analytical continuation.

As a first check, which does not depend on analytical continuation, we verify the f -sum rule $\chi_{11}(i\Omega_n = 0) = \sum_k \frac{\partial^2 \epsilon_k}{\partial k_x^2} \langle n_k \rangle$ (see for example Ref. [33]). In the case of nearest-neighbor hopping, this quantity can be related to the kinetic energy. For a fcc lattice one finds $\sum_k \frac{\partial^2 \epsilon_k}{\partial k_x^2} \langle n_k \rangle = -\frac{2}{3} \langle K \rangle$ where $\langle K \rangle$ is the average kinetic energy. For CTQMC the average kinetic energy is obtained from $\langle K \rangle = -T \langle k \rangle$ where, as already mentioned, $\langle k \rangle$ is the average perturbation order obtained directly from the Monte-Carlo simulation. To calculate $\chi_{11}(i\Omega_n = 0)$ one needs the dressed Green's function, or equivalently the self-energy ($\Sigma(i\omega_n)$). A very large number of numerical operations is necessary, as explained in Appendix. D, but analytical continuation is unnecessary. For all the tests we did, the ratio $\left| \frac{\chi_{11}(i\Omega_n=0)}{\langle K \rangle} \right|$ agreed with $2/3$ up to the third digit. For example, for $n = 0.84$, $\beta/t = 25$ and $U = 32t$ the ratio is 0.6668, while for $n = 0.80$ it is

0.6664.

Analytical continuation of CTQMC is problematic, especially since we have a very wide frequency range given the large value of U . Hence we display only results obtained with analytical continuation of IPT- D and check for consistency with what is expected from the density of states. Results for density $n = 0.80$, interaction $U = 32t$ and three temperatures is shown in Fig. 12. Solid and dashed lines correspond respectively to Maximum Entropy³³ and Padé analytical continuation. There is some quantitative disagreement but the qualitative information is the same. At low temperature ($\beta/t = 25$ black lines) there is a clear peak around $\omega \approx 5$ which corresponds to transitions between the lower Hubbard band and the quasi-particle peak appearing in the density of state for a similar density in Fig.6. At larger temperature (blue lines $\beta/t = 2.3$), the decrease of the peak near $\omega \approx 5$ in $\sigma(\omega)$ corresponds to the disappearance of the quasi-particle peak and loss of coherence. That loss of coherence for $n = 0.80$ is signaled by the maximum in C_n observed in Fig. 9. At an even larger temperature, (red lines $\beta/t = 1$) the $\omega \approx 5$ peak has disappeared since we are now in the incoherent regime. The peak for transition to the upper Hubbard band around $32t$ is always visible.

V. MULTIORBITAL SYSTEM

It is important to know whether our approach can be generalized to multi-orbital systems. Exploring this question in detail is beyond the scope of the present work. Nevertheless, one can easily verify, at least for one case, that this is trivially done.

There are several generalizations of IPT to the multi-orbital case.^{28,35-37} In the most general case of an interpolative approach, as presented by Kotliar *et al.*,⁷ the self-energy of the band α may be represented as a continuous fraction expansion

$$\Sigma_\alpha(i\omega_n) = \Sigma_\alpha(i\infty) + \frac{A_\alpha}{i\omega_n - B_\alpha - \frac{C_\alpha}{i\omega_n - D_\alpha \dots}}, \quad (19)$$

where the constants $A_\alpha, B_\alpha, C_\alpha, D_\alpha \dots$ are obtained by calculating the different moments of the self-energy. Yeyati *et al.*²⁸ fixed the constants in the model with a single value of U by requiring that the interpolative self-energy recover a simplified atomic limit and the weak coupling limit. The simplified version of the atomic-limit Green's function for the multiorbital system neglects fluctuations of the charge with respect to the mean charge by more than one electron. When this is done, a continuous fraction is obtained with the form

$$\Sigma_\alpha(i\omega_n) = \Sigma_\alpha(i\infty) + \frac{a_\alpha \Sigma_\alpha^{(2)}(i\omega_n)}{1 - b_\alpha \Sigma_\alpha^{(2)}(i\omega_n) - R_\alpha(i\omega_n)}, \quad (20)$$

where

$$R_\alpha(i\omega_n) = \frac{c_\alpha \left[\Sigma_\alpha^{(2)}(i\omega_n) \right]^2}{1 - d_\alpha \Sigma_\alpha^{(2)}(i\omega_n)}, \quad (21)$$

where $\Sigma_\alpha^{(2)}(i\omega_n)$ is again given by Eq.(5) but now with bands indices α and corresponding μ_0^α ($= -\tilde{\epsilon}_m$ in Ref. 28). The constants a_α , b_α , c_α and d_α are then given solely in terms of the band occupation numbers n_α , the band double occupancies $\sum_{\beta \neq \alpha} \langle n_\alpha n_\beta \rangle$ and the μ_0^α . In the approach by Yeyati *et al.*²⁸, one uses the relations between the band occupancies n_α and the trace of the band Green's function and between the double occupancies and the trace of the band-self-energy times the band-Green's function as self-consistent relations together with Luttinger's theorem applied to individual bands to determine n_α , $\sum_{\beta \neq \alpha} \langle n_\alpha n_\beta \rangle$ and μ_0^α . In the context of DMFT, one would also have to obtain the chemical potential of the lattice problem using the total density of electrons.

If we find the values of either n_α or of $\sum_{\beta \neq \alpha} \langle n_\alpha n_\beta \rangle$ by other means, we do not need to impose Luttinger's theorem anymore to find all unknown quantities. This provides a generalization of this scheme to finite temperature, where Luttinger's theorem does not apply. One may also hope, just as we found in the one-band case, that this will fix the problems encountered at $n > 1$ ³⁴ with the approach of Yeyati *et al.*²⁸ applied in the DMFT context. Once again, it is necessary to obtain n_α or $\sum_{\beta \neq \alpha} \langle n_\alpha n_\beta \rangle$ from other methods, but, as we discussed previously for the one-band model, these observables are easily obtained with high accuracy from CTQMC. Other very interesting observables are extremely difficult to obtain or need very long calculation times with exact CTQMC. Thus, IPT can be a useful tool to obtain a good approximation for the physics from quantities that are inexpensive to obtain accurately with CTQMC or with other exact methods. We also note that if both n_α or $\sum_{\beta \neq \alpha} \langle n_\alpha n_\beta \rangle$ are known independently, the self-consistent relations of Ref. 28 can be used to verify the accuracy of the approach by comparison. Further investigations of these ideas and of generalizations to other multiorbital approaches are needed. One really important question to verify, in our DMFT context, is whether there is at least one of the variables that we determine from CTQMC (or from another source) which is also a slowly varying function of temperature or which can be determined from simple considerations in the strong-coupling limit. This variable could be n_α , $\sum_{\beta \neq \alpha} \langle n_\alpha n_\beta \rangle$ or even the total double occupancy $D = \sum_\alpha D_\alpha$. The fact that D is weakly dependent on T and easy to obtain in strong coupling was extremely useful in our case. This would be the first step to study when implementing the multiorbital case.

VI. CONCLUSION

In addition to being numerically inexpensive, IPT provides a method where analytically continued results can be reliably obtained directly in real frequencies or from Padé approximants¹¹ instead of Maximum Entropy methods required when Quantum Monte Carlo is used as an impurity solver.

However, for large interaction strengths in doped Mott insulators, the popular condition for IPT where one imposes $n = n_0$ fails at low temperature for a broader regime than previously expected¹⁷. As a solution, we propose that one should instead enforce the exact relation Eq.(13) between double occupancy and single particle quantities. Further improvements are expected if one also enforces the third moment of the spectral weight¹⁷.

Our new method, IPT- D , can be used for any coupling if D is known. Double occupancy D can be obtained quite accurately by a number of methods and is negligibly dependent on temperature for large coupling. For example, in the strong coupling regime one can use exact diagonalization of small clusters or slave bosons³ while, at weak coupling, methods such as Two-Particle-Self-Consistent theory (TPSC)^{26,27} give good results. Also, in both regimes, Quantum Monte-Carlo methods can be used. In the very large U limit, the naive estimate $D = 0$ for $n < 1$ and $D = n - 1$ for $n > 1$ leads to qualitatively correct results, except very close to half-filling. Our approach has been benchmarked on the fcc lattice for a number of observables. The large-particle hole asymmetry of that lattice survives in observable quantities even for interaction strength equal to twice the bandwidth.

Acknowledgments

The authors thank Dominic Bergeron for the maximum entropy codes that we used for analytical continuation of the CTQMC data and for discussions. This work was partially supported by NSERC (L.-F.A. and A.-M.S.T.), the Tier I Canada Research Chair Program (A.-M. S. T.), and Université de Sherbrooke. A.-M.S.T is grateful to the Harvard Physics Department for support and P. Sémon for hospitality during the writing of this work. Partial support was also provided by the MIT-Harvard Center for Ultracold Atoms. Simulations were performed using a code based on the ALPS library³⁸ on computers provided by CFI, MELS, Calcul Québec and Compute Canada. Portions of the hybridization expansion impurity solver developed by P. Sémon were inspired by the code gracefully provided by E. Gull and P. Werner.

Annexe A: INTEGRATOR

As explained in the main text, for accuracy in the DMFT iteration we need to perform integrals over a three

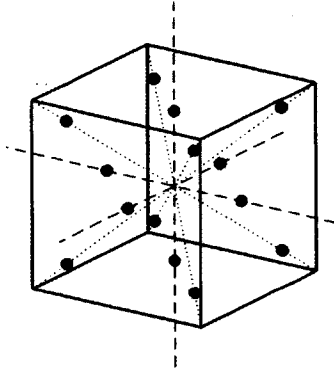


FIGURE 13: The special points for a 3d Gaussian quadrature of fifth order over a cube of length $2h$.

dimensional Brillouin zone. In this appendix we use symmetry and ideas from Gaussian quadrature, adaptive methods, and statistics, to devise an accurate and fast integrator. We first obtain a quadrature of order five and then explain how we can make it adaptive.

We need a normalized triple integral over a cube of length $2h$ centered at a point $\mathbf{r}_0 = [x_0, y_0, z_0]$. If we put the origin at this point, the integral takes the form

$$\frac{1}{(2h)^3} \int_{-h}^h \int_{-h}^h \int_{-h}^h dx dy dz f(x, y, z). \quad (\text{A1})$$

We considered a normalized integral because the integrals we need to solve are over k -space and thus need normalization.

We first show that fourteen appropriately chosen points and only two weights can give us an approximation of order five. Usually when one develops a Gaussian quadrature, only the order is specified and the points and weights are obtained. In 3d, this may be very cumbersome so we start with points symmetrically placed and we will show that they give a good approximation. Take points on each axis and on the diagonals of the cube, $(\pm a, 0, 0)$, $(0, \pm a, 0)$, $(0, 0, \pm a)$ and $(\pm b, \pm b, \pm b)$ as illustrated in Fig. 13. By symmetry, there are only two weights w_1 and w_2 . Thus the integral is approximated by

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2h)^3} \int_{-h}^h \int_{-h}^h \int_{-h}^h dx dy dz f(x, y, z) \\ & \approx w_1 [f(\pm a, 0, 0) + f(0, \pm a, 0) + f(0, 0, \pm a)] \\ & + w_2 f(\pm b, \pm b, \pm b). \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

To determine the numbers a , b , w_1 and w_2 we require that every polynomial of order five or less should be integrated exactly by this scheme. In 3d, this corresponds to many different polynomials but we have only four unknowns and apparently too many equations. This is where symmetry comes into play. First, since we integrate over a cube from $-h$ to h , all odd polynomials integrate to

zero. Also, for example, a polynomial of the form $x^2 y^2$ is equivalent to $y^2 z^2$, or x^2 is equivalent to y^2 and z^2 and so on for every type of polynomials. Thus we only have to consider four different polynomials i.e. 1 , x^2 , x^4 and $x^2 y^2$.

Taking $f(x, y, z) = 1$, the integral gives one and thus we obtain the first equation

$$6w_1 + 8w_2 = 1 \quad (\text{A3})$$

Taking $f(x, y, z) = x^2$, the integral gives $\frac{1}{(2h)^3} \int dx dy dz x^2 = \frac{h^2}{3}$ and we obtain

$$2a^2 w_1 + 8b^2 w_2 = \frac{h^2}{3} \quad (\text{A4})$$

Similarly, with $f(x, y, z) = x^4$, we have $\frac{1}{(2h)^3} \int dx dy dz x^4 = \frac{h^4}{5}$ and we find

$$2a^4 w_1 + 8b^4 w_2 = \frac{h^4}{5} \quad (\text{A5})$$

Finally, taking $f(x, y, z) = x^2 y^2$, $\frac{1}{(2h)^3} \int dx dy dz x^2 y^2 = \frac{h^4}{9}$ and we obtain

$$8b^4 w_2 = \frac{h^4}{9} \quad (\text{A6})$$

Solving these equations, we obtain

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{40}{361} \\ w_2 &= \frac{121}{2888} \\ a &= \sqrt{\frac{19}{30}} h \\ b &= \sqrt{\frac{19}{33}} h \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

To make the method adaptive, we take our cube and split it in eight. If we take one of these cubes, and put the origin in its center we now have the integral over a cube from $-\frac{h}{2}$ to $\frac{h}{2}$ centered at \mathbf{r}_0 . We can thus use Eq. (A2) but with $h \rightarrow \frac{h}{2}$ and the points $(x_0 \pm a, y_0, z_0)$, $(x_0, y_0 \pm a, z_0)$, $(x_0, y_0, z_0 \pm a)$ and $(x_0 \pm b, y_0 \pm b, z_0 \pm b)$. We can do this for each of the eight cubes obtaining the new approximation for the integral $I = \frac{1}{8} \sum_i I_i$. The process can be repeated. Each of the eight cubes can be subdivided again with integrals from $-\frac{h}{4}$ to $\frac{h}{4}$. When one subdivision has converged, this part is stopped. The calculation has converged when all subdivisions have converged.

The convergence criterion requires a detailed discussion. Assume that we aim at a relative error ϵ . For an adaptive method, we need absolute error. Indeed, with a simple 1d adaptive integration method where one subdivides the interval in half, if one wishes an absolute error δ one usually imposes absolute error $\frac{\delta}{2}$ on each of the two sub-intervals. To determine the absolute error in our

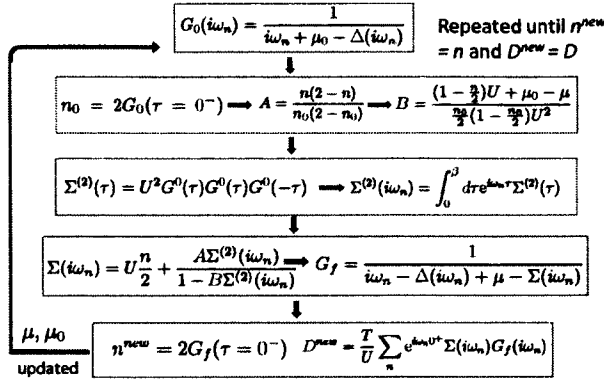


FIGURE 14: Flow chart for the impurity solver loop in IPT. There is also an outer loop for Δ , see text.

case, we first estimate the value of the integral by performing three subdivisions, i.e. using $8^3 = 512$ cubes. Let us call the resulting integral $I^{(3)}$. Then we take for the absolute error needed for the adaptive integration method $\delta = \epsilon I^{(3)}$. If we imagine launching the integrator from scratch, one would ask for $\delta/8$ accuracy in each of the 8 sub-cubes when we do a division. This often leads to a final answer that is more accurate than desired. For heavy numerical calculations it is desirable to optimize the choice of the error in each subinterval to minimize the computation time while maintaining the final desired accuracy. In our case, we claim that it suffices to require the absolute error within each subinterval to be $\frac{\delta}{\sqrt{8}}$ instead of $\frac{\delta}{8}$, as we might have naively expected. Indeed, if we consider each value on the sub-cube as a random variable I_i and want an error δ on the original cube i.e. on the sum $I = \sum_i I_i$, an error $\frac{\delta}{\sqrt{8}}$ for each sub-cube suffices if we assume that the errors on the I_i 's are independent and uniformly distributed (IUD). Indeed, in that case $\text{Var}(I) = \sum_i \text{Var}(I_i)$ and thus $\delta_I = \sqrt{8}\delta_{I_i}$. This hypothesis of an IUD is of course not rigorous, but we have extensively tested this choice for the error with many different integrands with known integrals. By taking advantage of the fact that statistical hypothesis on the errors become reasonable since the integral is high dimensional, our approach is faster. We also checked that our approach is more precise and faster than using three adaptive 1d integrators. Additional speedup can be obtained by taking into account the symmetry of the integrand.

Annexe B: IPT-D IMPLEMENTATION

In this section we detail how we implemented IPT-D. IPT as an approximative solver is fast, but it

needs to also be implemented in the fastest possible way. In IPT, we are solving a system of two nonlinear equations with two unknowns: μ_0 and μ . The equations are $n - 2\frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n 0^+} G(i\omega_n) = 0$ and $D - \frac{T}{U} \sum_n e^{i\omega_n 0^+} \Sigma(i\omega_n) G(i\omega_n) = 0$ where n and D are fixed numbers for a particular set of parameters. The self-energy must be calculated using Eqs. (4),(5). We show how to do this efficiently.

We first start with guesses for the hybridization function $\Delta(i\omega_n)$, and the two chemical potentials μ_0 and μ . Then we calculate the impurity model loop as shown in Fig. 14. Once the loop has been converged, we use the self-energy to calculate the lattice Green's function $G(i\omega_n) = \sum_k \frac{1}{i\omega_n - (\epsilon_k - \mu) - \Sigma(i\omega_n)}$. With it, the new hybridization function can be calculated $\Delta(i\omega_n) = -\Sigma(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n) + i\omega_n + \mu$ and finally Δ , μ and μ_0 are fed back to the impurity model loop. This is repeated until global convergence is reached.

It must be specified here that Δ is a function of both μ and μ_0 but in the present algorithm, once Δ is fed to the impurity loop, it is considered to be independent while μ and μ_0 are iterated until we obtain the correct n and D . However, once the system is close to convergence, the difference between Δ in the inner loop and the correct $\Delta(\mu, \mu_0)$ becomes really small and once convergence is reached, it is indeed the same function. This is also the approach that was adopted originally in [12]. This approach is much faster than fixing μ and μ_0 , converging the entire DMFT calculation, calculating the new n and D , updating μ and μ_0 and converging again the DMFT calculation until we obtain the correct n and D . We have tested and used the two methods and they give the same results. The fast method can, for some particular parameter set, become unstable and thus, in these cases, the long, more rigorous method, may be used.

To perform this calculation, we see from Fig. 14 that we must calculate Fourier transforms from Matsubara frequencies to imaginary time and back. This must be calculated numerically and we now explain how to do it efficiently. The first necessary step is to calculate $G_0(\tau)$. We can show that the function $\Delta(i\omega_n)$ for a one band model with a dispersion relation ϵ_k behaves asymptotically like $\Delta(i\omega_n)_{n \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{i\omega_n} \sum_k \epsilon_k^2 \equiv \frac{c}{i\omega_n}$, similar to what was previously obtained³⁹. For the 3d fcc lattice with nearest-neighbor hopping $c = 12t^2$. We can use this to define $G_0^{inf}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \bar{\mu}_0 - \frac{c}{i\omega_n}}$ that gives the asymptotic high-frequency behavior of G_0 . We need it because the Fourier transform necessary to get $G_0(\tau)$ must be approximated by a finite sum and thus the function must be convergent at least as fast as $\frac{1}{(i\omega_n)^2}$, while $G_0(i\omega_n) \rightarrow \frac{1}{i\omega_n}$. We thus consider the function $F = G_0 - G_0^{inf}$ instead and add the missing terms analytically.

$$\begin{aligned}
G_0(\tau) &= T \sum_{-N/2}^{N/2-1} e^{-i\pi(2n+1)j/N} F(i\omega_n) \\
&+ T \sum_n e^{-i\omega_n\tau} G_0^{inf}(i\omega_n) \\
&= e^{-i\pi j(1/N-1)} T \underbrace{\sum_{n=0}^{N-1} e^{-i2\pi nj/N} F(i\omega_{n-N/2})}_{\text{definition of FFT}} \\
&+ T \sum_n e^{-i\omega_n\tau} G_0^{inf}(i\omega_n).
\end{aligned} \tag{B1}$$

In the first sum, imaginary time has been discretized in N bins so that $j/N = \tau/\beta$. There is then a maximum and minimum Matsubara frequency. In the second equation of Eq. (B1), FFT stands for Fast Fourier Transform. The last term, $T \sum_n e^{-i\omega_n\tau} G_0^{inf}(i\omega_n)$ can be calculated analytically using complex analysis. We find, for $\tau > 0$,

$$\begin{aligned}
T \sum_n e^{-i\omega_n\tau} G_0^{inf}(i\omega_n) &= -\frac{z_1}{z_1 - z_2} f(-z_1) e^{-z_1\tau} \\
&- \frac{z_2}{z_2 - z_1} f(-z_2) e^{-z_2\tau} \equiv H^>(\tau),
\end{aligned} \tag{B2}$$

where $f(z)$ is the Fermi function and $z_j = \frac{-\mu_0 \pm \sqrt{\mu_0^2 + 4c}}{2}$. Hence, in terms of FFT's, we obtain

$$G_0(\tau) = e^{-i\pi j(1/N-1)} \frac{1}{\beta} \text{FFT}(F(i\omega_{n-N/2})) + H^>(\tau). \tag{B3}$$

We must remember that FFT does not give the value at $\tau = \beta$. We will come back to that point later. We also need $G_0(-\tau)$. This can be done using the antiperiodic property or by using a procedure similar to $G_0(\tau)$. In that case, we obtain (again for $\tau > 0$)

$$G_0(-\tau) = e^{-i\pi j(1/N-1)} \frac{1}{\beta} \text{FFT}(F^*(i\omega_{n-N/2})) + H^<(\tau), \tag{B4}$$

where

$$H^<(\tau) \equiv \frac{z_1}{z_1 - z_2} f(z_1) e^{z_1\tau} + \frac{z_2}{z_2 - z_1} f(z_2) e^{z_2\tau}. \tag{B5}$$

With these two Green's function we can calculate the second order contribution to the AIM self-energy that appears in IPT Eq. (5). In this equation, we need to perform an integral. To obtain an asymptotic behavior in Matsubara frequencies that decays instead of being periodic, we cannot do a direct integration³. The trick here is to perform a cubic spline interpolation of $I(\tau) = G_0^2(\tau)G_0(-\tau)$ and then Fourier transform that spline interpolation. To obtain the spline, one needs two conditions to solve the system of equations. In our case, it suffices to find the derivatives at $\tau = 0^+$ and $\tau = \beta^-$. We will show later

that making the Fourier transform of the spline is really accurate and introduces a minimum of numerical errors.

Up to now, we have only considered $\tau > 0$ and thus what we need are the derivative at 0^+ and at β^- . If, for the moment, we consider a paramagnetic system we can write $I(\tau) = G_0^2(\tau)G_0(-\tau)$. The derivative is thus

$$\frac{dI(\tau)}{d\tau} = 2G_0(\tau)G_0(-\tau) \frac{dG_0(\tau)}{d\tau} + G_0^2(\tau) \frac{dG_0(-\tau)}{d\tau}. \tag{B6}$$

We calculate the derivative of the Green's functions from their definition

$$\begin{aligned}
\frac{dG_0(\tau)}{d\tau} &= T \sum_n e^{-i\omega_n\tau} (-i\omega_n) F(i\omega_n) + \frac{dH^>(\tau)}{d\tau} \\
\frac{dG_0(-\tau)}{d\tau} &= T \sum_n e^{-i\omega_n\tau} (-i\omega_n) F^*(i\omega_n) + \frac{dH^<(\tau)}{d\tau}.
\end{aligned} \tag{B7}$$

By defining $F_1(i\omega_n) \equiv (-i\omega_n)F(i\omega_n)$ and $F_2(i\omega_n) \equiv (-i\omega_n)F^*(i\omega_n)$, we obtain

$$\begin{aligned}
\frac{dG_0(\tau)}{d\tau} &= e^{-i\pi j|1/N-1|} \frac{1}{\beta} \text{FFT}(F_1(i\omega_n)) \\
&+ \frac{z_1^2}{z_1 - z_2} f(-z_1) e^{-z_1\tau} + \frac{z_2^2}{z_2 - z_1} f(-z_2) e^{-z_2\tau} \\
\frac{dG_0(-\tau)}{d\tau} &= e^{-i\pi j|1/N-1|} \frac{1}{\beta} \text{FFT}(F_2(i\omega_n)) \\
&+ \frac{z_1^2}{z_1 - z_2} f(z_1) e^{z_1\tau} + \frac{z_2^2}{z_2 - z_1} f(z_2) e^{z_2\tau}.
\end{aligned} \tag{B8}$$

With these two equations, we can get the derivatives at $\tau = 0^+$. To obtain the Green's function and its derivative at $\tau = \beta^-$, we use the spectral representation of the Green's function to show that $G_0(\beta^-) = -1 - G_0(0^+)$, $\left. \frac{dG_0(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=\beta^-} = -\tilde{\mu}_0 - \left. \frac{dG_0(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=0^+}$ and $\left. \frac{dG_0(-\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=\beta^-} = -\tilde{\mu}_0 - \left. \frac{dG_0(-\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=0^+}$.

We now have everything we need to calculate the derivative of Eq. (B6) for $\tau = 0^+$ and $\tau = \beta^-$. Knowing $I(\tau)$ and $\frac{dI(\tau)}{d\tau}$ we can calculate the coefficients of the spline. We need the Matsubara-Fourier transform of functions represented by that spline on the right-hand side of

$$f(i\omega_m) = \int_{\tau_0}^{\tau_N} d\tau e^{i\omega_m\tau} f(\tau). \tag{B9}$$

Let us call $S(\tau)$ the piecewise cubic spline for $f(\tau)$. The method is presented in details in Appendix E of [33]. Integrating by parts, the result for fermionic frequencies is

$$\begin{aligned}
f(i\omega_m) &= \frac{-S_1(0) - S_N(\beta)}{i\omega_m} + \frac{S'_1(0) + S'_N(\beta)}{(i\omega_m)^2} \\
&+ \frac{-S''_1(0) - S''_N(\beta)}{(i\omega_m)^3} \\
&+ N \frac{(1 - e^{i\omega_m \frac{\beta}{N}})}{(i\omega_m)^4} \text{IFFT} \left(e^{\frac{i\pi n}{N}} S'''_{n+1} \right),
\end{aligned} \tag{B10}$$

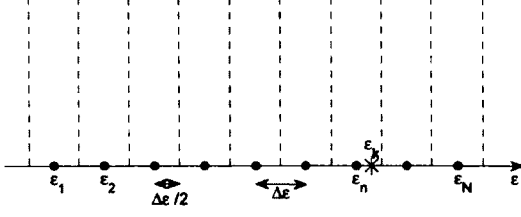


FIGURE 15: Illustration of the Monte Carlo integration scheme used to obtain $N_0(\varepsilon)$ and $X(\varepsilon)$

where IFFT is the inverse Fast Fourier transform. This result is what we needed since it has the correct high-frequency behavior where in principle the first three terms are exact while the last one is obtained from a numerical inverse Fourier transform. Since the latter is the coefficient of $\frac{1}{(i\omega_n)^4}$, errors do not adversely affect the high-frequency behavior.

Annexe C: CALCULATION OF $N_0(\varepsilon)$ AND $X(\varepsilon)$

Even though for the DMFT iterations we found that the way to obtain accurate results was to use the adaptive method described in Appendix A, we show here how to calculate $N_0(\varepsilon)$, the noninteracting density of states and $X(\varepsilon)$. The latter quantity appears in calculations of the conductivity and transport properties in general and it is in this context that we used the results presented here. Both quantities have the general form $\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k})\delta(\varepsilon - \varepsilon_f)$. Since our band structure is not simple, we cannot perform the integral analytically. The question is thus, how do we treat the delta function in a numerical calculation?

A simple approach would be to replace the delta function by a Lorentzian and perform the integral using an adaptive scheme. But, this approximation for the delta function gives tails at the edges of the band. A Monte Carlo scheme is preferable not only because the sharpness of the delta function is maintained without tails, but also because one does not need to do a triple integral for each value of ε : The complete function of ε is obtained at once.

We first choose for how many energy ε points we want to know the function. This number defines a number of bins, shown as dashed lines in Fig. 15. One then generates a random point (k_x, k_y, k_z) , calculates $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ and locates the bin where this number belongs. For example, in Fig. 15, the random $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ belongs to the bin n . We then add to this bin $\frac{1}{\Delta\varepsilon}F(\mathbf{k})$. This is equivalent to approximating the delta function by a rectangle of finite width. We continue this process M times and divide, at the end, the numbers in the bins by M . The function

is thus given by the numbers in the bins, each bin corresponding to a particular energy ε . Accuracy and smoothness can be improved by increasing the number of random points.

Annexe D: OPTICAL CONDUCTIVITY

For the optical conductivity, we need the current-current correlation function in bosonic Matsubara frequencies. In DMFT, vertex corrections vanish³, hence we have

$$\chi_{11}(i\Omega_l) = - \sum_{\mathbf{k}, \sigma} v_{\mathbf{k}}^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_{\sigma}(k, i\omega_n) G_{\sigma}(k, i\omega_n + i\Omega_l), \quad (\text{D1})$$

where Ω_l are bosonic Matsubara frequencies while ω_n are fermionic. To compute this, we again use the convolution theorem and FFT, as described for IPT in Appendix B. The above equation can be written as

$$\begin{aligned} \chi_{11}(i\Omega_l) &= - \int_0^{\beta} d\tau e^{i\Omega_l \tau} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} v_{\mathbf{k}}^2 G_{\sigma}(k, \tau) G_{\sigma}(k, -\tau) \\ &= - \int_0^{\beta} d\tau e^{i\Omega_l \tau} F(\tau). \end{aligned} \quad (\text{D2})$$

The only difference with Eq. (B9) is that here we have bosonic frequencies. Using again the cubic spline trick we obtain an expression similar to Eq. (B10). For $\Omega_l \neq 0$

$$\begin{aligned} f(i\Omega_l) &= \frac{-S_1(0) + S_N(\beta)}{i\Omega_l} + \frac{S_1'(0) - S_N'(\beta)}{(i\Omega_l)^2} \\ &+ \frac{-S_1''(0) + S_N''(\beta)}{(i\Omega_l)^3} + N \frac{(1 - e^{i\Omega_l \frac{\beta}{N}})}{(i\Omega_l)^4} \text{IFFT}(S_{n+1}'''). \end{aligned} \quad (\text{D3})$$

while for $\Omega_l = 0$

$$\begin{aligned} f(0) &= \sum_{n=1}^N \left[\frac{a_n}{4} (\tau_n^4 - \tau_{n-1}^4) + \frac{b_n}{3} (\tau_n^3 - \tau_{n-1}^3) \right. \\ &\left. + \frac{c_n}{2} (\tau_n^2 - \tau_{n-1}^2) + d_n (\tau_n - \tau_{n-1}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{D4})$$

with a_n , b_n , c_n and d_n the coefficients of the cubic spline.

We also need to go from Matsubara frequencies to imaginary time for $G_{\mathbf{k}}(\tau)$ and for $F(\tau)$ in Eq. (D2). We proceed to obtain the analog of Eq. (B3). G_{inf} has a similar structure since the asymptotic behavior of the self-energy is $\Sigma(i\omega_n) = U n/2 + \frac{U^2 n(2-n)}{4i\omega_n}$. This time the poles are at

$$z_j = \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U n/2) \pm \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U n/2)^2 + 4c}}{2}, \quad (\text{D5})$$

where $c = U^2 n(2-n)/4$.

Once again, the values at $\tau = \beta^-$ are found using the spectral representation of G_k . The expressions are

$$G_k(\beta^-) = -1 - G_k(0^+). \quad (\text{D6})$$

$$G_k(-\tau)\Big|_{\tau=\beta^-} = 1 - G_k(-\tau)\Big|_{\tau=0^+}. \quad (\text{D7})$$

$$\frac{dG_k(\tau)}{d\tau}\Big|_{\tau=\beta^-} = (\varepsilon_k - \mu + Un/2) - \frac{dG_k(\tau)}{d\tau}\Big|_{\tau=0^+}. \quad (\text{D8})$$

$$\frac{dG_k(-\tau)}{d\tau}\Big|_{\tau=\beta^-} = (\varepsilon_k - \mu + Un/2) - \frac{dG_k(-\tau)}{d\tau}\Big|_{\tau=0^+}. \quad (\text{D9})$$

We can thus calculate $F(\tau)$ appearing in Eq. (D2) and its first derivative at $\tau = 0^+$ and $\tau = \beta^-$ to find the cubic spline interpolation.

The sum over wave vectors k requires some comments. Like for the DMFT calculation, we use the adaptive scheme in Appendix A. However, if we look at $F(\tau)$ in Eq. (D2), in principle for each τ we need to perform

the integral over k independently, but the whole point of FFT is to obtain all τ points at the same time. Our solution is to launch the integrator for all τ at the same time and keep in memory the estimate of the integral for each τ while we refine the estimate. Once the integrator converges for $\tau = 0$, we conclude that this k grid is the one for all τ and stop the calculation. Since we keep all values in memory, we have the function for all τ calculated for the grid in k space appropriate for $\tau = 0$. We verified that by converging the calculation for other values of τ we obtain the same answer. We have also tried the other way around, where we interchange the integral over k and the Fourier transform in Eq. (D2). In this case, we converge the zero frequency and, once again, the results are essentially the same.

Once we have calculated $\chi_{11}(i\Omega_l)$, we need to obtain the real frequency representation since the optical conductivity is given by $\chi''_{11}(\omega)$. In the case of CTQMC, we use the maxent analytical continuation scheme developed in Bergeron *et al.* [33] for the conductivity. For IPT results we use both Padé and maxent to find $\chi_{11}(\omega)$.

-
- ¹ A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).
² M. Jarrell, Phys. Rev. Lett. **69**, 168 (1992).
³ A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
⁴ M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, and H. R. Krishnamurthy, Phys. Rev. B **58**, R7475 (1998).
⁵ G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, Phys. Rev. Lett. **87**, 186401 (2001).
⁶ T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, Reviews of Modern Physics **77**, 1027 (2005).
⁷ G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, Reviews of Modern Physics **78**, 865 (pages 87) (2006).
⁸ E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
⁹ P. Werner, A. Comanac, L. de Medici, M. Troyer, and A. J. Millis, Phys. Rev. Lett. **97**, 076405 (2006).
¹⁰ M. Jarrell and J. Gubernatis, Physics Reports **269**, 133 (1996), ISSN 0370-1573.
¹¹ H. J. Vidberg and J. W. Serene, Journal of Low Temperature Physics **29**, 179 (1977).
¹² H. Kajueter and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **77**, 131 (1996).
¹³ M. J. Rozenberg, G. Kotliar, and X. Y. Zhang, Phys. Rev. B **49**, 10181 (1994).
¹⁴ M. J. Rozenberg, G. Kotliar, H. Kajueter, G. A. Thomas, D. H. Rapkine, J. M. Honig, and P. Metcalf, Phys. Rev. Lett. **75**, 105 (1995).
¹⁵ K. Held, Advances in Physics **56**, 829 (2007).
¹⁶ H. Kajueter, Ph.D. thesis, Rutgers, The State University of New Jersey (1996).
¹⁷ M. Potthoff, T. Wegner, and W. Nolting, Phys. Rev. B **55**, 16132 (1997).
¹⁸ A. Martin-Rodero, E. Louis, F. Flores, and C. Tejedor, Phys. Rev. B **33**, 1814 (1986).
¹⁹ D. Meyer, T. Wegner, M. Potthoff, and W. Nolting, Physica B : Condensed Matter **270**, 225 (1999).
²⁰ J. Merino and R. H. McKenzie, Phys. Rev. B **61**, 7996 (2000).
²¹ W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
²² M. Potthoff, Eur. Phys. J. B (France) **32**, 429 (2003).
²³ C. J. Bolech, S. S. Kancharla, and G. Kotliar, Phys. Rev. B **67**, 075110 (2003).
²⁴ M. Capone, M. Civelli, S. S. Kancharla, C. Castellani, and G. Kotliar, Phys. Rev. B **69**, 195105 (2004).
²⁵ P. Werner and A. J. Millis, Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics) **74**, 155107 (pages 13) (2006).
²⁶ Y. M. Vilk and A.-M. S. Tremblay, J. Phys I (France) **7**, 1309 (1997).
²⁷ A.-M. S. Tremblay, in *Theoretical methods for Strongly Correlated Systems* ed. by F. Mancini and A. Avella (Springer series, 2011).
²⁸ A. Levy Yeyati, F. Flores, and A. Martin-Rodero, Phys. Rev. Lett. **83**, 600 (1999) and also Yeyati, A. L., A. Martin-Rodero, and F. Flores, 1999, e-print cond-mat/9910190.
²⁹ L. De Leo, J.-S. Bernier, C. Kollath, A. Georges, and V. W. Scarola, Phys. Rev. A **83**, 023606 (2011).
³⁰ K. Haule, Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics) **75**, 155113 (pages 12) (2007).
³¹ L.-F. Arsenault, unpublished.
³² M. Jarrell and T. Pruschke, Phys. Rev. B **49**, 1458 (1994).
³³ D. Bergeron, V. Hankevych, B. Kyung, and A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. B **84**, 085128 (2011).
³⁴ H. Kajueter, 1996, Ph.D. thesis, Rutgers University Graduate School, New Brunswick, NJ.

- ³⁵ T. Saso, *J. Phys. : Condens. Matter* **13** L141–L146 (2001)
- ³⁶ T. Fujiwara, S. Yamamoto and Y. Ishii, *J. Phys. Soc. Jpn* **72**, 777, (2003).
- ³⁷ S. Y. Savrasov, V. Oudovenko, K. Haule, D. Villani, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **71**, 115117 (2005)
- ³⁸ A. Albuquerque et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1187 (2007).
- ³⁹ E. Koch, G. Sangiovanni, and O. Gunnarsson, *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* **78**, 115102 (pages 11) (2008).

Chapitre 3

Grand pouvoir thermoélectrique et son origine entropique dans les isolants de Mott dopés

Ce chapitre présente sous forme d'article les résultats sur le pouvoir thermoélectrique dans les systèmes fortement corrélés. Il s'attarde spécialement au comportement de deux méthodes approximatives, l'une à haute fréquence (S^* et S^{**}) et l'autre où l'ordre des limites thermodynamique et DC est inversé (S_{Kelvin}). Les calculs sont effectués avec la DMFT un site et la CTQMC et IPT comme solveurs d'impuretés. Les régimes d'applicabilité des méthodes sont exhaustivement investigués pour le cas de l'isolant de Mott dopé.

Après une introduction discutant le pouvoir thermoélectrique dans les systèmes corrélés et les idées générales de l'article, une première section (Section II) est consacrée à présenter rapidement la DMFT (II.A) et comment le pouvoir thermoélectrique peut être théoriquement défini, incluant les deux méthodes approximatives (II.B). La Section III est consacrée aux résultats obtenus à l'aide de la méthode exacte, celle de Kubo, III.A les résultats du cas sans interaction et III.B les résultats pour le métal fortement corrélé et l'isolant de Mott dopé. La Section IV compare en détail les approximations du pouvoir thermoélectrique avec les résultats obtenus avec Kubo en fonction de la température. Les régimes basse et haute température sont ensuite considérés séparément. Une méthode pour déterminer le signe du pouvoir thermoélectrique sans prolongement analytique est présentée dans l'Annexe A. L'Annexe B présente la comparaison de S_{Kelvin} à très grand U .

Contribution des auteurs : Le présent auteur et premier auteur a utilisé une méthode qu'il a développée dans l'article [59] et la CTQMC pour calculer diverses propriétés reliées au pouvoir thermoélectrique. Il est de plus responsable de la majeure partie de l'écriture de l'article et de la production de tous les résultats. Il a défini le plus rigoureusement possible les méthodes approximatives utilisées. Il a aussi imaginé la méthode pour déterminer le signe du pouvoir thermoélectrique sans prolongement analytique présentée dans l'Annexe A. Le deuxième auteur, Sriram Shastry, est celui qui au départ a développé les idées de regarder à fréquences infinies et d'invertir l'ordre des limites. Il a dérivé les équations correspondantes. Le troisième auteur Patrick Sémon a modifié son code de CTQMC pour tirer parti des astuces existantes dans le cas de la DMFT un site et pour qu'il soit applicable au cas fcc 3d. Le dernier auteur, le professeur André-Marie Tremblay a supervisé le travail de l'article en tant que directeur de thèse et il a participé à l'écriture de l'article et à l'interprétation des résultats.

Cet article est publié dans la revue *Physical Review B : Condensed Matter*, publiée par l'*American Physical Society*. La référence est [60].

Entropy, frustration, and large thermopower of doped Mott insulators on the fcc lattice

Louis-François Arsenault¹, B. Sriram Shastry², Patrick Sémon¹, and A.-M. S. Tremblay^{1,3}

¹ *Département de Physique and RQMP, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, QC, Canada*

² *Physics Department, University of California, Santa Cruz, California 95064, USA*

³ *Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario, Canada.*

Electronic frustration and strong correlations may lead to large Seebeck coefficients. To understand this physics on general grounds, we compute the thermopower of the one-band Hubbard model on the three-dimensional fcc lattice over the whole range of fillings for intermediate and large interaction strengths. Dynamical mean-field theory shows that when the density approaches half-filling, the fcc lattice at strong coupling exhibits a large low temperature Seebeck coefficient S . The largest effect occurs as one approaches $n = 1$ from dopings where electronic frustration is maximized. The high-frequency limit of the thermopower and the Kelvin limit are both used to provide physical insight as well as practical tools to estimate the thermopower. The high-frequency limit gives a reliable estimate of the dc limit at low temperature when the metal becomes coherent. By contrast, the Kelvin approach is useful in the strongly interacting case at high temperature when transport is incoherent. The latter result shows that in doped Mott insulators at high temperature and strong coupling, the thermopower can be understood on entropic grounds.

I. INTRODUCTION

The search for better thermoelectric materials has focused on strongly correlated materials in recent years, going beyond traditional semiconductor systems. Narrow-band correlated oxides in quasi-two-dimensional systems such as sodium cobaltate Na_xCoO_2 ¹ show large thermoelectric power (or Seebeck coefficient S) $S \sim 100\mu\text{V}/\text{K}$, at $\sim 100\text{K}$. Mott Hubbard physics is invoked to understand this extraordinary scale of S in Na_xCoO_2 and $\text{Sr}_x\text{La}_{1-x}\text{TiO}_3$ ², often in the limit of zero bandwidth or atomic limit $t \rightarrow 0$,²⁻⁴. More recently, FeSb_2 (a Kondo insulator or a correlated band insulator) has drawn much attention.⁵⁻⁷ This is a three-dimensional compound with a colossal Seebeck coefficient $S \sim 45,000\mu\text{V}/\text{K}$ that is of great interest for thermoelectric cooling at cryogenic temperatures.

For more traditional classes of thermoelectric materials, such as the semiconductor Bi_2Te_3 , the Bloch-Boltzmann transport theory points to a way to optimize the band structure for thermoelectric applications⁸. In the case of strongly correlated materials, the situation is much more complicated due to the fragility of the quasiparticles. These appear with strongly renormalized physical properties only in the so-called coherent regime that may develop at very low temperatures in the presence of correlations. Strongly correlated systems favour large thermopower then because the large effective masses correspond to small Fermi temperatures. The temperature scale for maximum thermopower is set by fractions of hopping t . Estimates for real materials give for V_2O_3 ⁹ $t \approx 580\text{K}$, for FeSi ,¹⁰ $t \approx 152\text{K}$, and $t \approx 100\text{K}$ for Na_xCoO_2 ¹¹. Hence the peaks that are found for $T < t$ as well as the strong temperature dependence up to about $T \sim t$ are in a physically relevant temperature range not far from room temperature. Room temperature may even fall in the incoherent regime where Fermi liquid theory

does not apply and S can be large.

Early studies of the effect of correlations on the thermopower focused on the Hubbard model on unfrustrated lattices¹²⁻¹⁶. On these unfrustrated lattices, it is unlikely that large values of thermopower S can be achieved¹⁷ because when the temperature T is of the order of the coherence temperature T^{coh} , the thermopower has contributions from the quasiparticle peak but also from the adjacent Hubbard band and these contributions have opposite sign. Study of the effect of frustration on the cubic lattice with next-nearest-neighbor hopping at half-filling for interaction strengths below the Mott transition¹⁸ show that the peaks that are obtained in S are similar to those in the electronic specific heat and are associated with the thermal destruction of the quasiparticles. More recently, realistic calculations^{17,19} of thermopower for experimentally interesting compounds have shown increase in thermopower due to correlations^{7,20,21}. The role of frustration has been emphasized in particular for the cobaltate Na_xCoO_2 using the $t - J$ model on a 2D finite triangular lattice¹¹. Realistic calculations for that compound^{22,23} demonstrate that frustration and interactions combined also with disorder can lead to large enhancements.

Here we focus on a generic model system with no disorder. More specifically, we study the fcc lattice because of its prevalence in materials and because its electronic structure is frustrated already for nearest-neighbor hopping. Shastry and coworkers²⁴⁻²⁷ have argued that in correlated materials, electronic frustration can amplify the Seebeck coefficient considerably beyond Bloch-Boltzmann (band) theory expectations. The fcc lattice has optimal thermopower, according to the Bloch-Boltzmann theory⁸, when the chemical potential coincides with the sharp peak in the density of states. Here we show, instead, that in the presence of interactions, large thermoelectric effects appear at low temperatures close to half-filling and for dopings that correspond to

large electronic frustration, provided the system is sufficiently correlated that the half-filled band is insulating. We show that insights on the temperature and doping dependence of our results may be obtained from methods developed recently by Shastry and coworkers²⁴⁻²⁷. In these approaches, one considers either the high-frequency limit or the ultra-low frequency (Kelvin) limit. In the latter case, the thermopower is related to the density dependence of the entropy at fixed temperature. We find that such entropic considerations beyond the Bloch-Boltzmann theory can control the thermopower in the incoherent regime and that in the coherent regime the high-frequency limit is often reliable. In other words, while approximate, these approaches also give correct order-of-magnitude estimates and bypass the difficulties facing Kubo formula calculations. These methods can be straightforwardly implemented in existing codes for realistic calculations.²⁸

In the next section we describe the model and the dynamical mean-field theory (DMFT) approach along with the three formulas used for thermopower : Kubo, high-frequency and Kelvin. The results are then discussed for two values of interaction strengths, half bandwidth and two times the bandwidth, in the context of the Kubo formula. The next to last section makes comparisons with the high-frequency and Kelvin approaches. We end with a summary. Appendix A shows that in the strong-coupling limit the thermopower changes sign at half-filling $n = 1$ instead of $n = 0.8$ in the Bloch-Boltzmann theory. Appendix B presents benchmarks, in the worse case, of the impurity solver we used for the Kubo calculations.

II. MODEL AND METHODS

A. DMFT

Dynamical mean-field theory (DMFT) has proven its accuracy for the Hubbard model and its predictive power for real materials^{29,30} that have a clearly three-dimensional structure, despite the fact that the method is exact only in infinite dimension. Here we apply it to the one-band Hubbard model on the fcc lattice where the single-particle dispersion is given by $\epsilon_{\mathbf{k}} = -4t[\cos(k_x)\cos(k_y) + \cos(k_x)\cos(k_z) + \cos(k_y)\cos(k_z)]$. We take nearest-neighbor hopping t positive.

We consider only the paramagnetic phase. To solve the impurity problem of DMFT, we use two different methods. (1) The numerically exact continuous time quantum Monte Carlo method (CTQMC)³¹, a finite temperature approach that relies on the Monte Carlo summation of all diagrams obtained from the expansion of the partition function in powers of the hybridization Δ . This method does not have errors associated with time discretization or bath parametrization and is therefore exact within statistical errors, but computationally expensive. (2) When analytical continuation is an issue for this method, we rely on iterated perturbation theory (IPT), an

approximation method based on an interpolation from second-order perturbation theory for the Anderson impurity problem³². The interpolation preserves the correct high-frequency limit for the self-energy and is exact in both the non-interacting and the atomic limits. For U/t in the intermediate-coupling regime, the condition of Refs. [33] and [18] to fix the bath occupation number leads to accurate results. However, at finite temperature and large U , we need to use the version of IPT that was developed and carefully benchmarked in Ref. [34]. In this approach, IPT- D , one needs double occupancy. At very large U , the simplest estimate for double occupancy suffices. We checked for many observables that CTQMC and IPT in this particular implementation give similar temperature-dependent properties.

B. Thermopower

A general Kubo formula for the thermopower may be written down using linear response theory²⁴ as

$$S(q_x, \omega) = \frac{\chi_{\hat{J}_x(q_x), K(-q_x)}(\omega)}{T \chi_{\hat{J}_x(q_x), \rho(-q_x)}(\omega)}, \quad (1)$$

where the susceptibility of any two operators A, B is given by $\chi_{A,B}(\omega) = i \int_0^\infty dt e^{i\omega t - 0^+ t} \langle [A(t), B(0)] \rangle$ and where $\rho, K = H - \mu\hat{N}$ and \hat{J}_x are the charge density, the (grand canonical) Hamiltonian and the current operator respectively at finite wave vectors. The *fast* limit where $\mathbf{q} \rightarrow 0$ first and then $\omega \rightarrow 0$, is the relevant limit, that we will call S_{Kubo} , for dc transport.³⁵ In other words, the correct procedure is to take the thermodynamic limit first, followed by the dc limit. Taking first the $\mathbf{q} \rightarrow 0$, i.e., thermodynamic limit, allows the energy-level spacing to go to zero when the system is in a metallic state, as is necessary to obtain a finite dc conductivity.

Since the methods of solution for DMFT are formulated in Matsubara frequency, one needs analytical continuation. With methods that do not involve statistical uncertainties, Padé approximants can give meaningful results¹⁸. However, the most accurate modern method to solve the DMFT equations, namely, CTQMC, requires analytical continuation of numerical data that contains statistical uncertainties. In such a case, one usually resorts to maximum entropy methods. However, since the kernel for $\chi_{\hat{J}_x(q_x), K(-q_x)}(\omega)$ is not positive definite, it is not practical to analytically continue directly the response function. Fortunately, in single-site DMFT, the vertex corrections vanish for one-band models,^{36,37} so analytical continuation of single-particle Green's functions and/or self-energies, in principle suffices. Still, analytical continuation is a difficult task even for maximum entropy methods. That is why to compute S_{Kubo} we performed the analytical continuation on the self-energy obtained by IPT- D using the Padé N points algorithm that can be found in Ref. [38]. S_{Kubo} is then calculated using

the real frequency equations¹⁸ given by

$$S = -\frac{k_B \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega}\right) \omega \int d\varepsilon N(\omega, \varepsilon)^2 X(\varepsilon)}{|e|T \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega}\right) \int d\varepsilon N(\omega, \varepsilon)^2 X(\varepsilon)}, \quad (2)$$

where f is the Fermi function, while the so-called transport function $X(\varepsilon)$ is given by

$$X(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}\right)^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (3)$$

and the spectral function is defined by

$$N(\omega, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\omega - (\varepsilon - \mu) - \Sigma(\omega)} \right\}. \quad (4)$$

In Ref [34], we showed that the results obtained for the resistivity were at least qualitatively valid.

Two new approximate methods to compute the thermopower^{24,27} without analytical continuation, namely the *superfast limit* S^* and the Kelvin formula S_{Kelvin} , are explained below. They have the advantage that they do not require analytical continuation. In addition, they have physical content that will help us identify the origin of enhanced thermopower.

Consider first the superfast limit of Eq.(1), $S^* = \lim_{\omega \gg \omega_c} \bar{q} \rightarrow 0 S(q, \omega)$, where ω_c is the largest characteristic frequency in the problem. In the case of the Hubbard model, we would identify $\omega_c = \max\{W, U\}$, where W is the bandwidth. In terms of the thermoelectric operator Φ^{xx} and the stress tensor τ^{xx} that appears in the f-sum rule²⁴, the quantity S^* is equal to $\frac{\langle \Phi^{xx} \rangle}{T \langle \tau^{xx} \rangle}$. Since the Seebeck coefficient is a ratio of transport coefficients where the scattering rate cancels in the relaxation time approximation, it is conceivable that it may have a weak dependence on frequency. It turns out that S^* captures much of the many-body content of the exact S_{Kubo} when the characteristic ω_c is not too large.²⁴ For the Hubbard model, the commutators can be evaluated exactly and the correlation functions evaluated solely in terms of the single-particle Green's function^{28,39}

$$\langle \Phi^{xx} \rangle = \frac{q_e}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, n, \sigma} e^{i\omega_n 0^+} G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \left\{ \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} + \frac{\partial}{\partial k_x} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \right) \right\}, \quad (5)$$

with q_e the (negative) charge of the electron. While one can show that $\lim_{T \rightarrow 0} \langle \Phi^{xx} \rangle = 0$ when $U = 0$, for interacting systems it was found in numerical calculations^{25,26,28} and from Fermi liquid theory that $\lim_{T \rightarrow 0} \langle \Phi^{xx} \rangle \neq 0$ and hence, S^* diverges as T vanishes. Indeed, at large frequency there are reactive parts to the energy transport that should not be considered part of the thermal current. We thus eliminate the constant term $\lim_{T \rightarrow 0} \langle \Phi^{xx} \rangle \equiv \langle \Phi^{xx} \rangle_0$ by fitting the low temperature part of $\langle \Phi^{xx} \rangle$ to

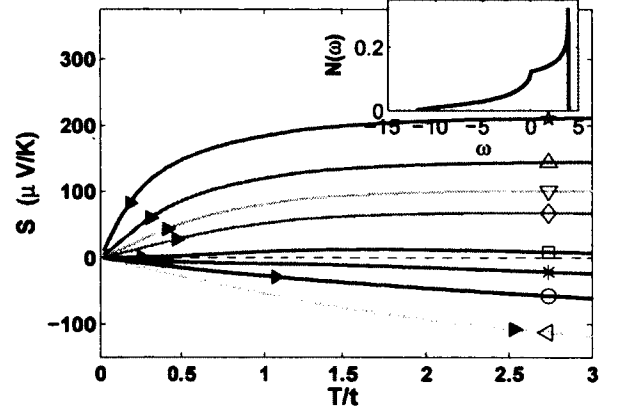


FIGURE 1: (Color online) S in $\mu V/K$ for $U = 0$ as a function of T/t for different values of density : $n = 0.2$ (yellow (\triangleleft)) 0.4 (black (\circ)), 0.6 (blue ($*$)), 0.8 (red (\square)), 1.2 (green (\diamond)), 1.4 (cyan (∇)), 1.6 (magenta (\triangle)) and 1.8 (brown ($*$)).

$\langle \Phi^{xx} \rangle_0 + bT^2$, a functional form derived from the Sommerfeld expansion that empirically remains valid in the presence of strong interactions. We then define the thermopower in the super fast limit by

$$S^{**} = \frac{1}{T} \frac{\langle \Phi^{xx} \rangle - \langle \Phi^{xx} \rangle_0}{\langle \tau^{xx} \rangle}. \quad (6)$$

Not subtracting $\langle \Phi^{xx} \rangle_0$ leads to large deviations between S^{**} (now only S^*) and S_{Kubo} at low T for all dopings, contrary to what we find.²⁸ Note that the stress tensor τ^{xx} is given by

$$\tau^{xx} = q_e^2 \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} n_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (7)$$

where $n_{\mathbf{k}, \sigma}$ is the occupation number for state \mathbf{k}, σ .

The second approximate method considers the slow limit of the general formula for thermopower, Eq. (1). This means that we invert the order by which we are taking the limits in Eq. (1) i.e. the dc first. As noted earlier^{24,27}, this leads to a finite and interesting answer that is termed the Kelvin formula

$$S_{Kelvin} = \lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} S(q, \omega) = \frac{1}{q_e} \left(\frac{\partial s}{\partial n} \right)_{T, V} = -\frac{1}{q_e} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V, n} \quad (8)$$

where s is the entropy density, n is the number density, V is the volume, μ is the chemical potential, k_B is Boltzmann's constant, and where the last form follows from a Maxwell relation. The formulas for S^{**} and S_{Kelvin} approach S_{Kubo} from two different limits.

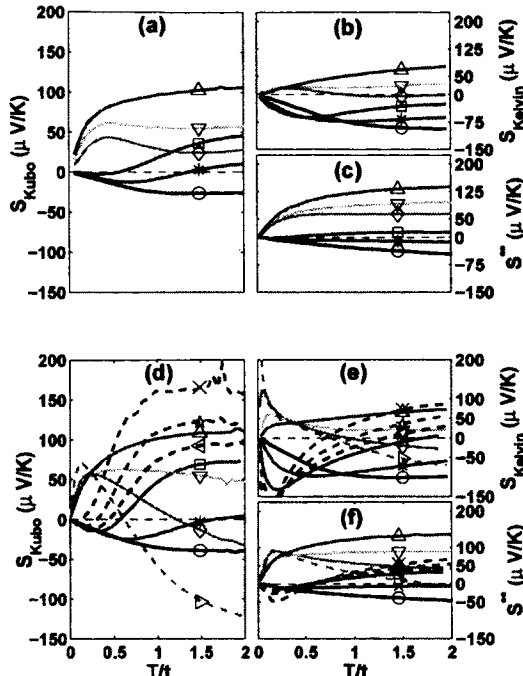


FIGURE 2: (Color online) S_{Kubo} , S_{Kelvin} and S^{**} as a function of T/t as calculated with IPT for Kubo and CTQMC for the Kelvin and high-frequency estimates for two values of interaction $U = 8t$ (a), (b), (c) and $U = 32t$ (d), (e), (f) for different values of density : $n = 0.4$ (black (o)), 0.6 (blue (*)), 0.8 (red (□)), 0.84 (black - - (<)), 0.88 (blue - - (*)), 0.92 (red - - (x)), 1.08 (green - - (>)), 1.2 (green (◇)), 1.4 (cyan (∇)) and 1.6 (magenta (Δ)).

III. RESULTS

A. Band limit

The Seebeck coefficient in the band limit ($U = 0$) and constant relaxation-time approximation is displayed in Fig. 1 along with the non-interacting density of states as an inset. The bare bandwidth is $16t$. The horizontal triangles \blacktriangleright on this plot indicate the temperature T_t , below which the leading term of the Sommerfeld expansion for the $U = 0$ case is 90% of the full answer. The sign and magnitude of the results in Fig. 1 depend mostly on the particle-hole asymmetry ($X(\varepsilon) \neq X(-\varepsilon)$) of the energy-dependent transport function given by Eq. (3), $X(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})$, computed in Ref. [34]. At the qualitative level, the behavior of the thermopower is easy to understand. Below T_t it is linear, the behavior expected from Fermi liquid theory. The low-temperature thermopower changes sign from negative to positive when the Fermi surface turns from electron-like to hole-like at the van Hove singularity in the density of states, located around $n = 0.8$. In the large-temperature limit, the

thermopower saturates to a value of the order of the fundamental unit of thermopower, $k_B/|e| = 86\mu V/K$. As can be seen from the sharp peak in the density of states, the absolute value of S is maximum in the large T limit and for an almost filled band where the largest deviations from particle-hole symmetry occur. This asymmetry comes from the fact that the electronic spectrum for large filling is frustrated : the extrema of the band dispersion for excitations are not at high-symmetry points in the Brillouin zone. This may be understood simply from the electronic spectrum of a single triangle. Any site forms, with any pair of its nearest-neighbors on the fcc lattice, an equilateral triangle. Note that frustration leads to low values of T_t .

B. Weak and strong-coupling limits

Armed with this understanding, we turn to the two interacting cases displayed in Fig. 2. The value $U = 8t$, namely half the bandwidth in Figs. 2(a)-(c), is in the intermediate coupling range whereas $U = 32t$, twice the bandwidth, in Figs. 2 (d)-(f) is representative of strong coupling. These values of U are respectively below and above the Mott transition at half-filling. For each value of U , we evaluate S in three different ways : S_{Kubo} , S_{Kelvin} and S^{**} .

Let us move slowly through the many different results displayed in Fig. 2. In these figures, we do not display the results far away from half-filling, namely, $n = 0.2$ and $n = 1.8$, since they are essentially the same as in the band limit Fig. 1. Indeed, at low density, the carriers (electrons at $n = 0.2$ and holes at $n = 1.8$) can avoid each other and the interaction is not important. Raising the carrier densities, we see that for $n = 0.4$ (black) and $n = 1.6$ (magenta) the results still do not depend much on U . In addition, the results for S_{Kubo} and S^{**} are very close to each other.

As we move closer to half-filling, the thermopower becomes more sensitive to interactions. Let us then first focus on S_{Kubo} Fig. 2(a) at weak to intermediate coupling, $U = 8t$. At densities $n = 0.6$ (blue), $n = 0.8$ (red), $n = 1.2$, (green), and $n = 1.4$ (cyan), the main qualitative changes are a sign change as a function of T for $n = 0.6$ (blue) and $n = 0.8$ (red) and the appearance of a small low-temperature peak for the four fillings. However, the absolute values do not exceed the largest absolute values that can be reached in the band limit by doping.

At strong coupling, $U = 32t$, there are larger deviations from the $U = 0$ results. The system is an insulator at $n = 1$. Upon doping, it develops a large Seebeck coefficient with non-trivial T dependence even below T_t defined in Fig.1. In Fig. 2(d), at the fillings discussed above, $n = 0.6$ (blue), $n = 0.8$ (red), $n = 1.2$ (green), and $n = 1.4$ (cyan), the peaks in S_{Kubo} are more pronounced at large U and there is a sign change at finite temperature even for $n = 1.2$. One finds an extremum at low temperature : for example, for $n = 0.8$ (red),

$S \approx -15\mu V/K$ at $T = 0.3t$, or for $n = 1.2$ (green), $S \approx 57\mu V/K$ at $T = 0.24t$, or for $n = 1.08$ (dashed green), $S \approx 71.23\mu V/K$ at $T = 0.01t$. This represents at least an increase by a factor 3-4 to more than an order of magnitude with respect to the non-interacting case. The appearance of pronounced peaks at low temperature that are absent in the non-interacting limit reflects, as pointed out in Ref. [18], the fact that Fermi liquid coherence is recovered only at very low temperature in the presence of strong correlations.²⁹ The peaks for S are similar to those of the specific heat (see Fig.9 of Ref. [34]) and define T^{coh} , as noted before¹⁸. Since T^{coh} in IPT- D and CTQMC is similar³⁴ the positions of the peaks in S_{Kubo} should be correct. Frustration is a factor that contributes to make the Fermi liquid coherence T low. It also plays a role in the $t - J$ model on the triangular lattice.¹¹ The results also confirm the predictions of Shastry using S^{**} concerning the dependence of the thermopower on the sign of t on a frustrated lattice.

The results very near half-filling, shown by dashed lines in Fig. 2(d) are especially interesting : (a) Large thermopower develops at low temperature above half-filling where there is frustration. (b) The low-temperature slope changes sign near $n = 1$ by contrast with the smaller U results where the sign change occurs near $n = 0.8$. We show in Appendix A that the change of sign of S_{Kubo} at low temperature near $n = 1$ can be confirmed directly from the CTQMC results. From a Fermi liquid point of view this phenomenon reflects the importance of particle-hole asymmetric terms ωT^2 and ω^3 in the scattering rate.¹⁷

IV. OTHER MEASURES OF THERMOPOWER :

Here, we compare $S^{**}(T)$ and $S_{Kelvin}(T)$, respectively in Figs. 2(b) and 2(e) and 2(c) and 2(f) with the corresponding $S_{Kubo}(T)$. The results for $S^{**}(T)$ and $S_{Kelvin}(T)$, obtained directly with CTQMC without analytical continuation, provide both physical understanding and an alternate more straightforward way to estimate the thermopower. For $S^{**}(T)$, results for both $U = 8t$ and $U = 32t$ obtained using IPT give basically the same results as those obtained from CTQMC. Hence they can be considered reliable. For $S_{Kelvin}(T)$ at large $U = 32t$, we obtained the same qualitative behavior of the thermopower but with smaller coherence temperatures for CTQMC, as shown in Appendix B. Above the coherence temperature, even the quantitative differences disappear.

We focus first on the low- T linear regime, which corresponds most of the time to operating conditions. In the spirit of the Boltzmann calculation for $U = 0$ in the constant relaxation-time approximation, we can assume a phenomenological form for S at low T involving two

different Fermi temperature $T_f^{(1)}$ and $T_f^{(2)}$:

$$S \approx Sgn(S) \frac{k_B \pi^2 T}{|q_e| 2 T_f^{(1)}} \left(1 - \left(\frac{T}{T_f^{(2)}} \right)^2 \right). \quad (9)$$

The first Fermi temperature $T_f^{(1)}$ characterizes the linear contribution to the thermopower, the only one at very low temperature. Another way to define the Fermi temperature for a free electron gas is through the higher-order terms of the Sommerfeld expansion. The second Fermi temperature $T_f^{(2)}$ is defined by analogy, as a measure of the temperature at which the first correction to the linear behavior in T of S occurs. This $T_f^{(2)}$ defines a relevant energy scale for S (used to define \tilde{T}_l in Fig. 1) that is non-universal and not simply related to the Fermi energy ε_f , as we might think from a non interacting electron gas with no lattice. Depending on the band structure and filling, $T_f^{(1)}$ and $T_f^{(2)}$ can be very different from each other even at $U = 0$ (see Appendix B of Ref.[40] for more details). We wrote explicitly the sign of the thermopower to be able to define a positive $T_f^{(1)}$.

Figure 3 shows $Sgn(S)/T_f^{(1)}$ as calculated from the Boltzmann non interacting S (solid black line), and for S_{Kubo} (blue squares). The latter is our reference value for finite U . For comparisons, we plot S^{**} (red circles), and S_{Kelvin} (brown diamonds) as well as S_{FL} (green star), the value obtained by assuming that we have a Fermi liquid with a pure ω^2 dependence without deviations from particle-hole symmetry, i.e. the first term of S_{Fermi} in Eq.(A4).¹⁷ The left panel is for $U = 8t$ (a) and the right panel for $U = 32t$ (b). This illustrates two of the important results of this paper, i.e., (1) for weak to intermediate coupling in Fig. 3 (a), S^{**} is a good indicator of the behavior of S . (2) The failing of S_{Kelvin} in that region suggests that the common view of the thermopower as the entropy per particle is not to be taken seriously when the system is coherent. Still, S_{Kelvin} for large U , see Fig. 3(b), predicts the correct sign for the low- T thermopower. Figure 3(b) also shows that $S^{**}(T)$ gives information about the increase of S close to $n = 1$ even if its wrong just below half-filling where the quasiparticles weights become very small while the scattering rates become large³⁴ and particle-hole asymmetric. By comparing the S_{FL} (green star) with S_{Kubo} (blue squares), we finally see that at strong coupling, the effects of the non-quadratic terms of the self-energy on the low- T thermopower are important mostly for $n < 1$.

The fact that S^{**} is less reliable for the Hubbard model at strong coupling, where interaction matters, contrary to the $t - J$ model,¹¹ was expected from the fact that large U makes ω_c , the largest characteristic frequency in the problem, too far from the $\omega = 0$ limit.

Overall then, one finds from the results in Fig. 2 that for weak to intermediate coupling ($U = 8t$), the frequency dependence of the scattering rate is not so important and S^{**} gives a good estimate of the thermopower. On the

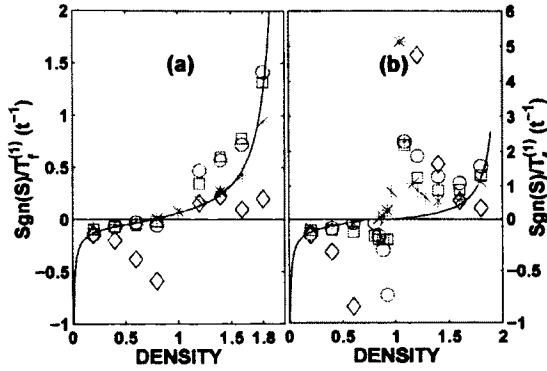


FIGURE 3: (Color online) $Sgn(S)/T_f^{(1)}$ for $U = 8t$ (a) and $U = 32t$ (b) as a function of the density. The Boltzmann non-interacting value is given by the black solid line, S_{Kubo} (blue \square), S_{Fermi} with only the first term (green $*$), S_{Kelvin} (brown \diamond) and S^{**} (red \circ).

other hand, for strong coupling ($U = 32t$) the situation is more complicated. At low T , where single-site DMFT gives a Fermi liquid regime, S^{**} seems to give a good estimate when the carrier density is not too close to half-filling where interactions effects become important. By contrast, when Fermi liquid behavior is present S_{Kelvin} is not reliable at low temperature and strong coupling. At high T however, S_{Kelvin} gives qualitatively correct results,⁴¹ accounting for the fact that the temperatures where the thermopower changes sign are off. This demonstrates, through Eq. (8), that in the strong coupling incoherent regime, entropy drives the thermopower. The relationship between entropy and thermopower has been discussed in the linear low-temperature regime and multiband systems experimentally^{42–44} and theoretically⁴⁵.

Let us come back to the high-temperature regime, $U \gg T \gg t$. In this limit, the so-called Mott-Heikes formula also suggests a relationship between the entropy per particle and thermopower. Heike's formula, $S \rightarrow \mu/T = (\partial s/\partial n)_{E,V}$ is derived by applying the atomic limit to the case of large U . The thermopower in this case depends only on density since μ/T is T independent. It is given by³

$$S_{MH} = \begin{cases} -\frac{k_B}{|e|} \ln \left(\frac{2(1-n)}{n} \right) & \text{if } 0 \leq n \leq 1, \\ \frac{k_B}{|e|} \ln \left(\frac{2(n-1)}{2-n} \right) & \text{if } 1 \leq n \leq 2. \end{cases} \quad (10)$$

One striking prediction of these formula is a change of sign of the thermopower at 1/3 doping from half-filling. None of our results in Fig. 2 are in the regime where μ/T is T independent³⁴. It is quite remarkable then that for temperatures between $T = t$ and $T = 2t$, we nevertheless have more than one sign change as a function of density for a fixed T , when $U = 32t$.

Even though $S_{Kelvin} = S_{MH}$ in the regime where μ/T is T independent, when T is not high enough for this condition to be realized, as in our case, S_{Kelvin} makes

a stronger case than Heike's formula. Indeed, $S_{Kelvin} = 1/q_e(\partial s/\partial n)_{T,V}$ relies on the correctness of interchanging the order of two limits, which can become justified in the incoherent regime⁴⁶. It was checked explicitly in Ref. [41] that Kelvin's formula is better than a modified Heike's formula, $-1/q_e(\mu(T) - \mu(0))/T$. To illustrate what happens in our case, we show in Fig. 4 the thermopower as a function of density for $T = 2t$ and $U = 32t$ for S_{Kubo} , S_{Kelvin} , S^{**} and compare with S_{MH} in Eq. (10). For densities above about $n = 0.8$, our Kubo results match quite well with Heike's. For large doping, S^{**} works better than S_{Kelvin} or S_{MH} , which is another indication that large interaction effects are necessary for S_{Kelvin} or S_{MH} to be good approximations. Despite their simplicity, we see that the latter two formulas capture the essence of the thermopower in the high temperature regime. Note that the quantitative results are a bit off, especially for $n < 0.8$ where the absence of electronic frustration seems to leave more room for coherence. At this particular temperature, Heike's formula seems to be somewhat better overall than Kelvin's. However, in the presence of electronic frustration at $n > 1$, Heike's formula shows a small systematic deviation from Kubo's that does not appear for S_{Kelvin} .

Chakraborty *et al.*⁴⁷ studied the case of a square lattice with nearest-neighbor hopping at large $U = 20t$ for $T = 0.5t$ in the incoherent regime. $U = 40t$ and $T = t$ would be more comparable to our case given that the bandwidth of the fcc lattice is twice as large as that of the square lattice for the same t . They solved the problem using CDMFT with NCA as an impurity solver. They did the calculation for densities between $n = 0.6$ and $n = 1$ and found, like we do, that Kubo's result is quite close to Heike's. A more thorough investigation of the high-temperature regime is called for.

V. SUMMARY

We have shown that from weak to intermediate coupling, the thermopower of the fcc lattice is not influenced very much by interactions. The quantity S^{**} , that neglects the frequency dependence of the scattering rate, can be a reliable estimator for the thermopower. By contrast, at strong coupling, namely when at $n = 1$ the system is a Mott insulator, sharp peaks in the T dependence of Seebeck coefficient appear at low temperature and, for the range of dopings considered, absolute values comparable to $k_B/|e|$, close to hundreds of micro volts per Kelvin, can be obtained. We found a sharp increase of the thermopower at a given T when one approaches $n = 1$. The increase is particularly sharp for $n > 1$ where there is strong electronic frustration. We leave open the question of whether there is an optimal doping or just a sudden jump from very large thermopower at infinitesimal doping to zero at half-filling. For doped Mott insulators in the incoherent large-temperature limit close to half-filling, the Kelvin formula gives a reasonable esti-

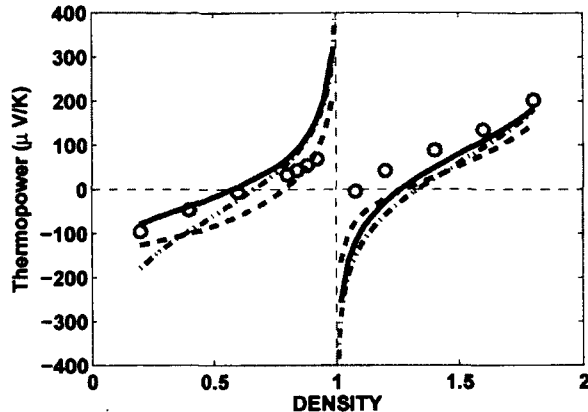


FIGURE 4: (Color online) S_{Kubo} (black), S_{Kelvin} (blue dashed), S_{MH} (red dashed-dot) and S^{**} (magenta \circ CTQMC) in micro volts per Kelvin for $U = 32t$ as a function of density for $T = 2t$. In order to calculate S_{Kelvin} we used IPT results. As shown in Fig. 5, in this temperature range, IPT- D gives essentially the same $\mu(T)$ as CTQMC.

mate of the thermopower without the need for analytical continuation. This clearly shows that large thermopower in this case can be explained on entropic grounds. Very far from half-filling, one recovers a more conventional behavior where S^{**} gives a good estimate of the thermopower.

It would be of great interest to verify how S_{Kelvin} behaves at low T and large U when non-Fermi liquid behavior is observable. For this, one needs to consider lower-dimensional systems that require going beyond single-site DMFT. Also, addition of disorder through CPA⁴⁸ or statistical DMFT⁴⁹ would be of interest to verify how S^{**} and S_{Kelvin} inform us about the interplay between correlations and disorder.

Note added. Recently, related results regarding the thermopower were independently reported.⁵⁰

Acknowledgments

We acknowledge S.R. Hassan for help and discussion at the beginning stage of this work, J. Freericks, G. Kotliar, P. Phillips and W. Xu for discussions. We are grateful to Antoine Georges for sharing his insights with us before publication. A.-M.S.T and B.S.S. thank the Aspen Center for Physics where this collaboration began. B.S.S. was supported at UCSC by DOE under Grant No. FG02-06ER46319. We acknowledge support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) (L.-F.A. and A.-M.S.T), and by the Tier I Canada Research Chair Program (A.-M.S.T.). Computational resources were provided by CFI, MELS, the RQCHP

and Compute Canada.

Annexe A: SIGN CHANGE OF THE THERMOPOWER AROUND $n = 1$ FOR $U = 32t$

Since the calculation of S_{Kubo} rests on IPT- D , we need to verify that the change of sign of the low temperature slope around $n = 1$ is not an artefact of the method. We present three arguments. First, we show that it is possible to obtain the change of sign purely from CTQMC results. Although analytical continuation for CTQMC is nearly impossible for such a large U , there is a way to check the sign of the thermopower directly from the behavior in Matsubara frequency. Following Ref. [51] we define the function

$$\gamma_{ij}(\Omega_n) \equiv \frac{\chi_{ij}(0) - \chi_{ij}(i\Omega_n)}{\Omega_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\Omega_n}{\omega^2 + \Omega_n^2} L_{ij}(\omega). \quad (A1)$$

In Eq. (A1), i and j can take the value 1 or 2. χ_{11} is the charge-charge, χ_{12} is the charge-heat and χ_{22} is the heat-heat susceptibilities. The sign of the thermopower is thus given by the sign of $L_{12}(0)$. In terms of the γ_{ij} function, we can show that

$$L_{ij}(0) = \lim_{\Omega_n \rightarrow 0} \gamma_{ij}(\Omega_n). \quad (A2)$$

If we replace the discrete variable Ω_n by a continuous variable z , Eq. (A2) would correspond to

$$\lim_{\Omega_n \rightarrow 0} \gamma_{ij}(\Omega_n) \rightarrow \lim_{z \rightarrow 0} \gamma_{ij}(z) = -\chi'_{ij}(z) \Big|_{z \rightarrow 0}. \quad (A3)$$

Thus the dc value would be given by the slope at the origin. The problem is to find the correct continuous function since the value of the derivative will depend strongly on the function. But for the sign there is no such problem. Direct inspection of the Ω_n dependence indicates what is the sign of the derivative and thus the sign of the thermopower. To verify again this result, we also calculated the susceptibility χ_{12} by the same method we used for χ_{11} in Ref. [34] but using results obtained via CTQMC. We find that, indeed, at $U = 32t$, the low-temperature thermopower changes sign around half-filling rather than around the small U result $n = 0.80$. Finally, we can also use just a few Matsubara frequencies to obtain the self-energy near zero frequency from Padé approximants and use it to calculate $L_{12}(0)$. The sign should be correct even though the actual value cannot be trusted. Once again we obtain that the sign change occurs around half-filling if we use 5, 10, or 20 Matsubara frequencies. We are thus confident that the IPT- D results for S_{Kubo} are at least qualitatively significant.

The sign change and its relation to the underlying Fermi liquid predicted by DMFT can also be understood analytically. Starting from an ω^2 self-energy, Refs. [12, 17], demonstrated that the thermopower only depends on interaction through Z , the quasiparticle weight. Hence, at

first sight the sign seems determined solely by the non-interacting problem, namely by the sign of the derivative of the transport function Eq. (3). However, when one considers the particle-hole asymmetry of the quasiparticle lifetime by including ωT^2 and ω^3 terms in the self-energy¹⁷, the thermopower is given by

$$S_{Fermi} = -\frac{k_B k_B T}{|e| Z} \left[\frac{\phi'(\bar{\mu}) E_2^1}{\phi(\bar{\mu}) E_0^1} - \frac{a_1 E_4^2 + a_2 E_2^2}{\gamma_0 E_0^1} \right], \quad (\text{A4})$$

where $\bar{\mu} = \mu - \text{Re}\{\Sigma(0)\}$, the E 's are universal constants while a_1 , a_2 and γ_0 are fitting parameters for the different powers of the self-energy and thus have an interaction dependence. Recent strong coupling theories⁵² provide an analytical understanding of the odd frequency contributions to the quasiparticle lifetimes, which become prominent as the particle density increases towards half filling. These provide dynamical asymmetry and significantly influence the ARPES line shapes. From Eq. (A4), we see that the asymmetry in the lifetime creates a term that might compete for the sign and magnitude of the thermopower. This is what is happening in our case. Below half-filling but above $n = 0.8$, the band results would be positive but the interacting part leads to a strong particle-hole asymmetry that competes and keeps S_{Kubo}

negative. This compensation leads to a small thermopower between $n = 0.8$ and $n = 1$. However, above half-filling, either both contributions are of the same sign and enable an increase in the thermopower or the second contribution is negligible. The asymmetry in the scattering rate also plays an important role in the temperature dependence of the thermopower, as shown in Ref.[41].

Annexe B: S_{Kelvin} AT $U = 32t$

The only quantity that does not require analytical continuation and depends on the method of calculation, i.e. IPT- D vs CTQMC, is S_{Kelvin} at strong coupling. The comparisons are made in Fig. 5. Lines with the same color are obtained for the same filling. There are dots when they are obtained from CTQMC. The main quantitative difference is that the coherence temperatures (peaks) are smaller with CTQMC and closer to the ones predicted by S_{Kubo} and C_n even if those two quantities were obtained with IPT- D . This quantitative difference does not prevent qualitative comparisons. For T larger than the peaks, then even the quantitative differences disappear.

-
- ¹ I. Terasaki, Y.Sasago and K. Uchinokura, Phys. Rev. B **56**, R12685 (1997).
² S. Mukerjee and J.E. Moore, Appl. Phys. Lett. **90**, 112107 (2007).
³ P. Chaikin and G. Beni, Phys. Rev. B **13**, 647 (1976).
⁴ S. Mukerjee, Phys. Rev. B **72**, 195109 (2005).
⁵ A. Bentien, S. Johnsen, G. K. H. Madsen, B. B. Iversen and F. Steglich, Euro. Phys. Letts. **80**, 17008 (2007)
⁶ P. Sun, M. Søndergaard, B. B. Iversen and F. Steglich, Ann. Phys. (Berlin) **523**, 612 (2011).
⁷ Jan M. Tomczak, K. Haule, T. Miyake, A. Georges, and G. Kotliar, Phys. Rev. B **82**, 085104 (2010).
⁸ G.D. Mahan and J.O. Sofo, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **93**, 7436 (1996).
⁹ M. J. Rozenberg, G. Kotliar and H. Kajueter, Phys. Rev. B **54**, 8452 (1996).
¹⁰ N. E. Sluchanko, V. V. Glushkov, S. V. Demishev, M. V. Kondrin, K.M. Petukhov, N. A. Samarin, V. V. Moshchalkov and A. A. Menovsky, Europhys. Lett. **51**, 557 (2000).
¹¹ J. O. Haerter, M. R. Peterson and B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **97**, 226402 (2006).
¹² G. Palsson and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **80**, 4775 (1998).
¹³ V. S. Oudovenko and G. Kotliar, Phys. Rev. B **65**, 075102 (2002).
¹⁴ C. Grenzbach, F. B. Anders, and G. Czycholl, Physica B **378-380**, 690 (2006).
¹⁵ H. Schweitzer and G. Czycholl Phys. Rev. Lett. **67**, 3724 (1991).
¹⁶ Th. Pruschke, M. Jarrell, and J.K. Freericks, Adv. Phys. **44** 187 (1995).
¹⁷ K. Haule and G. Kotliar, Properties and Applications of Thermoelectric Materials, edited by V. Zlatić and A. C. Hewson, (Springer, New York, 2009). p. 119.
¹⁸ J. Merino, and R.H. McKenzie, Phys. Rev. B **61**, 7996 (2000).
¹⁹ V. S. Oudovenko, G. Palsson, K. Haule, G. Kotliar, and S. Y. Savrasov, Phys. Rev. B **73**, 035120 (2006).
²⁰ K. Held, R. Arita, V. I. Anisimov, and K. Kuroki, Properties and Applications of Thermoelectric Materials, NATO Science for Peace and Security, Series B : Physics and Biophysics (Springer, Netherlands, 2009), pp. 141–157.
²¹ R. Arita, K. Kuroki, K. Held, A. V. Lukoyanov, S. Skornyakov, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **78**, 115121 (2008).
²² P. Wissgott, A. Toschi, G. Sangiovanni and K. Held, Phys. Rev. B **84**, 085129 (2011).
²³ P. Wissgott, A. Toschi, H. Usui, K. Kuroki and K. Held, Phys. Rev. B **82**, 201106(R) (2010).
²⁴ B. S. Sriram Shastry, Rep. Prog. Phys. **72** 016501 (2009).
²⁵ M. R. Peterson, S. Mukerjee, B. S. Shastry and J. O. Haerter, Phys. Rev. B **76**, 125110 (2007).
²⁶ M. R. Peterson, B. S. Shastry and J. O. Haerter, Phys. Rev. B **76**, 165118 (2007).
²⁷ M. R. Peterson and B. S. Shastry, Phys. Rev. B **82**, 195105 (2010).
²⁸ W. Xu, C. Weber and G. Kotliar, Phys. Rev. B **84** 035114 (2011).
²⁹ W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Letts. **62**, 324 (1989); A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
³⁰ G. Kotliar, S.Y. Savrasov, K. Haule, V.S. Oudovenko, O. Parcollet, C.A. Marianetti, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).
³¹ P. Werner, A. Comanac, L. de Medici, M. Troyer, and A.

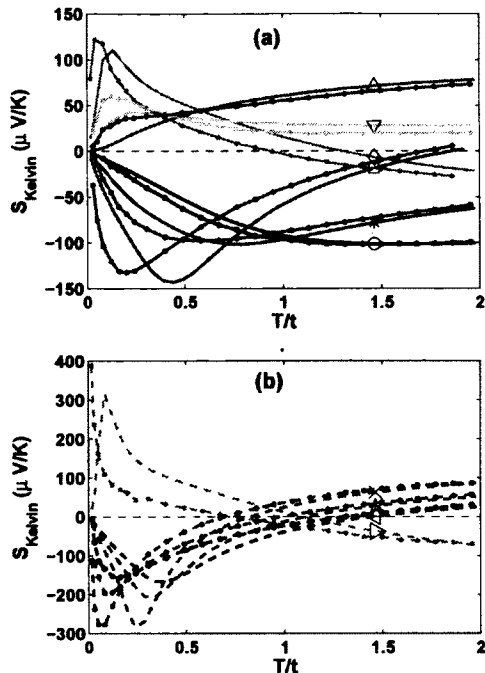


FIGURE 5: (Color online) S_{Kelvin} as a function of T/t as calculated with IPT (-) and CTQMC (-.) for $U = 32t$. In (a) values of filling farther away from $n = 1$ and (b) fillings closest to $n = 1$: $n = 0.4$ (black (o)), 0.6 (blue (*)), 0.8 (red (\square)), 0.84 (black - - (\triangleleft)), 0.88 (blue - - (*)), 0.92 (red - - (\times)), 1.08 (green - - (\triangleright)) 1.2 (green (\diamond)), 1.4 (cyan (∇)) and 1.6 (magenta (Δ)).

J. Millis, Phys. Rev. Lett. **97**, 076405 (2006).

³² H. Kajueter and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **77**, 131 (1996).

- ³³ A. Martin-Rodero, F. Flores, M. Baldo, and R. Pucci, Solid State Commun. **44**, 911 (1986).
- ³⁴ L.-F. Arsenault, P. Sémon and A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **86**, 085133 (2012).
- ³⁵ J. M. Luttinger, Phys. Rev. **135**, A 1505 (1964), Phys. Rev. **136**, A1481 (1964).
- ³⁶ J. K. Freericks, and V. Zlatić, Phys. Rev. B **64**, 245118 (2001).
- ³⁷ I. Paul and G. Kotliar, Phys. Rev. B **67**, 115131 (2003).
- ³⁸ H. J. Vidberg, and J. W. Serene, Jour. of Low Temp. Phys. **29**, 179 (1977).
- ³⁹ B. Sriram Shastry, Aspen Center for Physics, Summer Program (2008); Lecture on correlated thermoelectrics (unpublished) (2008).
- ⁴⁰ L.-F. Arsenault, PHD thesis, Université de Sherbrooke (unpublished) (2013).
- ⁴¹ A. Georges, Lecture Notes, Collège de France, June 2012 (unpublished).
- ⁴² J. Sakurai, in *Transport and Thermal Properties of f-electron Systems*, edited by H. Fujii, T. Fujita, and G. Oomi (Plenum, New York, 1993), p. 165.
- ⁴³ K. Behnia, D. Jaccard, and J. Flouquet, J. Phys. : Condens. Matter **16**, 5187 (2004)
- ⁴⁴ J. Sakurai and Y. Isikawa, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1926 (2005)
- ⁴⁵ V. Zlatić, R. Monnier, J.K. Freericks, and K.W. Becker, Phys. Rev. B **76**, 085122 (2007)
- ⁴⁶ G. Kotliar, private communication.
- ⁴⁷ Shiladitya Chakraborty, Dimitrios Galanakis and Philip Phillips, Phys. Rev. B **82**, 214503 (2010).
- ⁴⁸ P. Soven, Phys. Rev. **156**, 809 (1967); B. Velicky, S. Kirkpatrick, and H. Ehrenreich, Phys. Rev. **175**, 747 (1968).
- ⁴⁹ V. Dobrosavljevic and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **78**, 3943 (1997); Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A **356**, 57 (1998); E. Miranda and V. Dobrosavljevic, Rep. Prog. Phys. **68**, 2337 (2005).
- ⁵⁰ Xiaoyu Deng, Jernej Mravlje, Rok Zitko, Michel Ferrero, Gabriel Kotliar, and Antoine Georges, arXiv :1210.1769
- ⁵¹ O. Gunnarsson, M. W. Haverkort, and G. Sangiovanni, Phys. Rev. B **82**, 165125 (2010).
- ⁵² B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **109**, 067004 (2012).

Chapitre 4

Compléments aux résultats de l'article du Chapitre 3

4.1 Pouvoir thermoélectrique : résumé pour un expérimentateur à la recherche de grands S

Un des messages du Chapitre 3 est qu'il existe trois régimes importants en fonction du remplissage et de la température.

Le premier est pour des températures assez basses où, pour n'importe quel remplissage, le système est dans un état cohérent (quasi-particules bien définies au potentiel chimique) caractérisé par un pouvoir thermoélectrique linéaire en température. Cela apparaît à basse température, en-dessous de $T < 0.1t$ pour des densités pas trop près du demi-remplissage et pour des T beaucoup plus petites pour des petits dopages. Dans ce cas, les valeurs du pouvoir thermoélectrique suivent les carrés bleus sur la Fig.3-(b) du Chapitre 3. Pour des densités moindres que demi-remplissage, le pouvoir thermoélectrique à ces températures est petit et plutôt constant en fonction de la densité. Au-dessus du demi-remplissage, pour le cas petit dopage, nous trouvons des valeurs entre 50 et 100 $\mu V/K$.

Quand nous augmentons la température, les densités près du demi-remplissage atteignent le régime incohérent (les quasi-particules et la bande de Hubbard cessent d'être des entités séparées) alors que celles plus éloignées sont toujours dans le régime cohérent.

Cela est montré à la Fig. 4.1 pour $T = 0.1t$ (noir) et $0.25t$ (bleu). En-dessous du demi-remplissage, pour la plupart des densités, le pouvoir thermoélectrique est petit et constant. Mais, autour du demi-remplissage, à la fois au-dessus et au-dessous, les valeurs et les signes peuvent être différents puisque le système est incohérent là et nous pouvons obtenir un grand S . Parce qu'il est très ardu de trouver lesquelles des densités et températures doivent être choisies, il est très difficile de travailler avec ce genre de régime de température. Cela demande un réglage assez minutieux pour qu'il soit compliqué d'imaginer avoir un échantillon expérimental avec les bons paramètres.

Pour des températures loin dans le régime incohérent, Fig. 4.1 pour $T = t$ (rouge) et $2t$ (magenta), nous avons le comportement typique des trois changements de signe en fonction de la densité. Nous voyons clairement que pour le cas faiblement dopé, le pouvoir thermoélectrique est bien estimé par l'expression de la limite atomique (courbe noire points-tirets .-), une expression qui ne dépend pas de la forme particulière du réseau étudié. De grandes valeurs de S sont obtenues et sont maximisées dans ce régime de T de $t \leq T \leq 2t$. C'est la limite où $t < T \ll U$. Pour des T supérieures, le S maximal va diminuer puisque le système commence à aller vers l'autre limite où $t \ll U \ll T$ pour laquelle S est plus petit. L'expression pour la limite atomique pour une T et un U arbitraire est donnée dans [61] et [62] et est $S_{atomique} = -\frac{k_B}{|e|} \left(\frac{\beta U e^{2\beta\mu}}{e^{\beta U} + e^{2\beta\mu}} - \beta\mu \right)$ avec μ le potentiel chimique pour le modèle de Hubbard dans la limite atomique ($t = 0$). À proprement parler, cette expression est pour le cas 1d et d'ordre $O(t^2)$, mais devrait s'appliquer en dimensions supérieures aussi longtemps que $t \rightarrow 0$.

Comme montré à la Figs. 4.2 et 4.3, l'augmentation de S proche du demi-remplissage dans nos calculs provient de la proximité de l'isolant de Mott i.e. la divergence de $1/L_{11}$. Dans une étude récente, Zlatic et Freericks [63] ont trouvé de très bonnes propriétés thermiques pour des isolants de Mott légèrement dopés à basse T . Cependant, leur état basse T est très différent du nôtre puisque le modèle de Falikov-Kimball qu'ils ont utilisé n'a pas d'état similaire à celui d'un liquide de Fermi à basse T .

Il semble que le couplage d'une forte interaction de Coulomb avec du désordre pourrait aider pour trouver de grandes valeurs de S comme obtenu dans [64] et [65]. Dans le présent travail, seulement l'interaction $e - e$ a été considérée.

4.2 Précision sur la transition cohérence-incohérence

Suite à la soumission de travaux récents de Xiaoyu Deng, Jernej Mravlje, Rok Zitko, Michel Ferrero, Gabriel Kotliar et Antoine Georges [66], il est important de discuter plus en détail la nature de ce que nous avons appelé température de cohérence T^{coh} . Dans notre cas, elle correspond à la température à laquelle le pouvoir thermoélectrique a un extremum. Les comportements de type liquide de Fermi, c'est-à-dire avec notre définition du Chapitre 3, un pouvoir thermoélectrique linéaire en température, sont observés pour des températures plus basses qu'environ $T = Zt$ (voir Fig.2-(d) du Chapitre 3) où Z est le poids de quasi-particules apparaissant à la Fig. 3 du chapitre 2. Par contre, pour Deng *et al.* [66], le liquide de Fermi est seulement défini comme étant le cas pour lequel la partie imaginaire de la *self-energy* est quadratique en fréquence et en température. Cette température est atteinte ($T/D \approx 0.01$ où D est la demie largeur de bande) dans leur cas bien avant que la linéarité disparaisse dans S à plus haute température ($T/D \approx 0.03$) (voir leur Figure 4). Notre température T^{coh} correspond plutôt à ce qu'ils appellent T_* dans [66] (voir aussi [67] pour des courbes de S à d'autres dopages). Finalement, ils définissent une température T_{MIR} à partir de laquelle la résistivité dépasse la valeur de Mott-Ioffe-Regel. L'état incohérent est considéré comme étant celui au-delà de T_{MIR} , où aucune quasi-particule ne pourra être trouvée. La physique dans cette région est entièrement celle de particules dans l'espace réel. Le transport pour $T < T_{MIR}$ serait dominé par les quasi-particules. Ils définissent la présence de quasi-particules comme la situation où la densité spectrale $A(k, \omega)$ présente des pics bien définis autour du niveau de Fermi, en plus d'une bande de Hubbard inférieure et supérieure. Cette température est pour eux bien plus grande que la température pour laquelle le pouvoir thermoélectrique a un extremum.

Selon notre définition de la limite de Mott-Ioffe-Regel dans le Chapitre 2 ($\rho \sim \hbar a/e^2$), celle-ci est obtenue pour des températures de l'ordre de notre T^{coh} dans notre cas (voir Figure 11 du Chapitre 2), contrairement à [66] qui ont une définition un peu différente et atteignent cette température à $T_{MIR} > T_* = T^{coh}$. Mais cette limite de Mott-Ioffe-Regel n'est pas définie parfaitement rigoureusement. Notre définition de T^{coh} correspond aussi avec la région où le pic de transition entre la bande de Hubbard et le pic de quasi-particule disparaît dans la conductivité optique (voir Figure 12 du Chapitre 2). Il est donc important de regarder de plus près la situation de la définition de la transition cohérence-incohérence. Selon la Figure 2 de [66], la température pour laquelle le pouvoir

thermoélectrique atteint un extremum correspond à la région de températures pour laquelle il cesse d'y avoir une claire séparation entre le pic autour de $\omega = 0$ et la bande de Hubbard dans la densité d'états. Cela va aussi évidemment correspondre à la situation où le pic de transition disparaît dans la conductivité optique.

Vérifions que c'est bien ce qui arrive dans notre cas. À la Fig. 4.4, nous présentons la densité d'états pour plusieurs températures pour le cas $U = 32t$ et $n = 0.80$. Nous voyons bien que $T^{coh} \sim 0.5t$ indique la région de température à partir de laquelle la séparation entre le pic autour de $\omega = 0$ et la bande de Hubbard commence à disparaître.

Pour mieux comprendre ce que cela signifie, nous présentons à la Fig. 4.5 la fonction spectrale pour différentes valeurs de ε_k pour plusieurs températures dans le cas $U = 32t$ et $n = 0.80$. Les lignes pointillées rouges correspondent à $\pm 5T$, des valeurs de ω pour lesquelles $\frac{\partial f}{\partial \omega}$ a perdu environ 97% de sa valeur maximale à $\omega = 0$. Ainsi, le transport est dominé par les excitations à l'intérieur de cette fenêtre. Le message de la Fig. 4.5 est clair, l'extremum dans le pouvoir thermoélectrique indique le début la région où le transfert de poids spectral a pour conséquence de faire disparaître la différence entre la bande de Hubbard et les pics de quasi-particule. Il devient alors de plus en plus impossible pour $\omega < 0$ de définir une distinction objective entre ce qui était avant les états de la bande de Hubbard et ceux du pic de quasi-particule. De plus, la zone de fréquences visitée par $\frac{\partial f}{\partial \omega}$ inclut de plus en plus ces deux régions auparavant bien séparées et où seule celle des quasi-particules contribuait au transport. Dans le cas du pouvoir thermoélectrique autour du demi-remplissage, le transfert de poids spectral vers les fréquences plus négatives dans le cas $n < 1$ et vers celles plus positives dans le cas $n > 1$ est ce qui va éventuellement provoquer le changement de signe de S pour une température plus grande que T^{coh} . Comme nous pouvons le voir sur la Fig.2 du Chapitre 3, la proximité de cette température avec T^{coh} dépend fortement de n . Pour bien voir l'effet de ce transfert, nous présentons à la Fig. 4.6 la fonction que nous définissons comme $S(\varepsilon, \omega) \equiv \omega X(\varepsilon) A^2(\varepsilon, \omega)$ qui, si nous la comparons avec la définition de l'Eq.(1.135), peut être considérée comme un type de fonction spectrale de L_{12} permettant de mieux comprendre le changement de signe (il ne faut pas oublier la définition de S qui contient un signe moins explicite $S = -(k_B/|e|)1/k_B T L_{12}/L_{11}$). Cette fois-ci encore, les lignes pointillées rouges correspondent à $\pm 5T$.

Dans notre cas, la température maximale que nous avons étudiée pour S dans le Chapitre 3 ne correspond pas à la situation totalement incohérente comme définie dans [66], comme nous le voyons en comparant la Fig. 4.5 à $T = 1.949t$ à la Fig.2-(b) pour $T = D$ dans [66]. Par contre, pour cette température $T = 1.949t$, le comportement du potentiel chimique (Fig.7 du Chapitre 2) est le même que celui à la température $T_{MIR} = 0.4D$ de [66](voir [67] pour $\mu(T)$), mais le comportement incohérent à la Heike est quand même observé. En effet, selon la Fig.4 du Chapitre 3, à partir d'environ $n = 0.8$, le pouvoir thermoélectrique suit bien le comportement de particules dans l'espace réel au lieu de celui d'objets bien définis dans l'espace k .

Notre définition de la transition cohérence-incohérence est donc la température T^{coh} indiquant la région où la bande de Hubbard et le pic de quasi-particule sont en train de fusionner pour devenir indiscernables, même s'il est quand même possible de définir des états plus ou moins définis dans l'espace k , ce qui correspond à T_* dans [66].

La situation du métal corrélé est beaucoup moins extrême que celle de l'isolant de Mott dopé. Il existe aussi un certain transfert de poids spectral à mesure que la température est augmentée, mais celui-ci est beaucoup moins dramatique. Le changement de signe de T en fonction de la température vient surtout de l'élargissement de la fenêtre de fréquences pour laquelle les états contribuent au transport. Cela a pour conséquence qu'à $T = 2t$, le comportement de S n'est jamais celui à la Heike comme nous pouvons le voir à la Fig.4.7 où nous comparons le comportement à $U = 8t$ et celui à $U = 32t$. La transition vers l'isolant de Mott dopé a des conséquences à la fois sur L_{11} et L_{12} (rappelons-nous que $S = \frac{1}{q_e T} \frac{L_{12}}{L_{11}}$). Le changement dans L_{11} est spectaculaire. En effet, à $U = 32t$ et $n = 1$, nous avons un isolant de Mott avec une bande interdite de l'ordre de $U/2$ et donc, une température de $T = 2t$, est loin d'être suffisante pour permettre l'excitation thermique de porteurs entre les deux bandes de Hubbard. Nous comparons $1/L_{11}$ pour $U = 8t$ et $U = 32t$ à la Fig.4.8. Pour ce qui est de L_{12} , l'effet de la physique de Mott n'est pas dans un changement important des valeurs absolues, mais bien par un changement de signe à demi-remplissage, ce qui est un effet drastique. Cela est montré à la Fig.4.9.

Finalement, si nous comparons le comportement de S présenté à la Fig.4 du Chapitre 3 et celui pour les cuprates à 290K, il semble bien que le cas des cuprates soit similaire. En effet, la Fig. 1 montre que lorsque nous nous éloignons de l'isolant de Mott, S devient

linéaire avant de changer de signe pour un dopage encore un peu plus élevé. C'est ce type de comportement que nous retrouvons pour S_{Kubo} de la Fig.4 du Chapitre 3. Ainsi, dans le cas des cuprates, il semblerait qu'à la température de la pièce, pour des dopages jusqu'à environ 21%, le système est dans un état où il n'y a plus de distinctions claires entre bande de Hubbard et quasi-particules. Pour des dopages plus élevés, la température de la pièce n'est pas suffisamment élevée et ce sont des quasi-particules bien définies qui sont responsables du transport.

4.3 Retour sur l'importance de l'asymétrie à basse température

Pour terminer ce chapitre, nous allons offrir un complément d'information sur l'effet de l'asymétrie à plus basse température, soit dans le régime linéaire de S en bas de $T \approx Zt$, une température un peu plus petite que T^{coh} . Comme nous l'avons discuté dans le Chapitre 3, les corrections en ωT et ω^3 la *self-energy* ont un effet fondamental sur la pente de S à basse T . Pour bien montrer la présence de cette asymétrie et donc son influence sur le transport, nous traçons à la Fig.4.10 la partie imaginaire de la *self-energy* divisée par T^2 en fonction de $\frac{\omega}{T}$ et ce, pour plusieurs températures différentes. Ce choix de la variable indépendante sert à bien illustrer la fenêtre de fréquence importante pour le transport (à $\omega = \pm 5T$, $\partial f / \partial \omega$ a perdu 97 % de sa valeur). Si la *self-energy* présente une asymétrie visible dans cette plage de fréquence, le pouvoir thermoélectrique sera affecté. Nous voyons bien que même à la plus basse température que nous avons $\beta = 50/t$ (ou en unités de demi-largeur de bande souvent utilisées pour les réseaux symétriques, $\beta = 400/D$), la *self-energy* présente une asymétrie claire. Il est très difficile d'aller à plus basse température avec la DMFT.

Il est important et intéressant de noter que ces effets importants, à la fois à haute et basse température sont induits sans qu'il n'y est de reconstruction de la surface de Fermi puisque qu'en DMFT un site, la *self-energy* ne dépend pas de k .

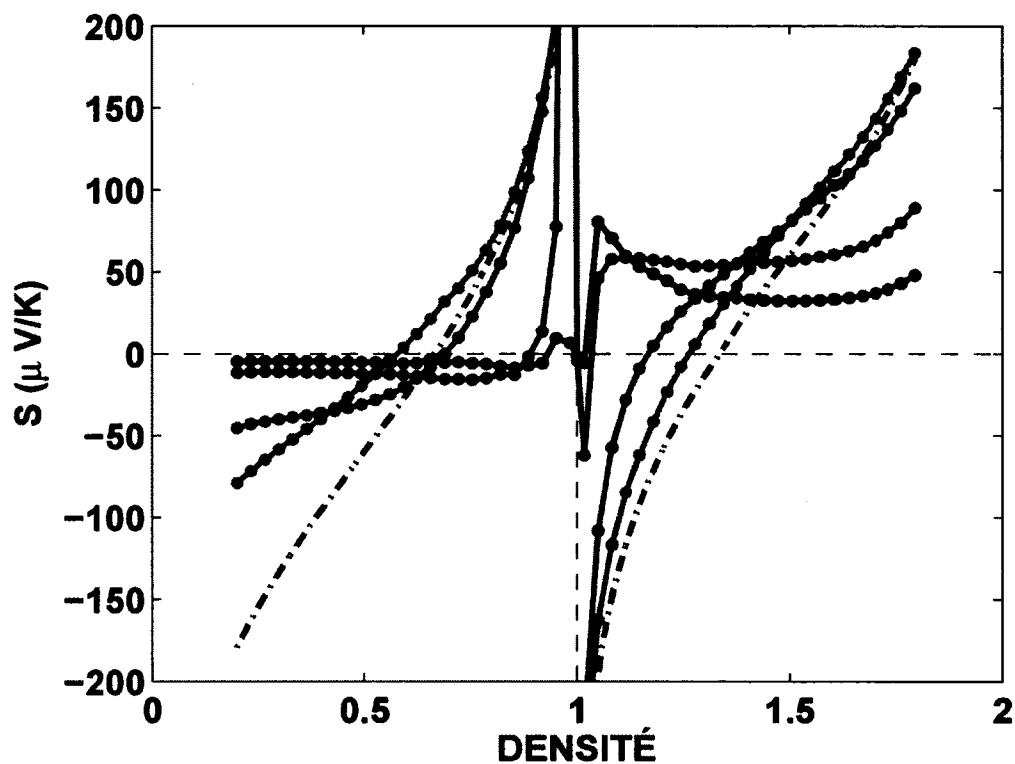


FIGURE 4.1 – Pouvoir thermoélectrique en fonction de la densité pour un isolant de Mott dopé à large bande interdite (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande) pour différentes températures : (noir) $T = 0.1t$, (bleu) $T = 0.25t$, (rouge) $T = t$ et (magenta) $T = 2t$. Le cas de la limite atomique est illustré par la courbe noire points-tirets (-)

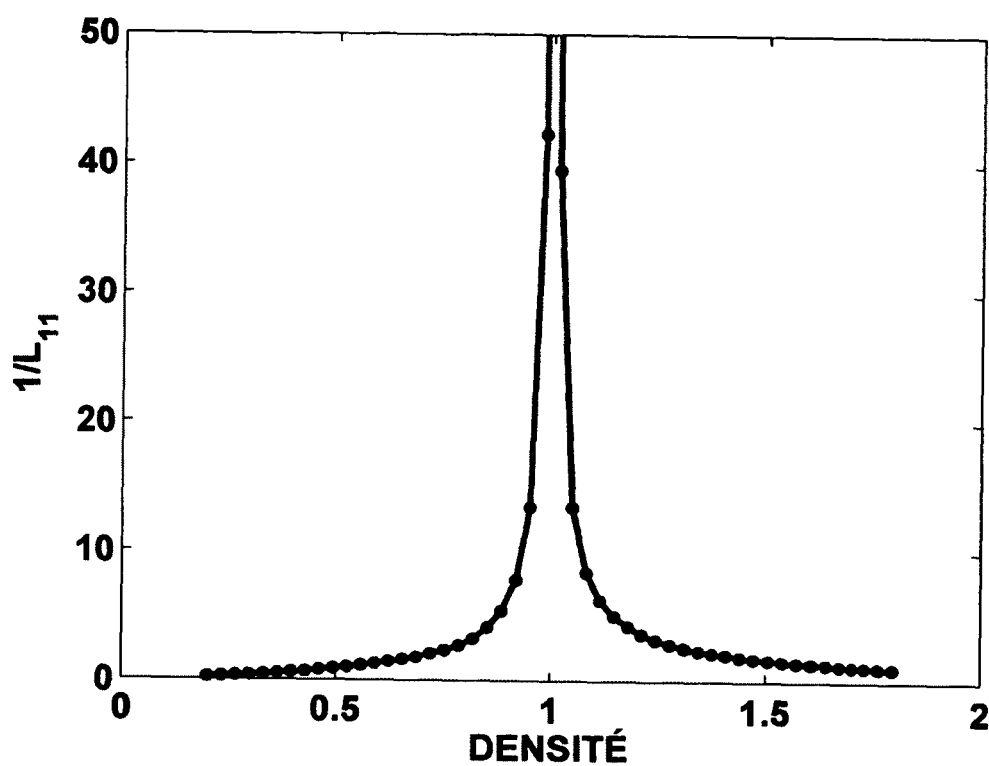


FIGURE 4.2 – Résistivité en fonction du remplissage pour un isolant de Mott dopé à large bande interdite (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande) dans le régime incohérent $T = 2t$

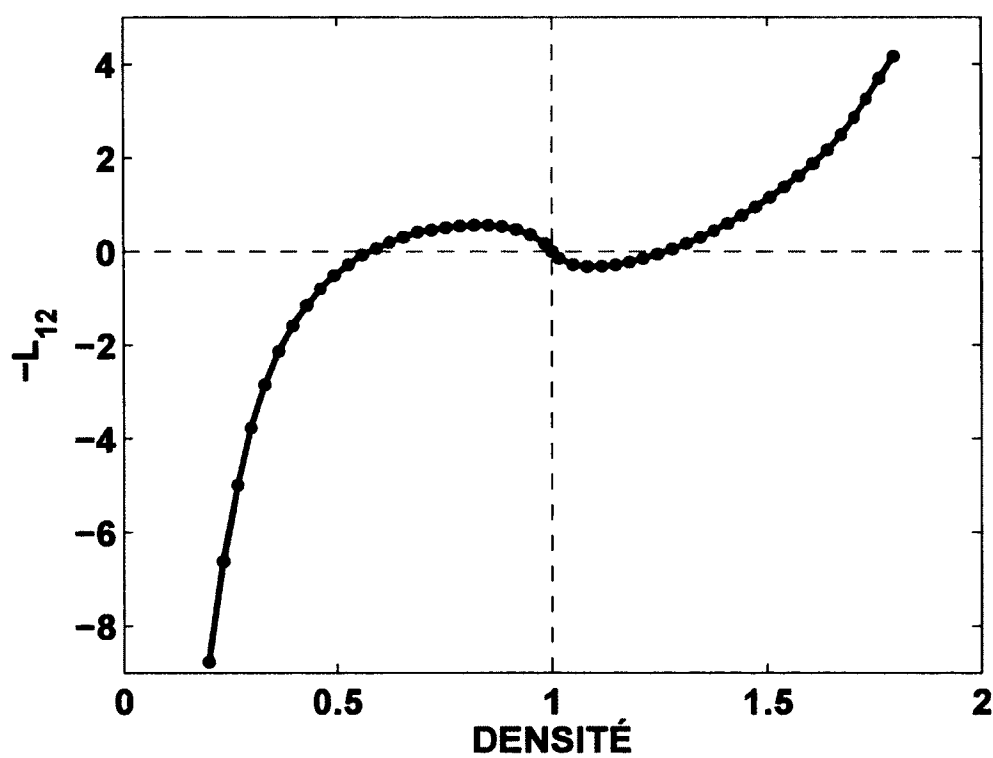


FIGURE 4.3 – L_{12} en fonction du remplissage pour un isolant de Mott dopé à large bande interdite (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande) dans le régime incohérent $T = 2t$

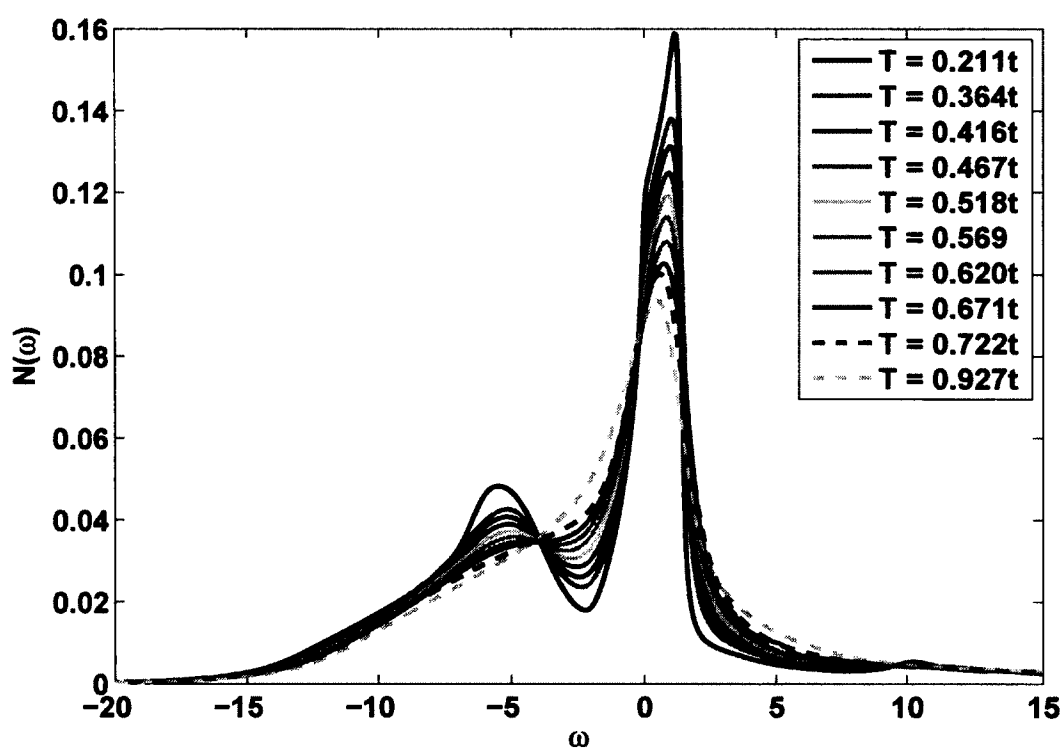


FIGURE 4.4 – Densité d'états pour différentes températures (modèle de Hubbard $U = 32t$ ou deux fois la largeur de bande et $n = 0.80$). La bande de Hubbard supérieure est située à des fréquences plus élevées qui ne sont pas tracées ici.

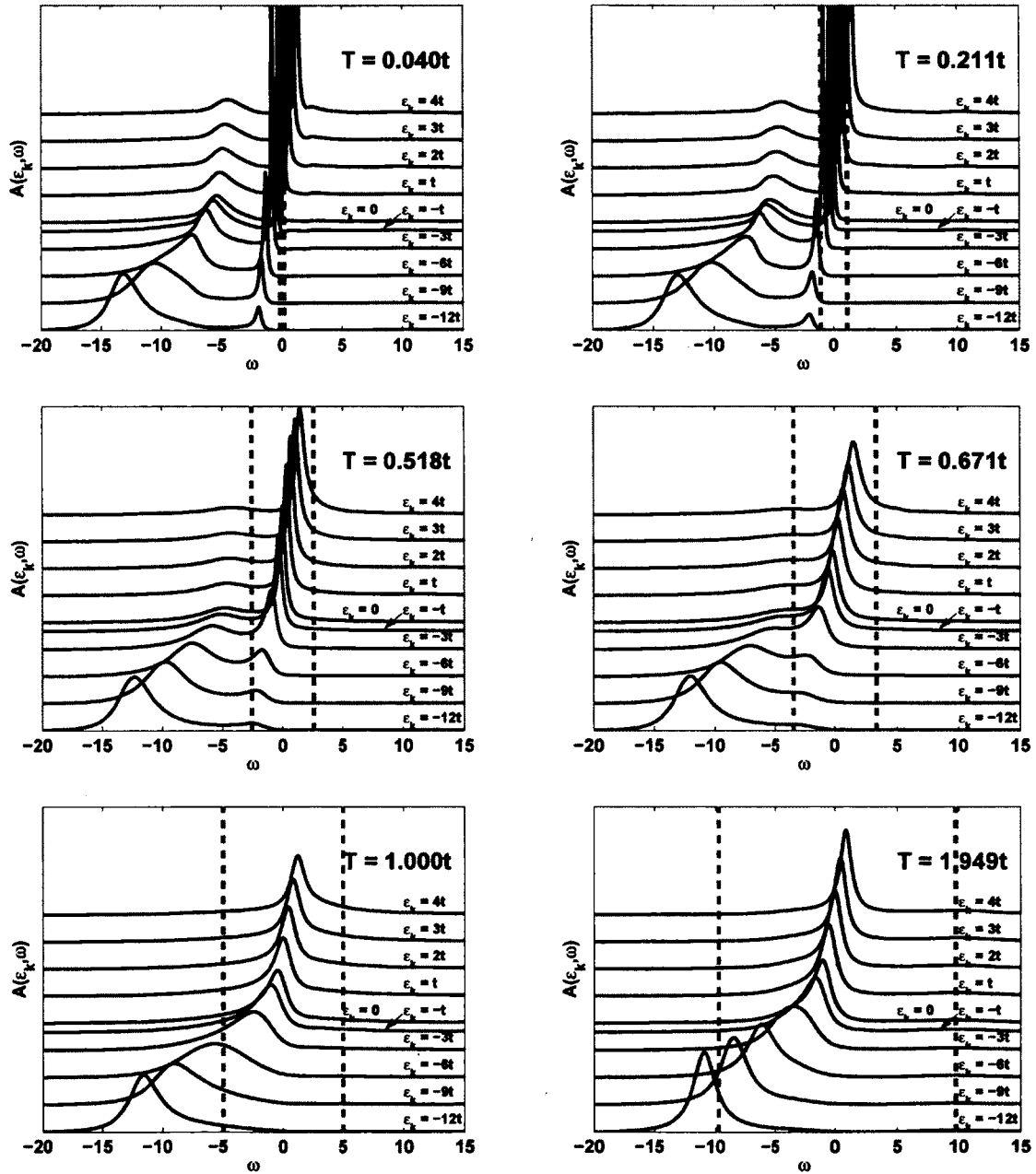


FIGURE 4.5 – Fonction spectrale pour différentes valeurs de ϵ_k pour plusieurs températures dans le cas $U = 32t$ et $n = 0.80$. Les lignes pointillées rouges correspondent à $\pm 5T$.

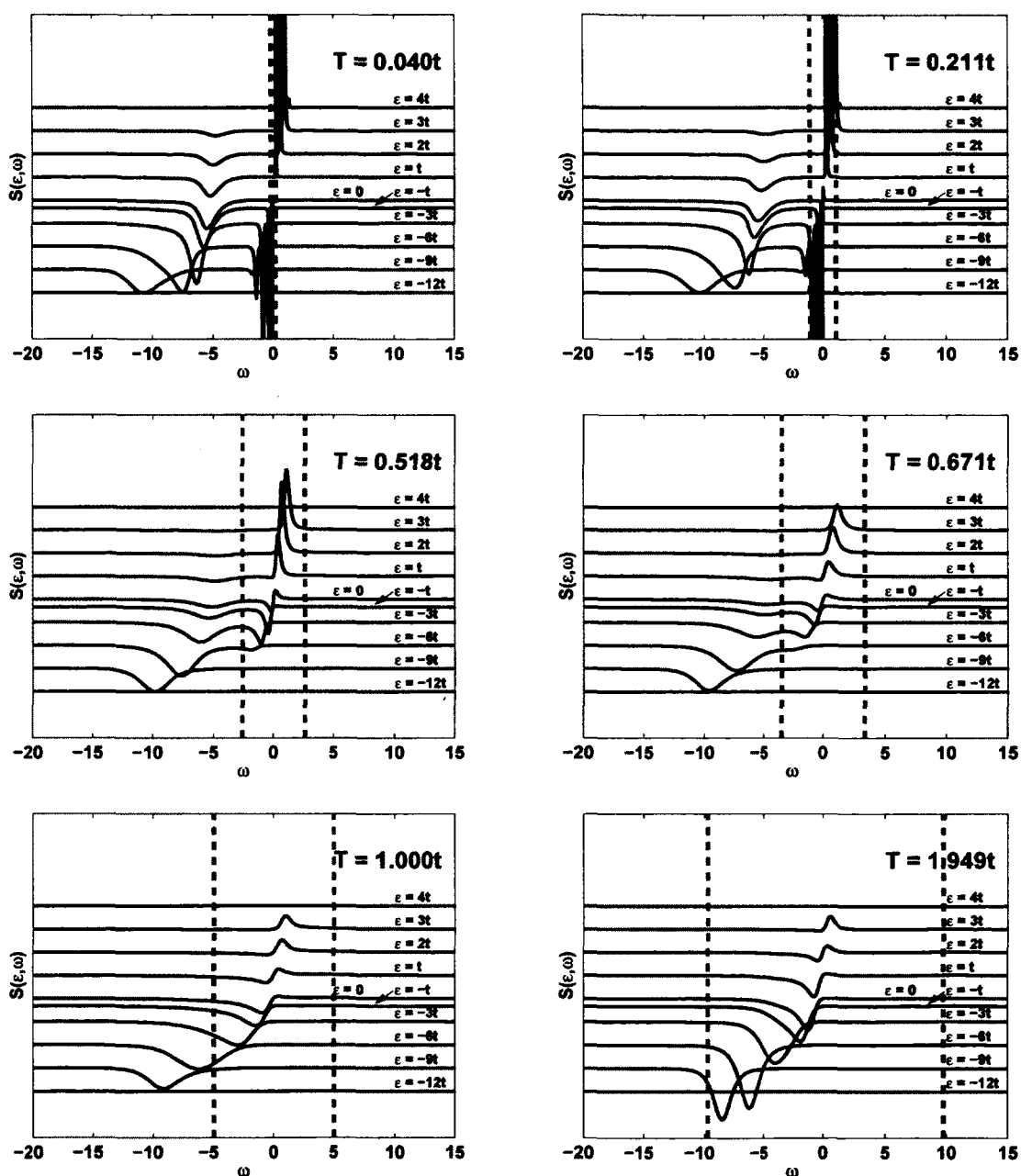


FIGURE 4.6 – Fonction $S(\varepsilon, \omega)$ pour différentes valeurs de ε pour plusieurs températures dans le cas $U = 32t$ et $n = 0.80$. Les lignes pointillées rouges correspondent à $\pm 5T$.

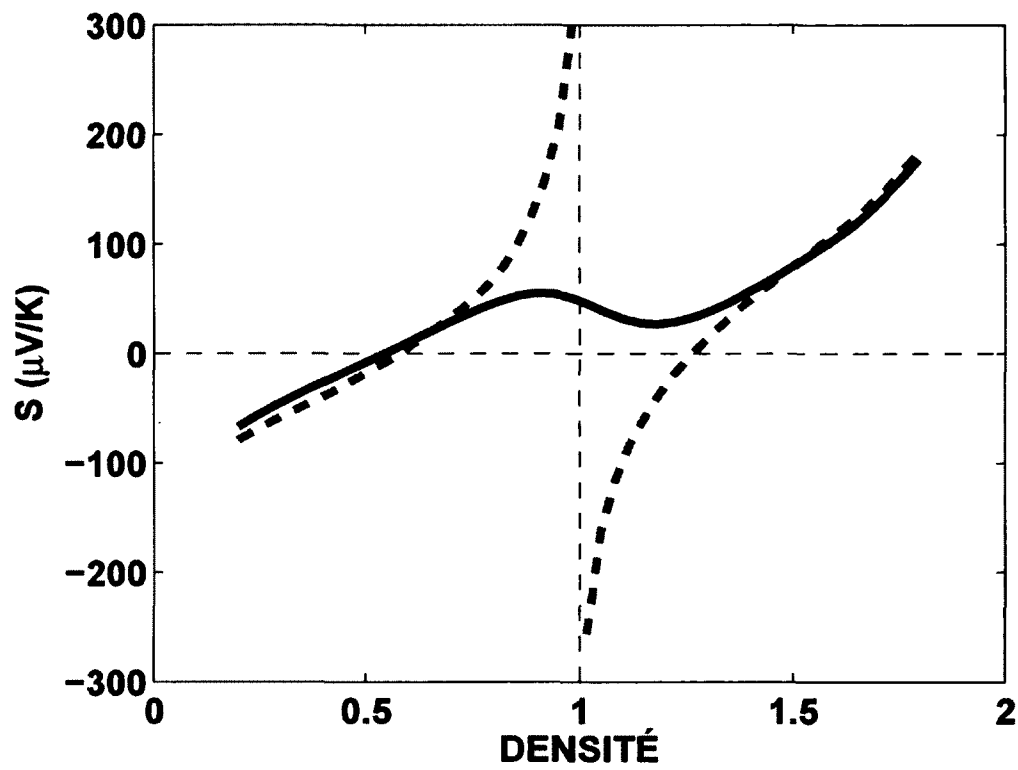


FIGURE 4.7 – Pouvoir thermoélectrique en fonction de la densité à $T = 2t$ pour $U = 8t$ (noir) et $U = 32t$ (rouge tirets-tirets)

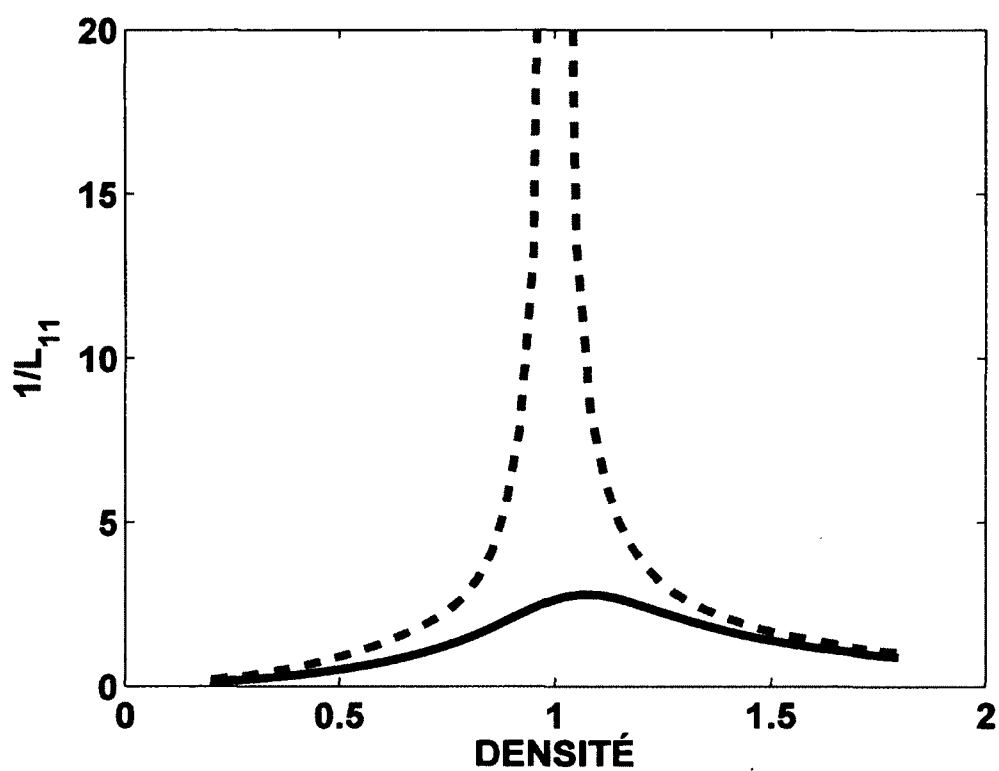


FIGURE 4.8 - $1/L_{11}$ en fonction de la densité à $T = 2t$ pour $U = 8t$ (noir) et $U = 32t$ (rouge tirets-tirets)

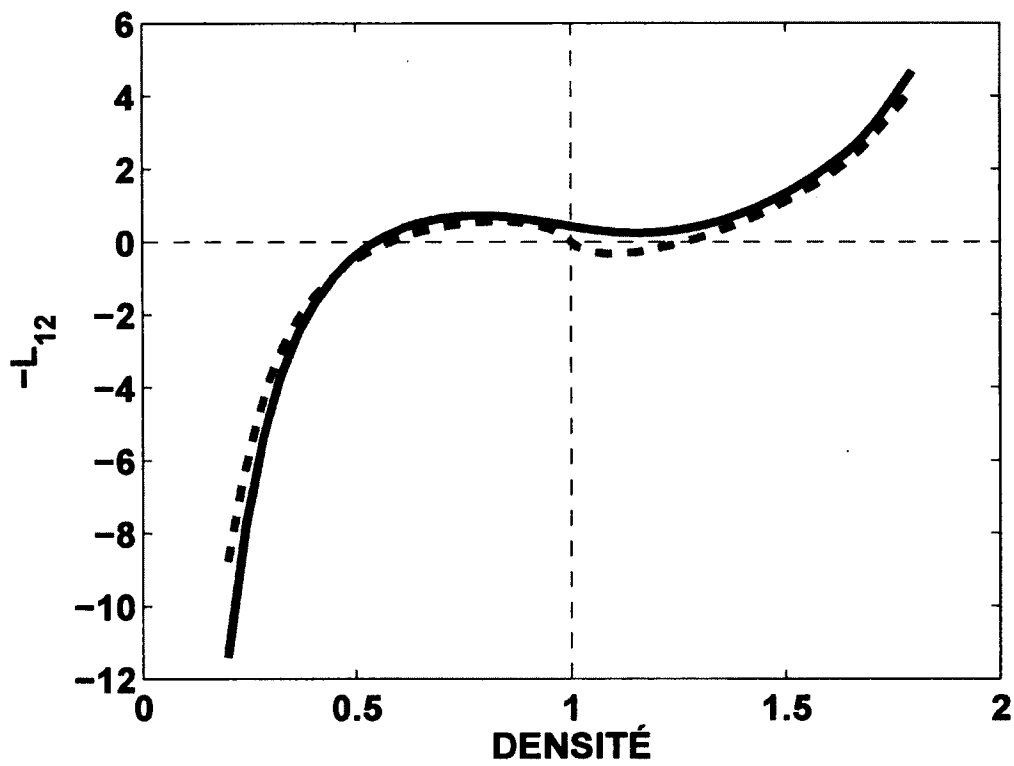


FIGURE 4.9 - $-L_{12}$ en fonction de la densité à $T = 2t$ pour $U = 8t$ (noir) et $U = 32t$ (rouge tirets-tirets)

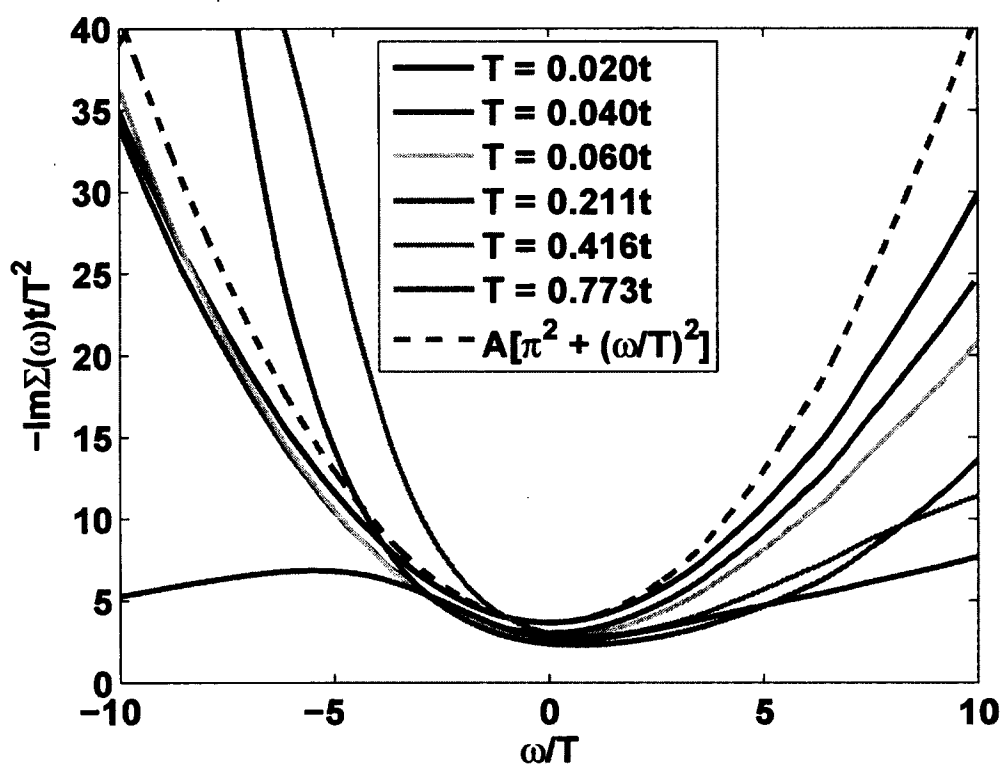


FIGURE 4.10 – Partie imaginaire de la *self-energy* divisée par T^2 en fonction de ω/T pour différentes températures à $U = 32t$

Chapitre 5

Théorie du champ moyen dynamique en présence d'un champ magnétique

Suite à la découverte des oscillations quantiques dans les supraconducteurs à haute température (haut- T_c) [68], la question de l'effet orbital du champ magnétique dans les systèmes électroniques fortement corrélés est devenue très importante. Le scénario proposé est une reconstruction de la surface de Fermi. Le travail théorique fut surtout basé sur deux philosophies similaires : (1) des Hamiltoniens effectifs sans interaction, obtenus à partir d'une théorie de champ moyen statique avec une nouvelle surface de Fermi correspondante, qui est alors utilisée pour calculer l'effet du champ. (2) Une surface de Fermi choisie d'avance plus une forme analytique pour la *self-energy*. Par la suite, la substitution de Peierls est appliquée aux quantités de mouvement et le problème est diagonalisé [69–78]. Dans ce chapitre, nous nous posons plutôt la question à savoir s'il est possible de partir de l'Hamiltonien de Hubbard avec un champ magnétique et de modifier la DMFT pour être en mesure d'étudier l'effet des interactions fortes en présence du champ d'une façon un peu moins biaisée. Cela est d'un grand intérêt même si non applicable directement au problème des haut- T_c étant donné la nature grande d de la DMFT.

Il fut argumenté dans le passé qu'un champ uniaxial étant selon une seule dimension, son effet en DMFT devrait être de l'ordre $1/d$ et donc négligeable. Mais, c'est le cas aussi de la conductivité et son calcul a cependant été très significatif. De toute façon, nous désirons étudier un système en dimensions finies, le champ en définissant une. Nous allons considérer deux situations distinctes. Dans la première, nous redérivons la DMFT

standard en tenant compte de la présence d'un champ. Nous obtiendrons que la relation d'auto-cohérence et le problème intermédiaire d'impuretés restent les mêmes. C'est un résultat vraiment important puisque les solutionneurs d'impuretés déjà existants peuvent toujours être utilisés. Dans la deuxième situation, nous débutons à partir d'un empilement de plans 2d dans la direction z et, si le champ est appliqué dans la direction x , nous verrons que les équations pour les hétérostructures telles que développées par Okamoto et Millis [79] ou Freericks [80] ne sont pas modifiées. Seulement les relations de dispersion pour chaque plan contiennent une dépendance en champ au travers d'une phase constante, différente pour chaque plan. Si nous considérons un nombre suffisant de plans, le résultat massif 3d devrait être retrouvé. De plus, en ne considérant qu'un petit nombre de plans, nous pouvons étudier l'effet d'un champ dans le plan pour des nanostructures.

5.1 Ajout d'un champ magnétique orbital

Nous souhaitons étudier le modèle de Hubbard avec la présence d'un champ magnétique agissant sur le mouvement orbital et non seulement sur le spin au travers de l'interaction de Zeeman. Commençons par écrire l'Hamiltonien où le champ est inclus comme une phase de Peierls.

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} e^{if_{ij}} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (5.1)$$

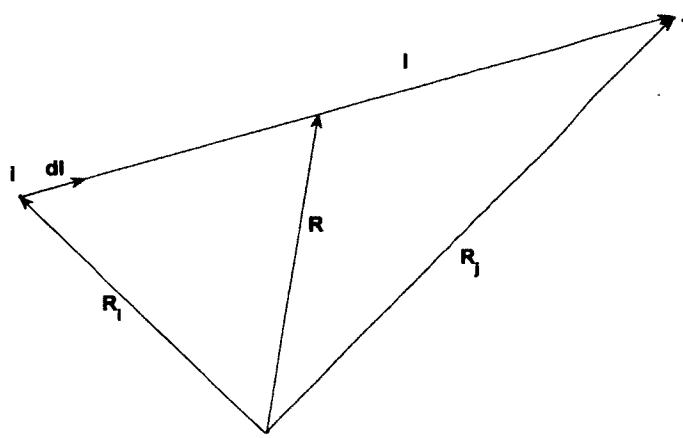
où

$$f_{ij} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \quad (5.2)$$

avec $\Phi_0 = \frac{h}{|e|}$.

Nous allons premièrement réécrire le facteur de phase d'une façon plus pratique pour la compréhension i.e. écrire la phase en fonction du champ magnétique. Le champ est donné par $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Si un champ uniforme est appliqué, nous pouvons choisir le potentiel vecteur comme $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{R}$. Cette forme est appelée jauge de Coulomb ou jauge symétrique et l'Eq. (5.2) devient

$$f_{ij} = \frac{\pi}{\Phi_0} \int_i^j (\mathbf{B} \times \mathbf{R}) \cdot d\mathbf{l}. \quad (5.3)$$

FIGURE 5.1 – Représentation vectorielle du chemin $i \rightarrow j$

À partir de l'identité vectorielle $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$,

$$f_{ij} = \frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot \int_i^j \mathbf{R} \times d\mathbf{l}. \quad (5.4)$$

L'intégrale est selon le chemin entre i et j . Représentons les différentes positions du problème comme sur la Figure 5.1. Selon la Fig. 5.1

$$d\mathbf{l} = dl \frac{\mathbf{l}}{|\mathbf{l}|} = \frac{\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|} dl \quad (5.5)$$

et

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_i + n \frac{\mathbf{l}}{|\mathbf{l}|} = \mathbf{R}_i + n \frac{\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|} \quad (5.6)$$

où n est une variable continue entre 0 et 1.

Nous obtenons donc

$$\mathbf{R} \times d\mathbf{l} = \frac{\mathbf{R}_i \times \mathbf{R}_j}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|} dl. \quad (5.7)$$

Et, ainsi,

$$\int_i^j \mathbf{R} \times d\mathbf{l} = \frac{\mathbf{R}_i \times \mathbf{R}_j}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i|} |\mathbf{l}| = \mathbf{R}_i \times \mathbf{R}_j. \quad (5.8)$$

Finalement, le facteur de phase devient

$$f_{ij} = -\frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_j \times \mathbf{R}_i). \quad (5.9)$$

À partir de l'Hamiltonien Eq. (5.1), nous devons premièrement comprendre comment la fonction de Green dépend du champ magnétique.

5.2 Cas sans interaction

Commençons par le cas $U = 0$. L'Hamiltonien est simplement

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} e^{if_{ij}} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (5.10)$$

Nous allons suivre de près l'approche de Matsubara et Kaneyoshi [81]. En utilisant l'équation du mouvement pour la fonction de Green où $\langle\langle c_{i,\sigma} | c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle = G_{ij}$, $z \langle\langle c_{i,\sigma} | c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle = \langle\{c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma}^\dagger\}\rangle + \langle\langle [c_{i,\sigma}, H] | c_{j,\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ nous obtenons, en laissant tomber l'indice de spin

$$zG_{ij} = \delta_{ij} - \sum_{n \neq i} t_{in} e^{if_{in}} G_{nj}, \quad (5.11)$$

qui peut être itérée en fonction de $G^0 = \frac{1}{z}$ comme

$$zG_{ij} = \delta_{ij} - G^0 t_{ij} e^{if_{ij}} + (G^0)^2 \sum_l t_{il} t_{lj} e^{i(f_{il} + f_{lj})} - (G^0)^3 \sum_{l,m} t_{il} t_{lm} t_{mj} e^{i(f_{il} + f_{lm} + f_{mj})} + \dots \quad (5.12)$$

Cela peut être réécrit comme

$$zG_{ij} = \delta_{ij} - \frac{1}{z} \tilde{t}_{ij} + \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu+1}}{z^{\nu+1}} \sum_{l_1} \dots \sum_{l_\nu} \tilde{t}_{il_1} \tilde{t}_{l_1 l_2} \dots \tilde{t}_{l_\nu j}, \quad (5.13)$$

où nous avons défini $\tilde{t}_{ij} \equiv t_{ij} e^{if_{ij}}$.

Nous allons maintenant prouver que la fonction de Green a une phase globale ($e^{if_{ij}}$)

et que la fonction restante n'a pas de dépendance linéaire en champ magnétique (premier terme non nul en $O(B^2)$). En réalité, la preuve suivante n'est pas réellement nécessaire. Nous verrons à la section suivante qu'il existe des propriétés générales pour la fonction de Green en champ. La preuve qui suit est quand même utile pour bien comprendre la structure et aussi pour faire la lumière sur l'exactitude de l'approche semi-classique i.e. $G_{ij} = e^{if_{ij}}G_{ij}(B = 0)$.

Nous prenons la fonction non-diagonale et nous définissons $g_{ij} \equiv zG_{ij}$, écrivons

$$g_{ij} = -\frac{1}{z}t_{ij}e^{if_{ij}} + \left(\frac{1}{z}\right)^2 \sum_l t_{il}t_{lj}e^{i(f_{il}+f_{lj})} - \left(\frac{1}{z}\right)^3 \sum_{l,m} t_{il}t_{lm}t_{mj}e^{i(f_{il}+f_{lm}+f_{mj})} + \dots \quad (5.14)$$

Regardons le deuxième terme du côté droit de l'égalité dans l'Eq. (5.14). Nous nous concentrons sur le terme de phase

$$\begin{aligned} e^{i(f_{il}+f_{lj})} &= e^{if_{ij}}e^{i(f_{il}+f_{lj}-f_{ij})} \\ &= e^{if_{ij}}e^{i(f_{il}+f_{lj}+f_{ji})} \end{aligned} \quad (5.15)$$

En utilisant la définition de l'Eq. (5.9), nous pouvons écrire le facteur de phase de l'Eq. (5.15)

$$\begin{aligned} e^{if_{ij}}e^{i(f_{il}+f_{lj}+f_{ji})} &= e^{if_{ij}}e^{-\frac{i\pi}{\Phi_0}\mathbf{B}\cdot(\mathbf{R}_l\times\mathbf{R}_i+\mathbf{R}_j\times\mathbf{R}_l+\mathbf{R}_i\times\mathbf{R}_j)} \\ &= e^{if_{ij}}e^{-\frac{i\pi}{\Phi_0}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S}_{ilj}} \end{aligned} \quad (5.16)$$

où \mathbf{S}_{ilj} est un vecteur qui représente l'aire du triangle formé par le saut $i \rightarrow l \rightarrow j \rightarrow i$, tel que montré à la Figure 5.2. Dépendamment de la direction du saut ($i \rightarrow l \rightarrow j \rightarrow i$ ou $i \rightarrow j \rightarrow l \rightarrow i$) nous obtenons un signe différent i.e. $\mathbf{S}_{i \rightarrow l \rightarrow j \rightarrow i} = -\mathbf{S}_{i \rightarrow j \rightarrow l \rightarrow i}$. Par conséquent, nous voyons que le terme linéaire en B dans cette expression sera zéro en moyenne.

La même approche est appliquée pour le troisième terme de l'Eq. (5.14) et un résultat semblable est obtenu, sauf que le chemin fermé est un quadrilatère. Cela se répète à chaque ordre. La fonction de Green pour le cas sans interaction s'écrira alors

$$G_{ij}(B) = e^{if_{ij}}G_{ij}(O(B^2)). \quad (5.17)$$

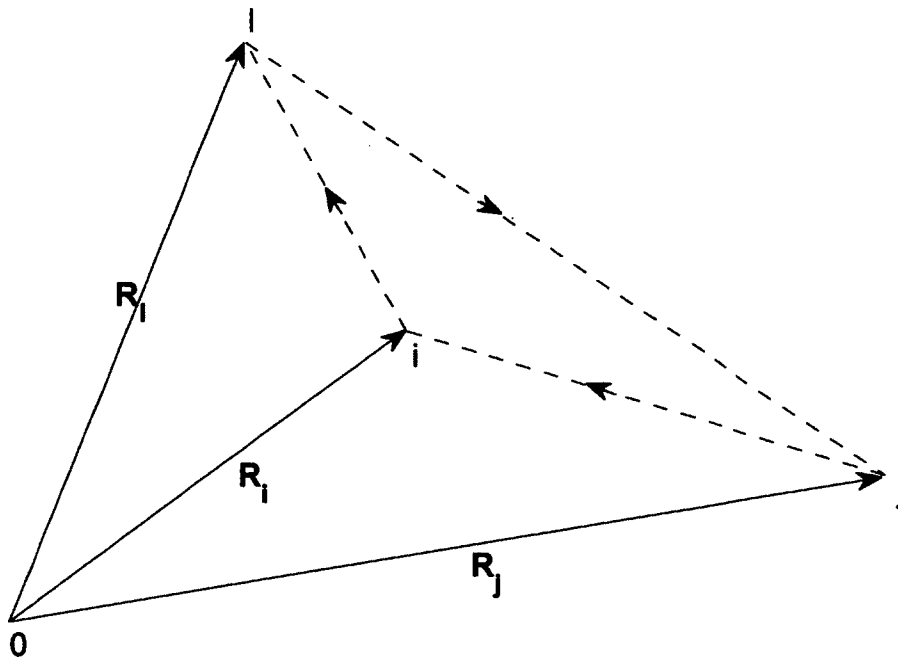


FIGURE 5.2 – Chemin fermé du facteur de phase $\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_{ilj}$

Cela montre pourquoi, dans le cas d'un champ faible, il peut être suffisant d'écrire $G_{ij}(B) = e^{if_{ij}}G_{ij}(B=0)$.

5.3 Cas avec interactions

La preuve de la section précédente à l'effet que la fonction de Green peut s'écrire avec une phase globale n'était pas rigoureusement nécessaire. En effet, au delà de Matsubara et Kaneyoshi [81], il fut prouvé que n'importe quelle fonction de Green pour un champ magnétique orbital constant avec ou sans interaction peut être écrite comme $G_{ij} = e^{if_{ij}}\bar{G}_{ij}$, où \bar{G}_{ij} est une fonction ayant une dépendance en champ mais qui est invariante sous translation, contrairement à G_{ij} . Cette preuve est présentée par exemple dans Khodas et Finkelstein [82] ou dans Chen et Lee [83]. L'idée est de définir un opérateur de translation magnétique et d'appliquer l'opérateur de translation finie aux opérateurs de création et d'annihilation et de montrer que la fonction de Green \bar{G}_{ij} demeure inchangée. Il s'avère de plus que cette fonction est aussi invariante de jauge et sous rotation. L'invariance de jauge de la fonction \bar{G}_{ij} sera très importante plus loin.

Nous nous tournons maintenant spécifiquement vers le problème avec interaction. Dans l'esprit de la DMFT un site, nous aimerions avoir une *self-energy* dépendante du champ qui est locale ($\Sigma_{ii}(i\omega_n, B)$) et surtout la même pour tous les sites. Nous argumentons que cela devrait être le cas. En effet, imaginons par exemple un cristal infini en 2d sujet à un champ magnétique uniforme. Si un électron se trouve sur un site aléatoire, l'environnement que cet électron voit autour est le même que pour n'importe quel autre site aléatoire (même champ constant partout dans le système). C'est seulement lorsqu'il commence à sauter d'un site à l'autre que le champ commence à avoir un effet qui dépend du point de départ et d'arrivée. Nous pourrions donc croire qu'une quantité locale ne devrait pas dépendre de l'endroit où est l'électron dans l'espace et donc $\Sigma_{ii}(i\omega_n, B) = \Sigma(i\omega_n, B)$ pour tous i . Il peut être démontré que pour un système avec interaction, comme pour la fonction de Green, la *self-energy* peut être écrite comme $\Sigma_{ij}(i\omega_n, B) = e^{if_{ij}}\bar{\Sigma}_{ij}(i\omega_n, B)$ [84]. Par conséquent, quand $i = j$, il existe une *self-energy* locale avec une dépendance en champ. Ce serait quand même très utile si nous pouvions prouver qu'elle est la même pour n'importe quel i mathématiquement. Nous présentons une preuve non parfaitement rigoureuse. Dans ce but, nous regardons le développement perturbatif de la *self-energy* pour vérifier si nous pouvons en conclure quelque chose. Les diagrammes, jusqu'au qua-

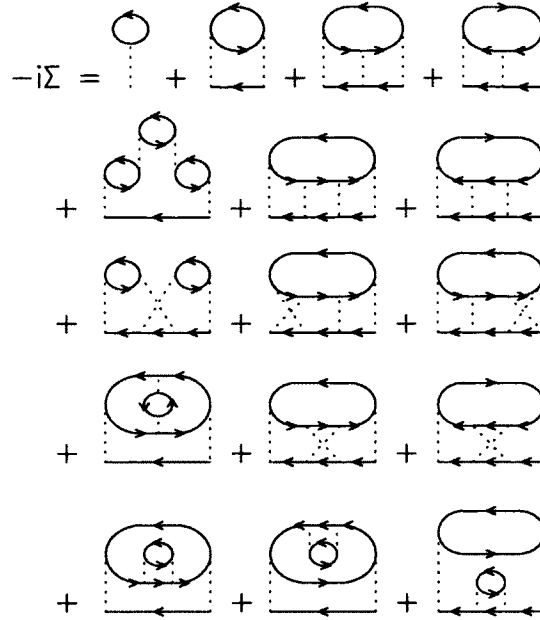


FIGURE 5.3 – Les diagrammes de *self-energy* pour le modèle de Hubbard jusqu'au quatrième ordre. Les lignes solides sont pour les fonctions de Green sans interaction et les lignes pointillées représentent l'interaction de Coulomb. Reproduit de Phys. Rev. B 50, 6939 (1994)

trième ordre en U sont donnés par Freericks et Jarrell [85] (Figure 8. de ce papier). Nous reproduisons leur figure à la Fig. 5.3 de ce document. Mathématiquement, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}
 i\Sigma_{ij,\sigma}(\tau - \tau') &= \delta_{ij}U\bar{G}_{ii,\sigma}(0) + U^2\bar{G}_{ij,\sigma}(\tau - \tau')\bar{G}_{ji,\bar{\sigma}}(\tau' - \tau)\bar{G}_{ij,\bar{\sigma}}(\tau - \tau')e^{if_{ij}} \\
 &+ U^3\left(\int_0^\beta d\tau'' \sum_m \bar{G}_{im,\sigma}(\tau - \tau'')\bar{G}_{mj,\sigma}(\tau'' - \tau')\bar{G}_{mi,\bar{\sigma}}(\tau'' - \tau)\bar{G}_{jm,\bar{\sigma}}(\tau' - \tau'')\bar{G}_{ij,\bar{\sigma}}(\tau - \tau')e^{if_{ij}} \right. \\
 &+ \int_0^\beta d\tau'' \left[\sum_m \bar{G}_{im,\sigma}(\tau - \tau'')\bar{G}_{mj,\sigma}(\tau'' - \tau')\bar{G}_{im,\bar{\sigma}}(\tau - \tau'')\bar{G}_{mj,\bar{\sigma}}(\tau'' - \tau')\bar{G}_{ji,\bar{\sigma}}(\tau' - \tau) \right. \\
 &\left. \left. \times e^{2i(f_{im}+f_{mj}+f_{ji})}e^{if_{ij}} \right] \right) \\
 &+ \dots
 \end{aligned}
 \tag{5.18}$$

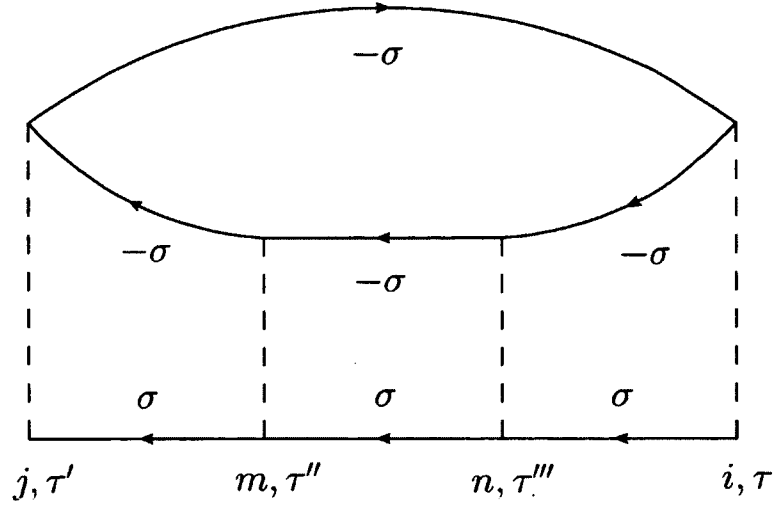


FIGURE 5.4 – Exemple de diagramme d'ordre 4

Pour les douze diagrammes d'ordre quatre, leurs expressions complètes sont très longues. Nous présentons un exemple à Fig. 5.4 dont la contribution s'écrit

$$\begin{aligned}
 U^4 \int d\tau'' \int d\tau''' \sum_{m,n} & G_{in,\sigma}(\tau - \tau''') G_{nm,\sigma}(\tau''' - \tau'') G_{mj,\sigma}(\tau'' - \tau') G_{in,\bar{\sigma}}(\tau - \tau''') \\
 & \times G_{nm,\bar{\sigma}}(\tau''' - \tau'') G_{mj,\bar{\sigma}}(\tau'' - \tau') G_{in,\sigma}(\tau - \tau') G_{ji,\sigma}(\tau' - \tau) \\
 & \times e^{2i(f_{in} + f_{nm} + f_{mj} + f_{ji})} e^{if_{ij}}.
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

Pour les autres diagrammes, nous allons seulement écrire leurs facteurs de phase. Chaque exponentielle, sauf celles $e^{if_{ij}}$, correspondent à un chemin fermé pour la phase.

1.

$$e^{if_{ij}} \tag{5.20}$$

2.

$$e^{if_{ij}} \tag{5.21}$$

3.

$$e^{2i(f_{in} + f_{nm} + f_{mj} + f_{ji})} e^{if_{ij}} \tag{5.22}$$

4.

$$e^{i(f_{in} + f_{nm} + f_{mj} + f_{ji})} e^{if_{ij}} \tag{5.23}$$

$$5. \quad e^{i(f_{mj}+f_{nm}+f_{in}+f_{ji})} e^{i(f_{mj}+f_{ni}+f_{im}+f_{jn})} e^{if_{ij}} \quad (5.24)$$

$$6. \quad e^{i(f_{in}+f_{nm}+f_{mj}+f_{ji})} e^{i(f_{nj}+f_{in}+f_{jm}+f_{mi})} e^{if_{ij}} \quad (5.25)$$

$$7. \quad e^{if_{ij}} \quad (5.26)$$

$$8. \quad e^{i(f_{in}+f_{nm}+f_{mj}+f_{ji})} e^{i(f_{nm}+f_{mi}+f_{jn}+f_{ij})} e^{if_{ij}} \quad (5.27)$$

$$9. \quad e^{i(f_{in}+f_{nm}+f_{mj}+f_{ji})} e^{i(f_{nj}+f_{im}+f_{mn}+f_{ji})} e^{if_{ij}} \quad (5.28)$$

$$10. \quad e^{i(f_{ni}+f_{mn}+f_{jm}+f_{ij})} e^{if_{ij}} \quad (5.29)$$

$$11. \quad e^{i(f_{in}+f_{nm}+f_{mj}+f_{ji})} e^{if_{ij}} \quad (5.30)$$

$$12. \quad e^{i(f_{in}+f_{nm}+f_{mj}+f_{ji})} e^{if_{ij}} \quad (5.31)$$

Nous prenons maintenant la partie locale de la *self-energy* (Σ_{ii}) qui est celle qui nous intéresse. Nous regardons seulement le facteur de phase et déterminons comment chaque diagramme se comporte en terme d'orbite de phase fermée.

$$-i\Sigma_{ii} \rightarrow$$

Premier ordre :
pas de phase

Deuxième ordre :
pas de phase

Troisième ordre :

1- pas de phase

2- pas de phase

Quatrième ordre :

1- pas de phase

2- pas de phase

3- $e^{2i(f_{in}+f_{nm}+f_{mi})} = e^{2iF_{imn}}$

4- $e^{iF_{imn}}$

5- $e^{iF_{imn}}$

6- $e^{iF_{imn}}$

7- pas de phase

8- $e^{2iF_{imn}}$

9- pas de phase

10- $e^{-iF_{imn}}$

11- $e^{iF_{imn}}$

12- $e^{iF_{imn}}$

Le facteur de phase F_{imn} peut être vu comme la Figure 5.2 en changeant l par m et j par n . C'est une boucle fermée, c'est-à-dire que ce facteur est le flux au travers du triangle $F_{imn} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$. Puisque c'est un flux, cet objet est invariant de jauge, même si nous l'avons calculé en utilisant une jauge particulière. Chacun des diagrammes a soit pas de phase ou une phase fermée. Au 4^e ordre, elle peut être quatre choses i.e. 0, F_{imn} , $2F_{imn}$ et $-F_{imn}$. Regardons ce que la phase F_{imn} nous apprend. Nous commençons par la réécrire explicitement

$$\begin{aligned} F_{imn} &= -\frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_n \times \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_m \times \mathbf{R}_n + \mathbf{R}_i \times \mathbf{R}_m) \\ &= \frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_{in} \times \mathbf{R}_{im}), \end{aligned} \quad (5.32)$$

où $\mathbf{R}_{in} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_n$ et nous nous rappelons qu'il y aura une somme sur tous les m et n .

Si nous fixons les sites i , m et n et calculons le facteur de phase, il est clair que pour n'importe quel autre i , il est possible de trouver d'autres m et n qui donneront la même phase puisque F_{imn} (Eq. (5.32)) dépend seulement de la différence entre vecteurs. Comme nous sommes sur m et n , si les diagrammes de *self-energy* étaient seulement une somme

sur un terme de phase, il semble clair que la même chose serait obtenue pour n'importe quel i . Par contre, chaque diagramme de *self-energy* contient aussi des fonctions de Green du type \bar{G}_{ij} . Mais celles-ci sont invariantes sous translation. Ces fonctions de Green ne dépendent que de la différence des positions. Dans ce cas, il semble clair que tous les diagrammes jusqu'à l'ordre quatre donnent une contribution qui ne dépend pas du choix particulier du site i . Il est facilement imaginable que ce devrait être le cas pour tous les ordres supérieurs et donc, nous pouvons conclure que nous pouvons en effet obtenir une *self-energy* locale qui est indépendante de i i.e. $\Sigma_{ii}(i\omega_n, B) = \Sigma(i\omega_n, B)$. Nous pouvons maintenant être pas mal confiant qu'il existe une façon de définir une *self-energy* dépendante de B et qui est la même partout.

La fonction de Green avec interaction peut ainsi être écrite en utilisant l'équation de Dyson

$$\begin{aligned} G_{ij}^{int}(i\omega_n) &= G_{ij}^0(i\omega_n) + \sum_m G_{im}^0(i\omega_n) \Sigma(i\omega_n, B) G_{mj}^{int}(i\omega_n) \\ &= G_{ij}^0(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n, B) \sum_m G_{im}^0(i\omega_n) G_{mj}^{int}(i\omega_n), \end{aligned} \quad (5.33)$$

où $G_{ij}^0(i\omega_n)$ est donné par l'Eq. (5.11). En terme des fonctions invariantes sous translation, nous obtenons à partir de G_{ij}^0 donné par l'Eq. (5.11) et de G_{ij}^{int} donné par l'Eq. (5.33)

$$z\bar{G}_{ij}^0 = \delta_{ij} - \sum_l t_{il} e^{i(f_{il} + f_{lj} + f_{ji})} \bar{G}_{lj}^0, \quad (5.34)$$

$$\bar{G}_{ij}^{int}(i\omega_n) = \bar{G}_{ij}^0(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n, B) \sum_l e^{i(f_{il} + f_{lj} + f_{ji})} \bar{G}_{il}^0(i\omega_n) \bar{G}_{lj}^{int}(i\omega_n). \quad (5.35)$$

Avant de dériver la DMFT avec champ, nous allons montrer que le cas avec *self-energy* locale admet une simplification majeure pour le calcul de la fonction de Green, même en présence d'un champ \mathbf{B} . La présence du facteur de phase f_{ij} dans les Eqs. (5.34) et (5.35) nous empêche d'écrire ces deux équations formellement comme des produits matriciels. Par contre, ce n'est pas un problème pour les fonctions de Green non invariantes sous translation données par les Eqs. (5.11) et (5.33). Dans ce cas, une fonction G_{ij} devient une matrice \mathbf{G} et le saut $t_{ij} e^{if_{ij}}$ devient $\tilde{\mathbf{t}}$. L'Eq. (5.11) s'écrit alors, avec \mathbf{I} la matrice

identité

$$\begin{aligned} z\mathbf{I}\mathbf{G}^0 &= \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{t}}\mathbf{G}^0 \\ \mathbf{G}^0 &= [z\mathbf{I} + \tilde{\mathbf{t}}]^{-1}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Pour la fonction avec interaction, nous utilisons l'Eq. (5.33)

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{int} &= \mathbf{G}^0 + \mathbf{G}^0[\Sigma(i\omega_n, B)\mathbf{I}]\mathbf{G}^{int} \\ (\mathbf{G}^0)^{-1}\mathbf{G}^{int} &= \mathbf{I} + \Sigma(i\omega_n, B)\mathbf{I}\mathbf{G}^{int} \\ \mathbf{G}^{int} &= [(\mathbf{G}^0)^{-1} - \Sigma(i\omega_n, B)\mathbf{I}]^{-1} \\ &= [(i\omega_n - \Sigma(i\omega_n, B))\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{t}}]^{-1} \\ &= \mathbf{G}^0(i\omega_n - \Sigma(i\omega_n, B)), \end{aligned} \quad (5.37)$$

où nous avons utilisé l'Eq. (5.36). Nous obtenons le même résultat qu'en absence d'un champ magnétique, soit que pour le cas d'une *self-energy* locale, la fonction de Green avec interaction est obtenue en évaluant la fonction sans interaction, mais à $z - \Sigma(z)$ au lieu d'à z . Cela montre que nous pouvons calculer notre G_{ij}^{int} en utilisant l'Eq. (5.11)

$$(z - \Sigma(z, B))G_{ij}^{int} = \delta_{ij} - \sum_l t_{il} e^{if_{il}} G_{lj}^{int} \quad (5.38)$$

et donc, nous allons obtenir aussi

$$(z - \Sigma(z, B))\bar{G}_{ij}^{int} = \delta_{ij} - \sum_l t_{il} e^{i(f_{il} + f_{lj} + f_{ji})} \bar{G}_{lj}^{int}, \quad (5.39)$$

ce qui montre évidemment que

$$\bar{G}_{ij}^{int}(z) = \bar{G}_{ij}^0(z - \Sigma(z, B)). \quad (5.40)$$

Puisque cette fonction est invariante sous translation, nous pouvons la réécrire dans l'espace k . En définissant $\tilde{z} \equiv z - \Sigma(z, B)$ et en utilisant les représentations en espace k de $\bar{G}_{ji}^0 = \sum_q \bar{G}_q e^{iq \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)}$, $e^{i(f_{im} + f_{mj} + f_{ji})} = \sum_{k_1, k_2} f_{k_1, k_2} e^{ik_1 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_m)} e^{ik_2 \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j)}$ et aussi $-t_{in} = \sum_{k'} \varepsilon_{k'} e^{ik' \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_i)}$, nous obtenons

$$\tilde{z}\bar{G}_k^{int} = 1 + \sum_{k_1, k_2} \varepsilon_{k+k_1} f_{k_1, k_2} \bar{G}_{k+k_2}^{int}. \quad (5.41)$$

Cette expression est générale et admet toute structure de bande désirée et un champ magnétique de grandeur et de direction quelconque. Pour aller plus loin, nous avons besoin de la fonction f_{k_1, k_2} . Nous allons la calculer ici pour un champ dans la direction z d'un cristal en trois dimensions. La fonction $f_{im} + f_{mj} + f_{ji} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$ est un flux et est donc, comme déjà mentionné, invariante de jauge. Le résultat que nous obtenons en utilisant la jauge de Coulomb est donc le même pour n'importe quel autre choix. La phase peut être écrite

$$\begin{aligned} f_{im} + f_{mj} + f_{ji} &= -\frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot [\mathbf{R}_m \times \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j \times \mathbf{R}_m + \mathbf{R}_i \times \mathbf{R}_j] \\ &= \frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot [\mathbf{R}_{im} \times \mathbf{R}_{mj}], \end{aligned} \quad (5.42)$$

où $\mathbf{R}_{im} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_m$.

Nous écrivons la phase en espace k par une transformée de Fourier standard

$$e^{i\frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_{im} \times \mathbf{R}_{mj})} = \sum_{k_1, k_2} f_{k_1, k_2} e^{ik_1 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_m)} e^{ik_2 \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_j)} \quad (5.43)$$

Par conséquent, le terme de phase f_{k_1, k_2} est donné par

$$f_{k_1, k_2} = \sum_{ij} e^{-ik_1 \cdot \mathbf{R}_{im}} e^{-ik_2 \cdot \mathbf{R}_{mj}} e^{i\frac{\pi}{\Phi_0} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_{im} \times \mathbf{R}_{mj})}. \quad (5.44)$$

Nous réécrivons en premier lieu $\mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_{im} \times \mathbf{R}_{mj}) = (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im}) \cdot \mathbf{R}_m - (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im}) \cdot \mathbf{R}_j$ et donc

$$\begin{aligned} f_{k_1, k_2} &= \sum_{ij} e^{-ik_1 \cdot \mathbf{R}_{im}} e^{-ik_2 \cdot \mathbf{R}_{mj}} e^{i\frac{\pi}{\Phi_0} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im}) \cdot \mathbf{R}_m} e^{-i\frac{\pi}{\Phi_0} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im}) \cdot \mathbf{R}_j} \\ &= \sum_i e^{-ik_1 \cdot \mathbf{R}_{im}} e^{-ik_2 \cdot \mathbf{R}_m} e^{i\frac{\pi}{\Phi_0} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im}) \cdot \mathbf{R}_m} \underbrace{\sum_j e^{-i(-k_2 + \frac{\pi}{\Phi_0} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im})) \cdot \mathbf{R}_j}}_{\delta_{-k_2 + \frac{\pi}{\Phi_0} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im})}} \\ &= \sum_i e^{-ik_1 \cdot \mathbf{R}_{im}} \delta_{-k_2 + \frac{\pi}{\Phi_0} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im})}. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Cela donne une condition sur la valeur de \mathbf{R}_{im} donnée par la fonction delta. Nous pourrions donc peut-être écrire \mathbf{R}_{im} comme une fonction de \mathbf{k}_2 . Nous débutons avec $\mathbf{k}_2 = \frac{\pi}{\Phi_0} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}_{im})$, un champ dans la direction z $\mathbf{B} = B\hat{z}$ et un système tridimensionnel

$\mathbf{R}_{im} \equiv \mathbf{R} = (x, y, z)$.

$$\mathbf{B} \times \mathbf{R} = -By\hat{x} + Bx\hat{y} + 0\hat{z}. \quad (5.46)$$

$$\mathbf{k}_2 = \frac{\pi}{\Phi_0}(-By\hat{x} + Bx\hat{y}), \quad (5.47)$$

un vecteur dans le plan xy .

Nous pouvons inverser en \hat{x} et \hat{y}

$$\mathbf{R} = \frac{\Phi_0}{\pi B}(k_2^y, -k_2^x, \frac{\pi B}{\Phi_0}z). \quad (5.48)$$

Cela nous donne une forme finale pour l'Eq. (5.45)

$$\begin{aligned} f_{k_1, k_2} &= \sum_i e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \frac{\Phi_0}{\pi B}(k_2^y, -k_2^x, \frac{\pi B}{\Phi_0}z)} \\ &= e^{-i\frac{\Phi_0}{\pi B}(k_1^x k_2^y - k_1^y k_2^x)} \underbrace{\sum_i e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{im}^z}}_{\delta_{\mathbf{k}_1^z}} \\ &= e^{-i\frac{\Phi_0}{\pi B}\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_1 \times \mathbf{k}_2)}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Cela montre que \mathbf{k}_1 est aussi un vecteur dans le plan comme \mathbf{k}_2 . La fonction de Green donnée par l'Eq. (5.41) devient

$$\tilde{z}\overline{G}_k^{int} = 1 + \sum_{k_1, k_2} \varepsilon_{k+k_1} e^{-i\frac{\Phi_0}{\pi B}\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_1 \times \mathbf{k}_2)} \overline{G}_{k+k_2}^{int}. \quad (5.50)$$

Comme dans l'approche semi-classique à la Onsager, l'effet du champ s'applique dans le plan perpendiculaire à \mathbf{B} . Nous verrons suite à la dérivation de la DMFT en présence de \mathbf{B} si l'Eq. (5.50) est nécessaire.

5.4 DMFT dépendante du champ magnétique

Nous définissons ici la DMFT à un site lorsqu'un champ magnétique est présent. Nous effectuons le calcul sans choisir de jauge particulière avant que cela ne soit absolument nécessaire et nous verrons que pratiquement, pour un calcul, le choix de jauge est arbitraire. La fonction de partition est celle donnée par l'Eq. (1.42) où l'action est donnée

par l'Eq. (1.43) où le saut est $\tilde{t}_{ij} = e^{if_{ij}}t_{ij}$ au lieu de t_{ij} .

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma} - \sum_{i,j,\sigma} \tilde{t}_{ij} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j,\sigma}(\tau) + U \sum_i n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right]. \quad (5.51)$$

Nous utilisons l'approche de la cavité. Comme déjà discuté, nous séparons l'action S en trois parties, S_0 la partie du site, ΔS l'interaction entre le site et le reste du système et S^0 le réseau plus la cavité.

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \sum_\sigma c_{m\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{m\sigma} + U n_{m\uparrow}(\tau) n_{m\downarrow}(\tau) \quad (5.52)$$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \left[\tilde{t}_{im} c_{i\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \tilde{t}_{mi} c_{m\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right] \equiv \int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau) \quad (5.53)$$

$$S^0 = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i \neq m, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma} - \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i \neq m, j \neq m}} \tilde{t}_{ij} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + U \sum_{i \neq m} n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right]. \quad (5.54)$$

La fonction de partition est de nouveau écrite

$$Z = \int Dc_{m,\sigma}^\dagger Dc_{m,\sigma} e^{-S_0} \int \prod_{i \neq m} Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} e^{-S^0} e^{-\int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)}. \quad (5.55)$$

Nous développons $e^{-\int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)}$

$$e^{-\int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau)} = 1 - \int_0^\beta d\tau \Delta S(\tau) + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T_\tau \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) + \dots \quad (5.56)$$

et obtenons

$$Z = \int Dc_{m,\sigma}^\dagger Dc_{m,\sigma} e^{-S_0} Z^0 \left[1 - \int_0^\beta d\tau \langle \Delta S(\tau) \rangle^0 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle T_\tau \Delta S(\tau_1) \Delta S(\tau_2) \rangle^0 + \dots \right]. \quad (5.57)$$

Les termes impairs du développement sont nuls et le premier terme non zéro est celui contenant $\Delta S(\tau_1)\Delta S(\tau_2)$

$$\begin{aligned} \Delta S(\tau_1)\Delta S(\tau_2) = & \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} \tilde{t}_{im}\tilde{t}_{jm}c_{i\sigma}^\dagger(\tau_1)c_{m\sigma}(\tau_1)c_{j\sigma'}^\dagger(\tau_2)c_{m\sigma'}(\tau_2) \\ & + \tilde{t}_{im}\tilde{t}_{mj}c_{i\sigma}^\dagger(\tau_1)c_{m\sigma}(\tau_1)c_{m\sigma'}^\dagger(\tau_2)c_{j\sigma'}(\tau_2) \\ & + \tilde{t}_{mi}\tilde{t}_{jm}c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1)c_{i\sigma}(\tau_1)c_{j\sigma'}^\dagger(\tau_2)c_{m\sigma'}(\tau_2) \\ & + \tilde{t}_{mi}\tilde{t}_{mj}c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1)c_{i\sigma}(\tau_1)c_{m\sigma'}^\dagger(\tau_2)c_{j\sigma'}(\tau_2) \end{aligned} \quad (5.58)$$

S'il n'y a pas de brisure de symétrie (i.e. supraconductivité) et que l'état est paramagnétique, le premier et le quatrième terme de l'Eq. (5.58) sont nuls quand nous prenons la moyenne $\langle \rangle^0$. Le premier terme non nul est

$$\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) \left[\sum_{ij} \left(\tilde{t}_{im}\tilde{t}_{mj}G_{ji}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) + \tilde{t}_{mi}\tilde{t}_{jm}G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \right) \right] c_{m\sigma}(\tau_2), \quad (5.59)$$

où $G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) = \langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau_2)c_{j\sigma}^\dagger(\tau_1) \rangle^{(0)}$ est la fonction de Green avec interaction calculée en présence de la cavité (nous avons laissé tombé l'indice de spin pour la $G^{(0)}$).

$$\begin{aligned} S_{eff} = & S_0 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) \left[\sum_{ij} \left(\tilde{t}_{im}\tilde{t}_{mj}G_{ji}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) + \tilde{t}_{mi}\tilde{t}_{jm}G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \right) \right] c_{m\sigma}(\tau_2) \\ = & - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma c_{m\sigma}^\dagger(\tau_1) \mathfrak{S}_0^{-1}(\tau_2 - \tau_1) c_{m\sigma}(\tau_2) + \int_0^\beta d\tau U n_{m\uparrow}(\tau) n_{m\downarrow}(\tau), \end{aligned} \quad (5.60)$$

où nous avons défini

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(\tau_2 - \tau_1) = - \left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \mu \right) \delta\tau_1\tau_2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\tilde{t}_{im}\tilde{t}_{mj}G_{ji}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) + \tilde{t}_{mi}\tilde{t}_{jm}G_{ij}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) \right). \quad (5.61)$$

Ou, en fréquence de Matsubara

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\tilde{t}_{im}\tilde{t}_{mj}G_{ji}^{(0)}(i\omega_n) + \tilde{t}_{mi}\tilde{t}_{jm}G_{ij}^{(0)}(i\omega_n) \right). \quad (5.62)$$

Comme précédemment (Eq. (1.55))

$$G_{ij}^{(0)} = G_{ij}^{\text{int}} - \frac{G_{im}^{\text{int}} G_{mj}^{\text{int}}}{G_{mm}^{\text{int}}}. \quad (5.63)$$

L'action effective (Eq. (5.60)) est toujours donnée par le modèle d'Anderson standard (Eq.(1.59)) avec la définition $\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu + \Delta(i\omega_n)$, ce qui est une grande force de l'approche puisqu'ajouter un champ magnétique ne change pas du tout le modèle d'impuretés à résoudre. Les solutionneurs d'impuretés standards peuvent donc être utilisés.

Nous retournons à la définition du champ de Weiss en terme de la fonction de Green (Eq. (5.62)). En utilisant l'Eq. (5.63), nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\tilde{t}_{im} \tilde{t}_{mj} \left[G_{ji}^{\text{int}}(i\omega_n) - \frac{G_{jm}^{\text{int}}(i\omega_n) G_{mi}^{\text{int}}(i\omega_n)}{G_{mm}^{\text{int}}(i\omega_n)} \right] \right. \\ \left. + \tilde{t}_{mi} \tilde{t}_{jm} \left[G_{ij}^{\text{int}}(i\omega_n) - \frac{G_{im}^{\text{int}}(i\omega_n) G_{mj}^{\text{int}}(i\omega_n)}{G_{mm}^{\text{int}}(i\omega_n)} \right] \right). \end{aligned} \quad (5.64)$$

Considérant que $G_{ij}(z) = G_{ij}^0(z - \Sigma)$ nous avons de l'Eq. (5.11) (nous laissons tomber le int par souci de simplicité à partir de maintenant)

$$\tilde{z} G_{ij} = \delta_{ij} - \sum_n t_{in} e^{if_{in}} G_{nj}, \quad (5.65)$$

où $\tilde{z} = i\omega_n + \mu - \Sigma$. De l'Eq. (5.65), nous pouvons écrire

$$- \sum_n \tilde{t}_{in} G_{nj} = \tilde{z} G_{ij} - \delta_{ij}. \quad (5.66)$$

En utilisant l'Eq. (5.66), nous pouvons réécrire quelques termes de l'Eq. (5.64)

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \tilde{t}_{im} \tilde{t}_{mj} G_{ji} &= \sum_i \tilde{t}_{im} \sum_j \tilde{t}_{mj} G_{ji} = - \sum_i \tilde{t}_{im} (\tilde{z} G_{mi} - \delta_{mi}) \\ &= - \sum_i \tilde{t}_{im} \tilde{z} G_{mi}, \end{aligned} \quad (5.67)$$

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \tilde{t}_{im} \tilde{t}_{mj} \frac{G_{jm} G_{mi}}{G_{mm}} &= \sum_i \frac{\tilde{t}_{im} G_{mi}}{G_{mm}} \sum_j \tilde{t}_{mj} G_{jm} = - \sum_i \frac{\tilde{t}_{im} G_{mi}}{G_{mm}} (\tilde{z} G_{mm} - 1) \\ &= - \sum_i \tilde{t}_{im} \tilde{z} G_{mi} + \sum_i \frac{\tilde{t}_{im} G_{mi}}{G_{mm}}, \end{aligned} \quad (5.68)$$

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \tilde{t}_{mi} \tilde{t}_{jm} G_{ij} &= \sum_j \tilde{t}_{jm} \sum_i \tilde{t}_{mi} G_{ij} = - \sum_j \tilde{t}_{jm} (\tilde{z} G_{mj} - \delta_{mj}) \\ &= - \sum_j \tilde{t}_{jm} \tilde{z} G_{mj}, \end{aligned} \quad (5.69)$$

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \tilde{t}_{mi} \tilde{t}_{jm} \frac{G_{im} G_{mj}}{G_{mm}} &= \sum_j \frac{\tilde{t}_{jm} G_{mj}}{G_{mm}} \sum_i \tilde{t}_{mi} G_{im} = - \sum_j \frac{\tilde{t}_{jm} G_{mj}}{G_{mm}} (\tilde{z} G_{mm} - 1) \\ &= - \sum_j \tilde{t}_{jm} \tilde{z} G_{mj} + \sum_j \frac{\tilde{t}_{jm} G_{mj}}{G_{mm}}. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Nous remplaçons les Eqs. (5.67), (5.68), (5.69) et (5.70) dans l'Eq. (5.64)

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n + \mu - \frac{1}{2} \left(- \sum_i \tilde{t}_{im} \tilde{z} G_{mi} + \sum_i \tilde{t}_{im} \tilde{z} G_{mi} - \sum_i \frac{\tilde{t}_{im} G_{mi}}{G_{mm}} \right. \\ &\quad \left. - \sum_j \tilde{t}_{jm} \tilde{z} G_{mj} + \sum_j \tilde{t}_{jm} \tilde{z} G_{mj} - \sum_j \frac{\tilde{t}_{jm} G_{mj}}{G_{mm}} \right). \end{aligned} \quad (5.71)$$

Nous remplaçons $j \rightarrow i$ dans le sixième terme de $-1/2[\dots]$ et donc

$$\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu + \sum_i \frac{\tilde{t}_{im} G_{mi}}{G_{mm}}. \quad (5.72)$$

Nous avons

$$\sum_i \tilde{t}_{im} G_{mi} = \sum_i t_{im} e^{if_{im}} e^{if_{mi}} \bar{G}_{mi}. \quad (5.73)$$

Sachant que $e^{if_{im}} = e^{-if_{mi}}$, que \bar{G} est invariant sous translation $\bar{G}_{mi} = \bar{G}_{im}$ et $t_{im} = t_{mi}$, l'Eq. (5.73) devient

$$\sum_i \tilde{t}_{im} G_{mi} = \sum_i t_{mi} \bar{G}_{im}. \quad (5.74)$$

À partir de l'Eq. (5.65), nous trouvons facilement que

$$\tilde{z} G_{mm} = 1 - \sum_i t_{mi} \bar{G}_{im} \quad (5.75)$$

et en réécrivant l'Eq. (5.74) en utilisant l'Eq. (5.75), nous obtenons pour le champ de Weiss

$$\begin{aligned}
\mathfrak{S}_0^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n + \mu - \frac{(\tilde{z}G_{mm} - 1)}{G_{mm}} = i\omega_n + \mu - \tilde{z} + (G_{mm})^{-1} \\
&= i\omega_n + \mu - i\omega_n - \mu + \Sigma + (G_{mm})^{-1} \\
&= \Sigma + (G_{mm})^{-1}.
\end{aligned} \tag{5.76}$$

Nous avons prouvé un résultat très important soit qu'en présence d'un champ magnétique, la relation d'auto-cohérence conserve la même forme qu'avec $\mathbf{B} = 0$. Par conséquent, l'effet de \mathbf{B} dans Δ et Σ vient seulement de l'effet du champ dans G_{mm}^0 . Il fut souvent argumenté que cela devrait être le cas et que le champ aurait seulement une influence au travers la densité d'états sans interaction. C'est finalement le cas, mais il était nécessaire de le montrer rigoureusement puisqu'en vérité, ce n'était pas une évidence.

Pour calculer G_{mm} , nous pouvons utiliser la méthode développée par Berciu et Cook [86], qui calcule directement la fonction G_{mm}^0 qui est celle qui nous est nécessaire.

Nous pourrions aussi utiliser la méthode du papillon de Hofstadter [87]. En effet, nous avons besoin de la fonction locale et, dans ce cas, $G_{mm} = \overline{G}_{mm}$. Puisque \overline{G}_{mm} est invariante de jauge, G_{mm} l'est aussi et ainsi, nous pouvons calculer notre G avec la jauge qui nous plaît. Si nous choisissons la jauge de Landau ($\mathbf{A} = Bx\hat{y}$), pour un champ rationnel, c'est-à-dire que le ratio du flux magnétique externe avec le quantum de flux est une fraction rationnelle $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{p}{q}$, nous avons le papillon et nous disposons d'un système d'équations fini pour $G_{\mathbf{k}}^0$ quand seul le saut aux plus proches voisins du réseau carré est considéré. Dans l'esprit de [88–90] et [91], nous pourrions obtenir une procédure pour le calcul de $G_{\mathbf{k}}^0$ en trois dimensions en choisissant un champ rationnel. Dans ce cas, l'invariance sous translation dans la direction x est restaurée pour un saut de q paramètres de maille. Ainsi, l'Hamiltonien sans interaction devient

$$H = -t \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[2(\cos(k_x) + \cos(k_z)) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + e^{-ik_y} c_{\mathbf{k}+g\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + e^{ik_y} c_{\mathbf{k}-g\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \right], \tag{5.77}$$

où $\mathbf{g} = 2\pi\frac{p}{q}\hat{x}$. Une fonction de Green peut être définie à partir de cet Hamiltonien [91]. Nous pourrions aussi utiliser une approche matricielle du même problème. En effet, l'Eq. (5.77) peut définir un nouveau problème de q bandes, chacune avec une zone de

Brillouin réduite $|k_x| \leq \frac{\pi}{q}$, $|k_y| \leq \pi$ et $|k_z| \leq \pi$. Dans ce cas, nous pouvons réécrire l'Hamiltonien sans interaction, en définissant un nouvel opérateur de destruction $\Psi_{k\sigma}^T = (c_{k\sigma}, c_{k+g\sigma}, \dots, c_{k+(q-1)g\sigma})$, comme

$$H = \sum_{k,\sigma} \Psi_{k\sigma}^\dagger H_k \Psi_{k\sigma}, \quad (5.78)$$

où H_k est une matrice $q \times q$

$$H_k = \begin{pmatrix} M_0 & e^{ik_y} & 0 & \dots & 0 & e^{-ik_y} \\ e^{-ik_y} & M_1 & e^{ik_y} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-ik_y} & M_2 & e^{ik_y} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \vdots & 0 & e^{-ik_y} & M_{(q-2)} & e^{ik_y} \\ e^{ik_y} & 0 & \vdots & 0 & e^{-ik_y} & M_{(q-1)} \end{pmatrix}, \quad (5.79)$$

où $M_n = 2(\cos(k_x + n\zeta) + \cos(k_z + n\zeta))$ avec $\zeta = |\mathbf{g}| = 2\pi\frac{q}{q}$. Dans ce cas, la fonction de Green avec interaction peut s'écrire simplement sous une forme du type

$$G_{k\sigma}^0(i\omega_n - \Sigma(i\omega_n, B)) = \begin{pmatrix} \alpha_0 & e^{ik_y} & 0 & \dots & 0 & e^{-ik_y} \\ e^{-ik_y} & \alpha_1 & e^{ik_y} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-ik_y} & \alpha_2 & e^{ik_y} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \vdots & 0 & e^{-ik_y} & \alpha_{(q-2)} & e^{ik_y} \\ e^{ik_y} & 0 & \vdots & 0 & e^{-ik_y} & \alpha_{(q-1)} \end{pmatrix}^{-1}, \quad (5.80)$$

où $\alpha_n = i\omega_n - 2(\cos(k_x + n\zeta) + \cos(k_z + n\zeta)) + \mu - \Sigma(i\omega_n)$ et nous ne devons pas oublier que le k est pour la zone de Brillouin réduite. La fonction locale G_{mm} sera donnée par la somme sur la zone de Brillouin réduite et sur les bandes de $G_{k\sigma}^0$. Mais l'approche de Berciu et Cook [86] est beaucoup plus puissante et n'est pas limitée à un réseau carré plus proches voisins.

Le problème de la DMFT un site en présence d'un champ magnétique affectant le mouvement orbital des électrons est donc formellement résolu. Le travail restant consiste en une implémentation numérique de la méthode. Dans la section suivante, nous allons plutôt considérer un empilement de plans 2d avec un champ dans le plan. À l'Annexe E.2,

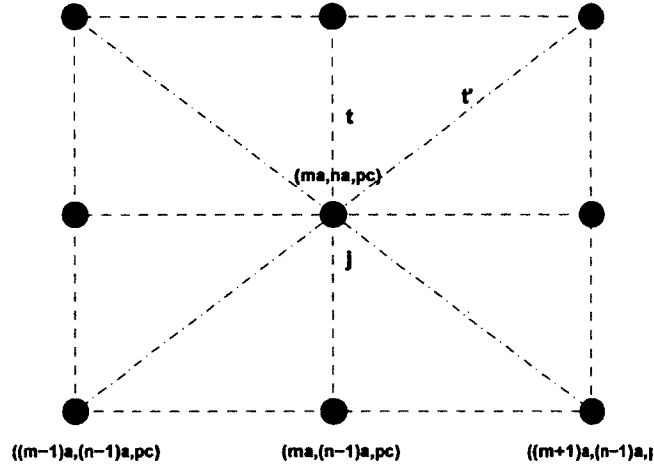


FIGURE 5.5 – Vue du haut du premier plan

nous présentons les comportements asymptotiques de G , Σ et Δ qui sont nécessaires pour le calcul en fréquence de Matsubara.

5.5 Ajout d'un champ magnétique dans le plan pour N plans 2d couplés et limite 3d

Le système que nous désirons considérer est composé de plans dans xy empilés selon la direction z et sujet à un champ magnétique dans la direction x . Dans le plan, nous permettons la possibilité d'avoir des sauts au plus proche t et second plus proche voisin t' et le paramètre de maille est a . Dans la direction z , nous considérons seulement le saut au plus proche voisin t_z avec un paramètre de maille c , différent de a . Ces suppositions devraient être correctes puisque nous pouvons voir le problème comme deux plans séparés par d'autres atomes, comme dans les cuprates par exemple. Seulement un saut t_z peut être suffisant. La Fig. 5.5 montre une vue d'en haut du plan que nous numérotions 1 et où la position en z est donnée par pc , p étant le nombre de plans depuis l'origine. Les positions en x et y sont données respectivement par ma et na .

Le plan numéroté 1 est considéré comme étant celui le plus haut en z . Le plan 2 est à $z = (p-1)c$, plan 3 à $z = (p-2)c$ et ainsi de suite. La Fig. 5.6 montre une vue en 3d du

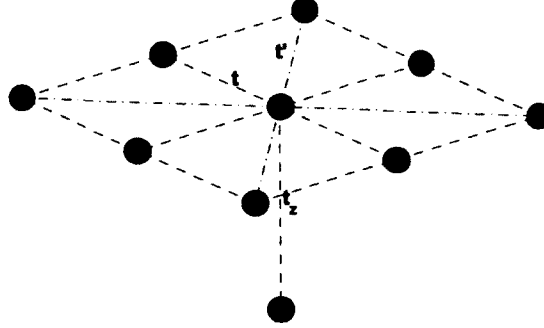


FIGURE 5.6 – Vue 3d du premier plan

plan 1 et un point directement en dessous i.e. dans le plan 2.

Nous cherchons à étudier le modèle de Hubbard et le champ magnétique est encore une fois inclus au travers de la phase de Peierls. L'Hamiltonien est donné par l'Eq. (5.1). Mais, cette fois-ci nous voulons un champ dans la direction x et, pour ce faire, nous utiliserons le jauge suivante $\mathbf{A} = (0, -Bz, 0)$. Nous avons l'invariance en translation dans le plan alors que celle-ci est brisée en z . Par conséquent, nous utilisons une transformée de Fourier partielle, définissant un \mathbf{k} 2d dans le plan et conservant la représentation en espace en z .

$$c_{is}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_{k s}^{\dagger(\lambda)}, \quad (5.81)$$

où λ numérote les plans de 1 jusqu'à l , l étant le nombre de plans.

Nous allons maintenant écrire la partie cinétique de l'Hamiltonien en terme de \mathbf{k} et λ . Ainsi

$$H_0 = - \sum_{k, k', s} \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij} e^{if_{ij}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} c_{k s}^{\dagger(\lambda)} c_{k' s}^{(\lambda)}. \quad (5.82)$$

En accord avec notre choix de jauge pour le champ, le saut acquiert une phase seulement lors d'un déplacement en y et dépend seulement de la position en z du plan considéré. Par exemple, pour le plan 1, un saut de (ma, na, pc) à $(ma, (n+1)a, pc)$ donnerait une

phase

$$f_{ij} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_i^j -Bz\hat{y} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{2\pi}{\phi_0} Bzy \Big|_{(n+1)a, pc}^{na, pc} = -\frac{2\pi}{\phi_0} Bac [np - (n+1)p] = \frac{2\pi\phi}{\phi_0 c} (pc) = \eta(pc), \quad (5.83)$$

où ϕ est le flux magnétique Bac . Pour le plan 2, p doit être remplacé par $p - 1$ et ainsi de suite pour les autres plans.

L'Hamiltonien devient

$$H_0 = - \sum_{k, k', s} \frac{1}{N} \sum_{j \in (\lambda=1)} \sum_i t_{ij} e^{if_{ij}} e^{-ik \cdot r_i} e^{ik' \cdot r_j} c_{ks}^{\dagger(\lambda)} c_{k's}^{(1)} + (1 \rightarrow 2) + (2 \rightarrow 3) + \dots + (l-1 \rightarrow l), \quad (5.84)$$

où $(1 \rightarrow 2)$ veut simplement dire que nous utilisons le plan 2 au lieu du plan 1.

$$\begin{aligned} H_0 = & - \sum_{k, k', s} \frac{1}{N} \sum_{j \in (\lambda=1)} \left[t e^{-ik \cdot (m+1, n)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} + t e^{-ik \cdot (m-1, n)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} \right. \\ & + t e^{-ik \cdot (m, n+1)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} e^{i\eta(pc)} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} + t e^{-ik \cdot (m, n-1)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} e^{-i\eta(pc)} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} \\ & + t' e^{-ik \cdot (m+1, n+1)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} e^{i\eta(pc)} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} + t' e^{-ik \cdot (m-1, n+1)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} e^{i\eta(pc)} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} \\ & + t' e^{-ik \cdot (m+1, n-1)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} e^{-i\eta(pc)} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} + t' e^{-ik \cdot (m-1, n-1)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} e^{-i\eta(pc)} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{k's}^{(1)} \\ & \left. + t_z e^{-ik \cdot (m, n)a} e^{ik' \cdot (m, n)a} c_{ks}^{\dagger(2)} c_{k's}^{(1)} + (1 \rightarrow 2) + (2 \rightarrow 3) + \dots + (l-1 \rightarrow l) \right]. \end{aligned} \quad (5.85)$$

Nous obtenons

$$\begin{aligned} H_0 = & - \sum_{k, s} c_{ks}^{\dagger(1)} c_{ks}^{(1)} \left[2t \cos(k_x a) + 2t \cos(k_y a - \eta pc) + 2t' \cos(k_x a + k_y a - \eta pc) \right. \\ & \left. + 2t' \cos(k_x a - k_y a + \eta pc) \right] - \sum_{k, s} t_z c_{ks}^{\dagger(2)} c_{ks}^{(1)} + (1 \rightarrow 2) + (2 \rightarrow 3) + \dots + (l-1 \rightarrow l). \end{aligned} \quad (5.86)$$

Nous pouvons définir une relation de dispersion pour le plan 1, 2 etc de la façon suivante

$$\begin{aligned} \varepsilon_k^{(1)} &= -2t \left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a - \eta pc) \right) - 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a - \eta pc) \\ \varepsilon_k^{(2)} &= -2t \left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a - \eta(p-1)c) \right) - 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a - \eta(p-1)c) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (5.87)$$

Considérons maintenant que le plan 1 est à l'origine en z , $p = 0$. La relation de dispersion pour le plan λ devient alors, avec la redéfinition de $\eta c \equiv \eta$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+(\lambda-1)\eta} = -2t \left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a - (\lambda-1)\eta) \right] - 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a - (\lambda-1)\eta). \quad (5.88)$$

Nous avons ainsi la forme suivante pour la partie cinétique de l'Hamiltonien

$$H_0 = \sum_{\lambda=1}^l \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon_{\mathbf{k}+(\lambda-1)\eta} c_{\mathbf{k}s}^{\dagger(\lambda)} c_{\mathbf{k}s}^{(\lambda)} - t_z \sum_{\lambda=1}^{l-1} \sum_{\mathbf{k},s} \left(c_{\mathbf{k}s}^{\dagger(\lambda-1)} c_{\mathbf{k}s}^{(\lambda)} + (c.c) \right). \quad (5.89)$$

Nous pouvons maintenant définir comment effectuer la DMFT pour plusieurs plans. Dans notre modèle, la fonction de Green du réseau peut être écrite comme

$$G_{\lambda\lambda',s}^{latt}(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & -t_z & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -t_z & \alpha_2 & -t_z & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -t_z & \ddots & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \dots \end{pmatrix}^{-1} \quad (5.90)$$

où

$$\alpha_\lambda = i\omega_n - (\varepsilon_{\mathbf{k}+(\lambda-1)\eta} - \mu) + \gamma\eta\sigma - \Sigma_\lambda(i\omega_n), \quad (5.91)$$

où nous avons ajouté la possibilité de considérer le terme de Zeeman avec $\sigma = \pm 1$ et $\gamma = \frac{g\mu_B \hbar}{2\pi a c |e|}$. Si nous le considérons, nous devons conserver le spin dans la DMFT et doubler le nombre d'impuretés. Pour les cuprates, a est autour de 4\AA et c est autour de 15\AA . Avec $t = 0.35eV$ cela donne une valeur de $\gamma \approx 0.3t$. Nous pouvons considérer dans le calcul $a = 1$ et c est seulement présent dans γ . Comme d'habitude, nous pouvons tout considérer en unités de t . Pour le calcul, les paramètres à être fixés sont t', t_z, η, γ, U et μ . La relation d'auto-cohérence pour chaque plan est donnée par

$$G_{\lambda,s}^{imp}(i\omega_n) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_{\lambda\lambda,s}^{latt}(k, i\omega_n). \quad (5.92)$$

Avec celle-ci, nous pouvons maintenant calculer la fonction d'hybridation pour chaque plan et résoudre le problème d'impuretés de chaque plan.

Conclusion

Les objectifs de ce travail peuvent être séparés en deux projets distincts, mais complémentaires au niveau de l'utilisation exhaustive de la méthode non perturbative appelée théorie du champ moyen dynamique. Cette méthode est celle de choix lorsque nous voulons étudier l'effet de la physique de Mott sur les propriétés physiques, ce qui est bien le concept principal derrière ce travail.

Dans la première étude, nous voulions mieux comprendre le pouvoir thermoélectrique (S) dans les isolants de Mott dopés. Le Monte Carlo quantique en temps continu (CTQMC) est une méthode puissante et numériquement exacte. Mais, sa complexité numérique et la nécessité de procéder à des prolongements analytiques, mal définis numériquement, pour calculer les propriétés de transport, rend son utilisation difficile. Nous avons ainsi premièrement modifié une méthode approximative pour résoudre le problème intermédiaire d'impureté, la théorie des perturbations itérées (IPT- D) pour que celle-ci puisse être utilisée à couplage très fort, ce qui était auparavant impossible. La communauté dispose maintenant d'une méthode qualitativement d'intérêt, extrêmement rapide et applicable au cas des isolants de Mott dopés. Cela a été le sujet du Chapitre 2. Grâce à cette méthode, nous avons pu calculer avec les formules de Kubo, le pouvoir thermoélectrique pour une gamme exhaustive de densités électroniques et de températures. De la complication à procéder au prolongement analytique des résultats de CTQMC, naît aussi la nécessité de trouver des approximations fiables pour le calcul de pouvoir thermoélectrique. Deux propositions ont été discutées et testées. La première méthode consistait à calculer plutôt la réponse à fréquence infinie (S^* et S^{**}) en espérant obtenir de l'information sur la limite DC puisque le pouvoir thermoélectrique est donné par un quotient de deux fonctions de transport. La deuxième méthode consistait plutôt à intervertir l'ordre dans lequel les limites $q \rightarrow 0$ et $\omega \rightarrow 0$ sont considérées par rapport au cas Kubo (S_{Kelvin}). Ces calculs ont été le sujet du Chapitre 3 où nous avons comparé S^* , S^{**} et S_{Kelvin} calculés par

CTQMC avec S_{Kubo} calculé par IPT- D . Il en ressort que chacune des approximations a ses zones de validité. La limite infinie S^{**} est un bon choix à basse température quand le système est cohérent et le transport dominé par des quasi-particules bien définies. À plus haute température, quand les quasi-particules disparaissent complètement du système et que celui-ci devient incohérent, S_{Kelvin} devient un choix intéressant et montre que dans cette région du diagramme de phase le pouvoir thermoélectrique est bien représenté par une quantité thermodynamique, soit le taux de changement de l'entropie en fonction de la densité électronique.

Dans la deuxième étude, explicitée au Chapitre 5, nous voulions développer une approche non perturbative pouvant considérer la physique de Mott en présence d'un champ magnétique agissant sur le degré de liberté orbital des électrons et non seulement sur le degré de spin. Jusqu'à présent, l'effet de la physique des fortes corrélations était incorporé en considérant que le système subissait une reconstruction de la surface de Fermi, ce qui définissait un Hamiltonien champ moyen effectif sans interaction. L'effet du champ B était appliqué à ce H sans interaction. Nous avons dérivé formellement les équations de la DMFT. Nous avons obtenu le très important résultat que le problème effectif d'impureté restait le même, et que par conséquent les solveurs d'impuretés standards comme la CTQMC peuvent toujours être utilisés. La relation d'auto-cohérence reste aussi la même, mais l'effet du champ magnétique doit être complètement considéré dans la fonction de Green locale. Nous avons aussi considéré un autre cas où des plans bidimensionnels sont empilés dans la direction z et un champ magnétique est appliqué dans la direction x . L'influence du champ et de la physique de Mott peuvent donc être analysés pour des nanostructures.

À long terme, il serait nécessaire d'étudier les méthodes approximatives du calcul du pouvoir thermoélectrique avec la théorie du champ moyen dynamique sur amas. Il est nécessaire de comprendre comment se comportent ces méthodes lorsque la phase à basse température n'est pas un liquide de Fermi ou une phase similaire. De plus, le comportement de ces approximations suite à l'ajout du désordre en plus de l'interaction est une avenue à explorer. Dans le cas de l'effet orbital du champ magnétique, nous avons une définition formelle de la méthode, mais en pratique nous sommes toujours en présence d'un problème d'algorithmique à résoudre. De plus, pour le moment, nous

avons implémenté la méthode applicable aux nanostructures pour deux plans seulement. Il faudrait étendre la mise en oeuvre au cas supérieur à deux plans, ce qui est plutôt direct. Évidemment, il serait aussi intéressant de généraliser notre résultat pour l'effet orbital du champ magnétique aux méthodes sur amas.

Annexe A

Compléments de calculs pour S^*

Les compléments de calculs pour S^* non présentés dans le Chapitre 1, sont donnés ici.

A.1 Limite $T \rightarrow 0$ de L_{12}^*

Nous étudions L_{12}^* à $T = 0$ donné par l'Eq. (1.163) qui nous recopions ici

$$L_{12}^* = \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \int_{-\infty}^0 \omega A_{k\sigma}(\omega) d\omega + \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \int_{-\infty}^0 A_{k\sigma}(\omega) d\omega. \quad (\text{A.1})$$

Nous regardons en premier le cas simple sans interaction. La fonction spectrale devient

$$A_{k\sigma}(\omega) = \delta(\omega - (\varepsilon_k - \mu)). \quad (\text{A.2})$$

Nous obtenons pour le premier terme de l'Eq. (A.1)

$$\int_{-\infty}^0 A_{\sigma}(k, \omega) d\omega = \int_{-\infty}^0 \delta(\omega - (\varepsilon_k - \mu)) d\omega = \Theta(0 - (\varepsilon_k - \mu)) = \Theta(\mu - \varepsilon_k), \quad (\text{A.3})$$

où Θ est la fonction échelon d'Heaviside.

L'autre intégrale de l'Eq. (A.1) donne

$$\int_{-\infty}^0 \omega A_{k\sigma}(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^0 \omega \delta(\omega - (\varepsilon_k - \mu)) d\omega = (\varepsilon_k - \mu) \Theta(\mu - \varepsilon_k). \quad (\text{A.4})$$

Alors

$$L_{12}^* = \sum_{k,\sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} (\varepsilon_k - \mu) \Theta(\mu - \varepsilon_k) + \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \Theta(\mu - \varepsilon_k). \quad (\text{A.5})$$

Regardons le premier terme à droite de l'égalité de l'Eq. (A.5). Nous convertissons la somme en intégrales et intégrons ensuite par partie

$$\sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} (\varepsilon_k - \mu) \Theta(\mu - \varepsilon_k) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_n \dots \int dk_y \int dk_x \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} (\varepsilon_k - \mu) \Theta(\mu - \varepsilon_k). \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} u &= (\varepsilon_k - \mu) \Theta(\mu - \varepsilon_k) \\ du &= \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \Theta(\mu - \varepsilon_k) dk_x + (\varepsilon_k - \mu) \frac{\partial \Theta(\mu - \varepsilon_k)}{\partial k_x} dk_x \\ &= \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \Theta(\mu - \varepsilon_k) dk_x + (\varepsilon_k - \mu) \frac{\partial \Theta(\mu - \varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} dk_x \\ dv &= \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} dk_x \\ v &= \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Par conséquent l'Eq. (A.6) devient

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_n \dots \int dk_y \left[(\varepsilon_k - \mu) \Theta(\mu - \varepsilon_k) \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \Big|_{-\pi}^{\pi} - \int dk_x \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \Theta(\mu - \varepsilon_k) \right. \\ \left. + \int dk_x \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 (\varepsilon_k - \mu) \delta(\mu - \varepsilon_k) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Le premier terme est nul puisque nous regardons les extrémités de la zone de Brillouin pour k_x et la fonction échelon est nulle là sauf si la bande est complètement remplie et dans ce cas, la valeur de la fonction n'est pas bien définie, mais la dérivée de ε_k à $k_x = \pi$ et $k_x = -\pi$ est nulle de toute façon et donc ce terme est zéro. Regardons maintenant le troisième terme de l'Eq. (A.8)

$$\frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_n \dots \int dk_y \int dk_x \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 (\varepsilon_k - \mu) \delta(\mu - \varepsilon_k). \quad (\text{A.9})$$

La fonction delta est nulle sauf quand $\mu - \varepsilon_k$ est nul, mais c'est à ce point qu'une autre partie de l'intégrand i.e. $(\varepsilon_k - \mu)$ est nul. L'intégrand est donc toujours égal à zéro; l'intégrale est nulle.

Comme seul le deuxième terme de l'Eq. (A.8) survit, le premier terme de l'Eq. (A.5) peut se réécrire

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_n \dots \int dk_y \int dk_x \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} (\varepsilon_k - \mu) \Theta(\mu - \varepsilon_k) \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_n \dots \int dk_y \int dk_x \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \Theta(\mu - \varepsilon_k) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

et nous pouvons reconvertir cette expression en une somme sur k et nous obtenons finalement de l'Eq. (A.5) le L_{12}^* sans interaction à température nulle

$$L_{12}^* = - \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \Theta(\mu - \varepsilon_k) + \sum_{k,\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \Theta(\mu - \varepsilon_k) = 0, \quad (\text{A.11})$$

comme nous nous y attendions.

Regardons maintenant le deuxième cas le plus simple soit une partie imaginaire constante de la *self-energy* et pas de partie réelle. C'est le cas de la diffusion de type s par des impuretés statiques par exemple. La partie réelle de la *self-energy* est constante et absorbée dans le potentiel chimique. La fonction spectrale peut donc être écrite, avec Γ la partie imaginaire de la *self-energy*, comme

$$A_k(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - (\varepsilon_k - \mu))^2 + \Gamma^2} \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - x)^2 + \Gamma^2}. \quad (\text{A.12})$$

Nous commençons par regarder le terme à droite de l'égalité de l'Eq. (A.1) et résolvons les deux intégrales sur ω .

1.

$$\begin{aligned}
\frac{\Gamma}{\pi} \int_{-\infty}^0 \frac{\omega d\omega}{(\omega - x)^2 + \Gamma^2} &= \frac{\Gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{-x} \frac{(u + x) du}{u^2 + \Gamma^2} \\
&= \frac{\Gamma}{\pi} \left[\frac{1}{2} \ln(u^2 + \Gamma^2) \Big|_{-\infty}^{-x} + \frac{x}{\Gamma} \tan^{-1} \left(\frac{u}{\Gamma} \right) \Big|_{-\infty}^{-x} \right] \\
&= \frac{\Gamma}{2\pi} \ln(x^2 + \Gamma^2) - \frac{\Gamma}{2\pi} \ln(\infty) + \frac{x}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right) \quad (\text{A.13}) \\
&\quad - \frac{x}{\pi} \tan^{-1}(-\infty) \\
&= \frac{\Gamma}{2\pi} \ln(x^2 + \Gamma^2) + cst + \frac{x}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right) + \frac{x}{2},
\end{aligned}$$

où, même si à proprement parler $\ln(\infty) \rightarrow \infty$, nous avons considéré ce terme comme une constante, comme si nous choissions une fréquence de coupure finie. Nous verrons plus bas pourquoi nous avons adopté ce choix.

2.

$$\begin{aligned}
\frac{\Gamma}{\pi} \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{(\omega - x)^2 + \Gamma^2} &= \frac{\Gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{-x} \frac{du}{u^2 + \Gamma^2} \\
&= \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{u}{\Gamma} \right) \Big|_{-\infty}^{-x} \quad (\text{A.14}) \\
&= \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right) + \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

Ainsi, le terme de droite de l'Eq. (A.1) peut être écrit

$$\begin{aligned}
&\sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \left[\frac{\Gamma}{2\pi} \ln(x^2 + \Gamma^2) \right] + \underbrace{cst}_{=0} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} + \underbrace{\frac{1}{\pi} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} x \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right)}_2 + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} x}_1 \\
&+ \frac{1}{\pi} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right) + \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2. \quad (\text{A.15})
\end{aligned}$$

Nous voyons bien pourquoi nous avons choisi de considérer le terme contenant $\ln(\infty)$ comme une constante. En effet, la somme sur k donne zéro et nous pouvons alors l'oublier si nous conservons la supposition qu'une fréquence de coupure fut ajoutée pour ce terme. Nous allons maintenant étudier les termes appelés 1 et 2 dans l'équation précédente.

1.

$$\frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} x \rightarrow \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^n} \int d\mathbf{k} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} (\varepsilon_k - \mu). \quad (\text{A.16})$$

Nous pouvons intégrer par partie en choisissant $u = (\varepsilon_k - \mu)$ et $dv = \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} dk_x$. Nous obtenons

$$= -\frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^n} \int d\mathbf{k} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \rightarrow -\frac{1}{2} \frac{1}{\Omega} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \quad (\text{A.17})$$

2.

$$\frac{1}{\pi} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} x \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{1}{(2\pi)^n} \int d\mathbf{k} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} x \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right). \quad (\text{A.18})$$

Cette fois encore nous intégrons par partie, en prenant $u = x \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right)$ et $dv = \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} dk_x$. Nous obtenons

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_n \dots \int dk_y \left[- \int dk_x \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \left(\tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right) - \frac{x/\Gamma}{1 + (x/\Gamma)^2} \right) \right] \\ & \rightarrow -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Omega} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \tan^{-1} \left(\frac{-x}{\Gamma} \right) + \frac{1}{\pi} \frac{1}{\Omega} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \frac{x/\Gamma}{1 + (x/\Gamma)^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Nous remplaçons l'Eq. (A.17) et l'Eq. (A.19) dans l'Eq. (A.15) et nous obtenons

$$\sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \left[\frac{\Gamma}{2\pi} \ln(x^2 + \Gamma^2) \right] + \frac{1}{\pi} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \frac{x/\Gamma}{1 + (x/\Gamma)^2}. \quad (\text{A.20})$$

Nous intégrons maintenant le premier terme de l'Eq. (A.20) par partie en prenant $u = \ln(x^2 + \Gamma^2)$ et $dv = \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} dk_x$. Nous obtenons pour ce terme

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \left[\frac{\Gamma}{2\pi} \ln(x^2 + \Gamma^2) \right] & \rightarrow \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_y \left[- \int dk_x \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \frac{2x}{\Gamma^2 (1 + (x/\Gamma)^2)} \right] \\ & \rightarrow -\frac{1}{\pi} \sum_k \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \frac{x/\Gamma}{1 + (x/\Gamma)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Nous voyons alors que l'Eq. (A.20) donne zéro et comme dans le cas d'une fonction spectrale delta, l'Eq. (A.1) (Eq. (1.163)) est nulle en présence d'impuretés statiques.

Nous pouvons aussi regarder le terme en T^2 dans l'Eq. (1.162). Dans ce cas, de la définition de l'Eq. (1.161) nous avons $\eta(k) = 0$, $\kappa(k) = 2\pi(x/\Gamma)$ et comme d'habitude $A(k, 0) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2}$. Par conséquent,

$$L_{12}^* = a_1(k_B T)^2 \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \frac{2}{\pi} (x/\Gamma) \frac{\Gamma^2}{(x^2 + \Gamma^2)^2} \right]. \quad (\text{A.22})$$

En intégrant le premier terme par partie de la même façon que plus haut, nous obtenons

$$L_{12}^* = \frac{4\pi a_1(k_B T)^2}{\Gamma} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) A^2(k, 0), \quad (\text{A.23})$$

où, comme défini plus haut, $A(k, 0) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2}$.

A.2 Comportement pour un liquide de Fermi

A.2.1 L_{12}^{*1}

Nous débutons à partir de l'Eq. (1.175) que nous recopions ici

$$L_{12}^{*1} = 2 \frac{\pi^2}{6} (k_B)^2 \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} A_{\mathbf{k}}(0) + \frac{2\pi Z^{-1}}{\Gamma} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu}) A_{\mathbf{k}}^2(0) \right]. \quad (\text{A.24})$$

Nous avons

$$A_{\mathbf{k}}(0) = \frac{\Gamma}{\pi (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu})^2 + \Gamma^2} \quad (\text{A.25})$$

et

$$\frac{\partial A_{\mathbf{k}}(0)}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} = -\frac{2\pi(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu})}{\Gamma} A^2(\mathbf{k}, 0), \quad (\text{A.26})$$

et donc

$$\begin{aligned} L_{12}^{*1} &= 2 \frac{\pi^2}{6} (k_B)^2 \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} A_{\mathbf{k}}(0) - Z^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial A_{\mathbf{k}}(0)}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right] \\ &= 2 \frac{\pi^2}{6} (k_B)^2 \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} A_{\mathbf{k}}(0) - Z^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial A_{\mathbf{k}}(0)}{\partial k_x} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Nous pouvons intégrer le deuxième terme par partie en choisissant $u = \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x}$, $du = \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} dk_x$ et $dv = \frac{\partial A_k(0)}{\partial k_x} dk_x$, $v = A(\mathbf{k}, 0)$. Nous obtenons

$$L_{12}^{*1} = 2 \frac{\pi^2}{6} (k_B)^2 [1 + Z^{-1}] \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} A_k(0). \quad (\text{A.28})$$

Nous pouvons réécrire

$$\sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} A_k(0) = \int d\varepsilon Y(\varepsilon) A(\varepsilon, 0), \quad (\text{A.29})$$

où

$$Y(\varepsilon) = \frac{1}{\Omega} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (\text{A.30})$$

Réécrivons

$$\int d\varepsilon Y(\varepsilon) A(\varepsilon, 0) = \int d\varepsilon Y(\varepsilon) \frac{\Gamma}{\pi (\varepsilon_k - \tilde{\mu})^2 + \Gamma^2}. \quad (\text{A.31})$$

À basse température, $\Gamma \rightarrow 0$ et nous allons utiliser la définition

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} = \delta(x) \quad (\text{A.32})$$

pour obtenir pour faible T

$$\int d\varepsilon Y(\varepsilon) \frac{\Gamma}{\pi (\varepsilon_k - \tilde{\mu})^2 + \Gamma^2} \rightarrow \int d\varepsilon Y(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \tilde{\mu}) = Y(\tilde{\mu}). \quad (\text{A.33})$$

A.2.2 L_{11}^{*0}

Nous continuons ensuite avec l'Eq.(1.177) que nous recopions ici

$$L_{11}^{*0} = 2 \int_{-\infty}^0 \int d\varepsilon Y(\varepsilon) A(\varepsilon, \omega). \quad (\text{A.34})$$

Comme dans la thèse de Palsson [92], nous écrivons la fonction spectrale du liquide de Fermi en terme de la variable $x = \beta\omega$ comme

$$A(\varepsilon, x) = \frac{\Gamma \left[1 + \left(\frac{x}{\pi} \right)^2 \right]}{\left[\frac{x k_B T}{2} + \tilde{\mu} - \varepsilon \right]^2 + \Gamma^2 \left[1 + \left(\frac{x}{\pi} \right)^2 \right]^2}. \quad (\text{A.35})$$

$$L_{11}^{*0} = 2\frac{\pi}{\beta} \int_{-\infty}^0 \int d\varepsilon Y(\varepsilon) \frac{\Gamma \left[1 + \left(\frac{x}{\pi} \right)^2 \right]}{\left[\frac{xk_B T}{Z} + \tilde{\mu} - \varepsilon \right]^2 + \Gamma^2 \left[1 + \left(\frac{x}{\pi} \right)^2 \right]^2} + L_{11}^{*0,inc}. \quad (\text{A.36})$$

Nous approximons

$$\frac{1}{\pi} \frac{\Gamma \left[1 + \left(\frac{x}{\pi} \right)^2 \right]}{\left[\frac{xk_B T}{Z} + \tilde{\mu} - \varepsilon \right]^2 + \Gamma^2 \left[1 + \left(\frac{x}{\pi} \right)^2 \right]^2} \rightarrow \delta \left(\frac{xk_B T}{Z} + \tilde{\mu} - \varepsilon \right) \quad (\text{A.37})$$

et nous obtenons

$$L_{11}^{*0} = 2\frac{\pi}{\beta} \int_{-\infty}^0 \int dx Y \left(\frac{xk_B T}{Z} + \tilde{\mu} \right) + L_{11}^{*0,inc}. \quad (\text{A.38})$$

Nous changeons de variable $y = \frac{xk_B T}{Z} + \tilde{\mu}$, $dy = \frac{k_B T}{Z} dx$ et obtenons

$$L_{11}^{*0} = 2\pi Z \int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} Y(y) dy + L_{11}^{*0,inc}. \quad (\text{A.39})$$

Nous pouvons aller un peu plus loin en réalisant que nous avons la relation générale entre $Y(\varepsilon)$ et $X(\varepsilon)$

$$\int_{-\infty}^{\tilde{\mu}} Y(y) dy = X(\tilde{\mu}), \quad (\text{A.40})$$

ce qui nous permet d'écrire

$$L_{11}^{*0} = 2\pi (ZX(\tilde{\mu}) + L_{11}^{*0,inc}). \quad (\text{A.41})$$

Annexe B

Cubique à face centrée dans le cas sans interaction

Dans l'Annexe C du Chapitre 2, nous avons montré comment nous pouvons calculer de façon astucieuse par Monte Carlo la densité d'états sans interaction $N_0(\varepsilon)$ et la fonction de transport $X(\varepsilon)$. Nous allons ici compléter cette discussion en définissant deux températures de Fermi spécifiques pour le pouvoir thermoélectrique du fcc 3d sans interaction. Cela permet de définir les températures appelées T_i sur la Fig.1 du Chapitre 3 et représentées par des \triangleright . Nous allons par la suite calculer avec la méthode Monte Carlo de l'Annexe C du Chapitre 2 les fonctions manquantes pour obtenir les valeurs de ces températures de Fermi.

B.1 Température de Fermi

Nous allons définir les températures de Fermi qui sont pertinentes pour le pouvoir thermoélectrique sur un réseau TB. Nous allons nous y prendre en écrivant l'expression sans interaction du pouvoir thermoélectrique à basse température comme

$$\begin{aligned}
 S &\approx \text{Sgn}(S) \frac{k_B \pi^2}{|e|} \frac{T}{2 T_f^{(1)}} \left(1 - \left(\frac{T}{T_f^{(2)}} \right)^2 \right) \\
 &\equiv aT \left(1 - \left(\frac{T}{T_f^{(2)}} \right)^2 \right).
 \end{aligned}
 \tag{B.1}$$

De cette façon, la température de fermi $T_f^{(2)}$ est définie comme la première correction au comportement linéaire en T de S . Ce $T_f^{(2)}$ va donner l'échelle d'énergie pertinente pour S , qui n'est pas universelle et égale à ε_f comme nous pourrions le penser à partir d'un gaz d'électrons libres sans réseau.

Nous pouvons écrire dans l'approche de Boltzmann

$$S = -\frac{1}{|e|T} \frac{\sum_k \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k}\right) \tau(\varepsilon_k) v_k^2 (\varepsilon_k - \mu)}{\sum_k \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k}\right) \tau(\varepsilon_k) v_k^2}. \quad (\text{B.2})$$

Si nous approchons les processus de diffusion par des impuretés statiques, $\tau(\varepsilon_k) = \tau$, nous pouvons écrire

$$S = -\frac{1}{|e|T} \frac{\int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) (\varepsilon - \mu) \sum_k v_k^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}{\int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) \sum_k v_k^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)} \equiv -\frac{1}{|e|T} \frac{\int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) (\varepsilon - \mu) X(\varepsilon)}{\int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) X(\varepsilon)}, \quad (\text{B.3})$$

où

$$X(\varepsilon) = \sum_k v_k^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (\text{B.4})$$

Nous souhaitons maintenant étudier le régime basse température de cette équation. Nous débutons en intégrant par partie les deux intégrales l'Eq. (B.3). Pour celle du numérateur, nous supposons $u = (\varepsilon - \mu)X(\varepsilon)$, $du = (X(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon))d\varepsilon$, $dv = \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon$ et $v = -f$. Nous obtenons, sachant que la fonction $X(\varepsilon)$ est nulle à $\pm\infty$

$$\int f(\varepsilon)(X(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon))d\varepsilon. \quad (\text{B.5})$$

Pour le dénominateur, en adoptant la même approche nous obtenons

$$\int f(\varepsilon)X'(\varepsilon)d\varepsilon \quad (\text{B.6})$$

Le pouvoir thermoélectrique (Eq. (B.3)) devient

$$S = -\frac{1}{|e|T} \frac{\int f(\varepsilon)(X(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon))d\varepsilon}{\int f(\varepsilon)X'(\varepsilon)d\varepsilon}. \quad (\text{B.7})$$

Nous avons maintenant une expression de la forme $\int f(\varepsilon)H(\varepsilon)d\varepsilon$ à la fois pour le numérateur et le dénominateur et nous pouvons appliquer un développement de Sommerfeld pour obtenir le comportement à basse température. Le développement de Sommerfeld est

$$\int f(\varepsilon)H(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\mu} H(\varepsilon)d\varepsilon + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (k_B T)^{2n} \frac{d^{2n-1}}{d\varepsilon^{2n-1}} H(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon=\mu}, \quad (\text{B.8})$$

où $a_n = (2 - \frac{1}{2^{2(n-1)}}) \zeta(2n)$. Par exemple, $a_1 = \frac{\pi^2}{6}$ and $a_2 = \frac{7\pi^4}{360}$.

Mais, ce n'est pas la fin de l'histoire. En effet, le potentiel chimique μ a lui aussi une dépendance en température qui doit être considérée. Dans la limite de petit T , pour un système sans interaction, μ est donné par

$$\mu = \varepsilon_f - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)}, \quad (\text{B.9})$$

où $N_0(\varepsilon)$ est la densité d'états et ε_f est le niveau de fermi. Nous utiliserons cette expression pour le potentiel chimique plus bas.

Nous utilisons maintenant le développement de Sommerfeld jusqu'à l'ordre T^4 dans l'Eq. (B.5). Nous obtenons

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\mu} (X(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon))d\varepsilon + a_1 (k_B T)^2 \frac{d}{d\varepsilon} (X(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon))_{\varepsilon=\mu} \\ & + a_2 (k_B T)^4 \frac{d^3}{d\varepsilon^3} (X(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon))_{\varepsilon=\mu} + O(T^6) \\ & = \int_{-\infty}^{\mu} (X(\varepsilon) + (\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon))d\varepsilon + 2a_1 (k_B T)^2 X'(\mu) + 4a_2 (k_B T)^4 X'''(\mu) + O(T^6). \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

L'intégrale restante est nulle. Nous le voyons facilement si nous intégrons par partie le deuxième terme de l'intégral i.e. $(\varepsilon - \mu)X'(\varepsilon)$. En effet, en choisissant $u = \varepsilon - \mu$ et $dv = X'(\varepsilon)d\varepsilon$ nous obtenons $-\int_{-\infty}^{\mu} X(\varepsilon)d\varepsilon$ qui est exactement le négatif du premier terme. Par conséquent, l'Eq. (B.10) devient

$$2a_1 (k_B T)^2 X'(\mu) + 4a_2 (k_B T)^4 X'''(\mu) + O(T^6). \quad (\text{B.11})$$

Nous devons maintenant extraire la dépendance en température de $X(\mu)$. C'est possible en procédant au développement de Taylor de X' et X'''

$$\begin{aligned} X'(\mu) &\approx X'(\varepsilon_f) + (\mu - \varepsilon_f)X''(\varepsilon_f) \\ X'''(\mu) &\approx X'''(\varepsilon_f) + (\mu - \varepsilon_f)X^{IV}(\varepsilon_f) \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

et nous pouvons utiliser l'Eq. (B.9) pour $\mu - \varepsilon_f$.

L'Eq. (B.11) devient

$$\begin{aligned} &2a_1(k_B T)^2 \left[X'(\varepsilon_f) - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X''(\varepsilon_f) \right] \\ &+ 4a_2(k_B T)^4 \left[X'''(\varepsilon_f) - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X^{IV}(\varepsilon_f) \right] \\ &= 2a_1 X'(\varepsilon_f) (k_B T)^2 - \frac{2a_1 \pi^2}{6} \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X''(\varepsilon_f) (k_B T)^4 + 4a_2 X'''(\varepsilon_f) (k_B T)^4 + O(T^6) \\ &= 2a_1 k_B^2 X'(\varepsilon_f) T^2 - \left[\frac{2a_1 \pi^2 k_B^4}{6} \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X''(\varepsilon_f) - 4a_2 k_B^4 X'''(\varepsilon_f) \right] T^4 + O(T^6) \\ &= \frac{\pi^2 k_B^2 X'(\varepsilon_f)}{3} T^2 - \left[\frac{\pi^4 k_B^4}{18} \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X''(\varepsilon_f) - \frac{7\pi^4 k_B^4 X'''(\varepsilon_f)}{90} \right] T^4 + O(T^6). \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Pour l'Eq. (B.6), le développement de Sommerfeld donne un terme d'ordre zéro non nul et nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \int f(\varepsilon) X'(\varepsilon) d\varepsilon &\approx \int_{-\infty}^{\mu} X'(\varepsilon) d\varepsilon + a_1 (k_B T)^2 X''(\mu) + a_2 (k_B T)^4 X^{IV}(\mu) \\ &= X(\mu) + a_1 (k_B T)^2 X''(\mu) + a_2 (k_B T)^4 X^{IV}(\mu). \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Une fois encore, nous prenons en compte μ en utilisant un développement de Taylor

$$\begin{aligned} X(\mu) &\approx X(\varepsilon_f) + (\mu - \varepsilon_f)X'(\varepsilon_f) \approx X(\varepsilon_f) - \frac{\pi^2}{6} \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X'(\varepsilon_f) (k_B T)^2 \\ X''(\mu) &\approx X''(\varepsilon_f) - \frac{\pi^2}{6} \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X'''(\varepsilon_f) (k_B T)^2. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Cela nous permet d'écrire l'Eq. (B.14) comme

$$\begin{aligned} \int f(\varepsilon)X'(\varepsilon)d\varepsilon \approx & X(\varepsilon_f) - \frac{\pi^2}{6} \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X'(\varepsilon_f)(k_B T)^2 + \frac{\pi^2}{6} X''(\varepsilon_f)(k_B T)^2 \\ & - \frac{\pi^2}{6} \frac{N'_0(\varepsilon_f)}{N_0(\varepsilon_f)} X'''(\varepsilon_f)(k_B T)^4 + \frac{7\pi^4}{360} X^{IV}(\varepsilon_f)(k_B T)^4 + O(T^6). \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Nous pouvons donc écrire S sous la forme

$$\begin{aligned} S \approx & -\frac{1}{|e|T} \frac{AT^2 + BT^4}{C + DT^2 + ET^4} \approx -\frac{1}{|e|T} \left(\frac{A}{C} T^2 + \frac{BC - AD}{C^2} T^4 + O(T^6) \right) \\ = & -\frac{1}{|e|} \frac{A}{C} T \left[1 - \frac{AD - BC}{AC} T^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

où nous avons développé le dénominateur. Nous voyons que pour obtenir des termes seulement jusqu'à l'ordre T^4 , le terme en T^4 au dénominateur n'est pas utilisé.

Il est maintenant très facile d'assigner les valeurs aux termes A, B, C, D et donc

$$\left(T_f^{(2)} \right)^2 = \frac{AC}{AD - BC}. \quad (\text{B.18})$$

Nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} \left(k_B T_f^{(2)} \right)^2 = & \frac{6N_0(\varepsilon_f)X(\varepsilon_f)X'(\varepsilon_f)}{\pi^2 \left[N_0(\varepsilon_f)X'(\varepsilon_f)X''(\varepsilon_f) - N'_0(\varepsilon_f)X'^2(\varepsilon_f) + N'_0(\varepsilon_f)X(\varepsilon_f)X'''(\varepsilon_f) - \frac{7}{5}N_0(\varepsilon_f)X(\varepsilon_f)X^{IV}(\varepsilon_f) \right]}. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Nous voyons que l'expression obtenue dépend de $N_0(\varepsilon)$, $X(\varepsilon)$ et leurs dérivées. Ces fonctions sont problématiques parce qu'elles contiennent des fonctions delta et des dérivées de celles-ci.

Avant de continuer nous devons discuter d'un petit détail. En effet, dans la dérivation ci-dessus, nous avons fixé le terme en T^2 pour qu'il soit $-\frac{T^2}{\left(T_f^{(2)} \right)^2}$. Mais ce terme doit changer de signe quelque part en fonction du remplissage. À ce point, nous aurons plutôt $\frac{T^2}{\left(T_f^{(2)} \right)^2}$. Par conséquent, le $\left(T_f^{(2)} \right)^2$ défini dans l'Eq. (B.19) peut être négatif même si, en prin-

cipe, ce n'est pas une température, mais son carré. $(T_f^{(2)})^2$ doit donc être défini comme $(T_f^{(2)})^2 = \sqrt{|(T_f^{(2)})^2|}$. De cette manière, lorsque $(T_f^{(2)})^2$ tend vers zéro, cela indique que le signe du terme en T^2 change. Le résultat pour $(T_f^{(2)})^2$ est présenté à la Fig. B.1 en fonction de l'énergie de Fermi et à la Fig. B.2 en fonction de la densité électronique. Les calculs nécessaires pour obtenir cette figure sont expliqués dans les deux sections suivantes.

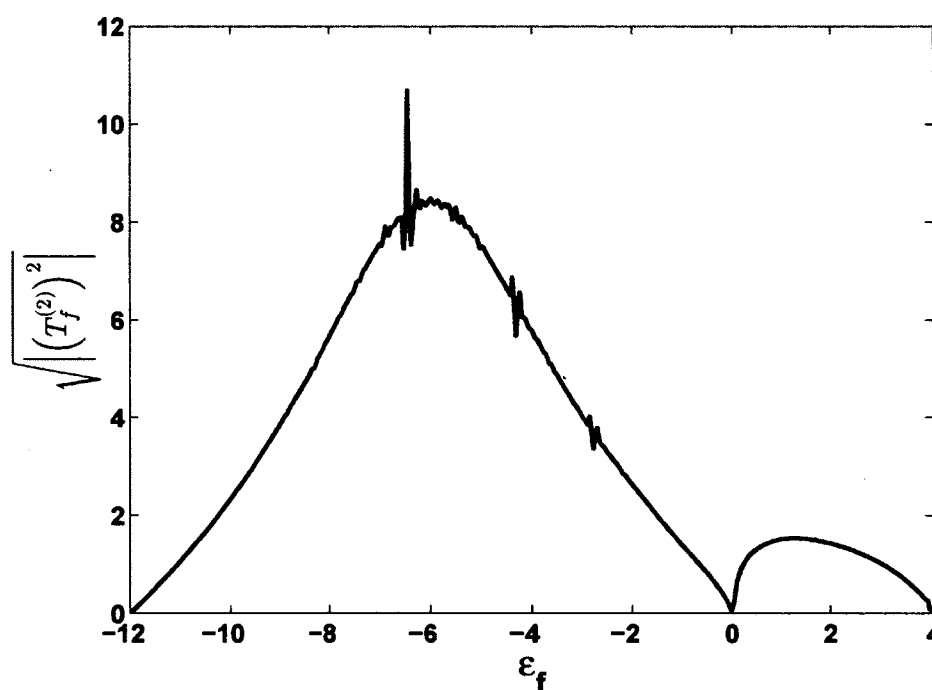


FIGURE B.1 – $T_f^{(2)}$ en fonction de l'énergie de Fermi

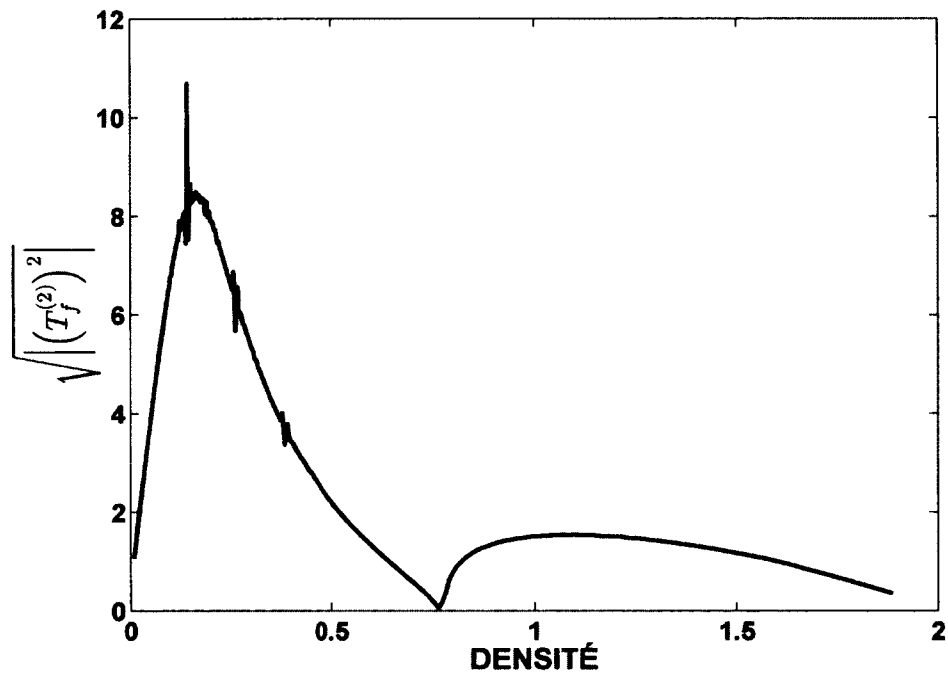


FIGURE B.2 - $T_f^{(2)}$ en fonction de la densité

B.2 Dérivées de la Densité d'états et de la fonction de transport

Regardons premièrement $X'(\varepsilon)$. Nous pouvons montrer que la dérivée de cette fonction $X(\varepsilon)$ est donnée par une autre fonction du transport, soit $Y(\varepsilon)$ i.e

$$X'(\varepsilon) = Y(\varepsilon) = \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (\text{B.20})$$

C'est bien la forme $\sum_k F(\mathbf{k})\delta(\varepsilon - \varepsilon_f)$ ce qui permet de calculer $X'(\varepsilon)$ avec l'approche Monte Carlo de l'Annexe C du Chapitre 2.

Pour les autres dérivées, il ne fut pas possible de trouver des expressions utiles où les dérivées de la fonction delta auraient été éliminées. Nous allons les calculer approximativement en utilisant des expressions aux différences finies comme approximations des dérivées. Cela devrait être relativement correct aux endroits où la fonction est lisse i.e loin des bords de bande. Ainsi, nous allons à la fin seulement considérer des ε_f qui ne sont pas trop près des bords de bande pour le calcul de $(T_f^{(2)})^2$.

Les expressions qui doivent être calculées sont

$$\begin{aligned} X''(\varepsilon) &= Y'(\varepsilon) = \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{\partial \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}{\partial \varepsilon} \\ X'''(\varepsilon) &= Y''(\varepsilon) = \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}{\partial \varepsilon^2} \\ N'_0(\varepsilon) &= \sum_k \frac{\partial \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}{\partial \varepsilon}. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Si nous remplaçons les dérivées par des différences finies d'ordre deux, nous pouvons écrire

$$\delta'(\varepsilon - \varepsilon_k) \approx \frac{\delta(\varepsilon + \Delta\varepsilon - \varepsilon_k) - \delta(\varepsilon - \Delta\varepsilon - \varepsilon_k)}{2\Delta\varepsilon} + O(\Delta\varepsilon^2) \quad (\text{B.22})$$

et

$$\delta''(\varepsilon - \varepsilon_k) \approx \frac{\delta(\varepsilon + \Delta\varepsilon - \varepsilon_k) - 2\delta(\varepsilon - \varepsilon_k) + \delta(\varepsilon - \Delta\varepsilon - \varepsilon_k)}{\Delta\varepsilon^2} + O(\Delta\varepsilon^2). \quad (\text{B.23})$$

Il existe des approximations de dérivées plus précises que l'ordre deux, mais leur utilisation est problématique pour le Monte Carlo puisque plus d'évaluations de fonctions sont nécessaires ce qui tend à augmenter le bruit dans le résultat. Nous essayons par conséquent la méthode avec le moins d'évaluations de fonctions possibles.

Si nous remplaçons les Eqs. (B.22) et (B.23) dans l'Eq. (B.21), nous obtenons des fonctions de la forme $\sum_k F(\mathbf{k})\delta(\varepsilon - \varepsilon_f)$ et nous pouvons appliquer le Monte Carlo déjà expliqué. Les résultats sont présentés dans les Figs B.3, B.4, B.5 et B.6. Chaque courbe a été calculée avec 1000 points d'énergie ε et un total de 4×10^{11} nombres aléatoires. La conclusion évidente est que le bruit induit par l'approximation des dérivées de la fonction delta est très importante une fois que nous intégrons ensemble toutes les fonctions pour obtenir $(T_f^{(2)})^2$ et le résultat est complètement bruyant. Cette approche est puissante pour calculer $N_0(\varepsilon)$ et $X(\varepsilon)$, mais peu utile pour $(T_f^{(2)})^2$ puisque $X'''(\varepsilon)$ est vraiment très bruyante.

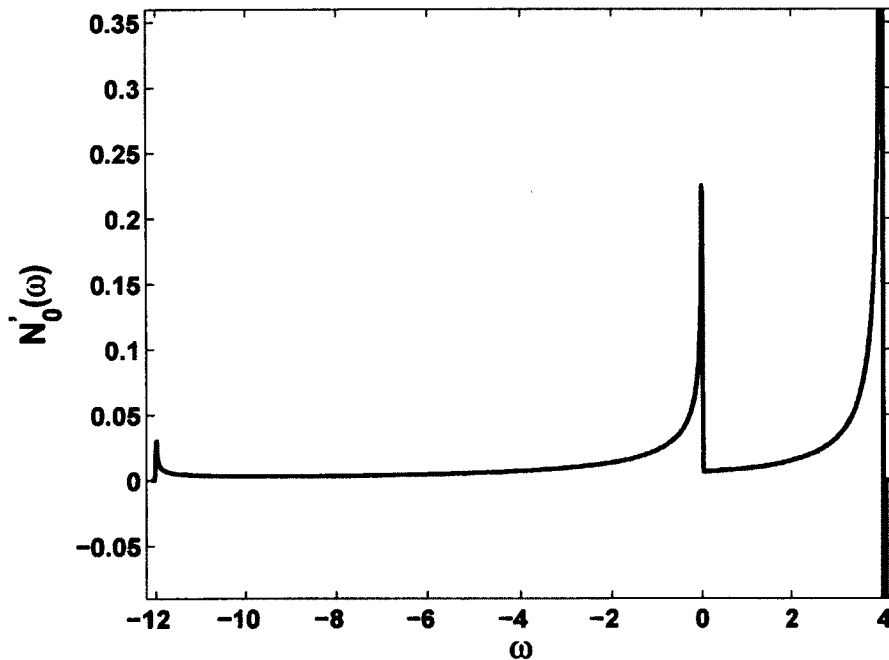


FIGURE B.3 – Fonction $N'_0(\omega)$

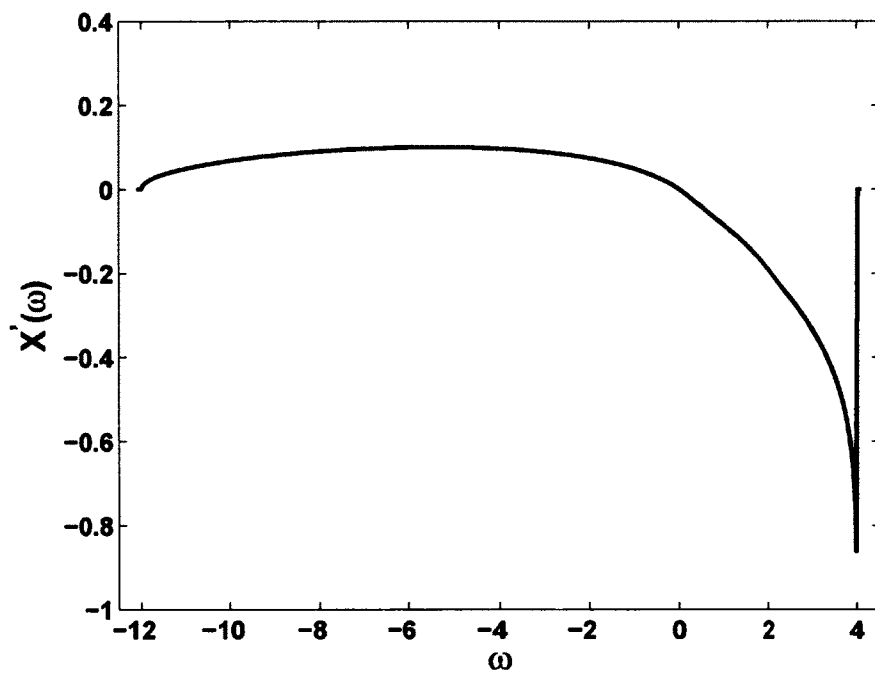


FIGURE B.4 – Fonction $X'(\omega)$

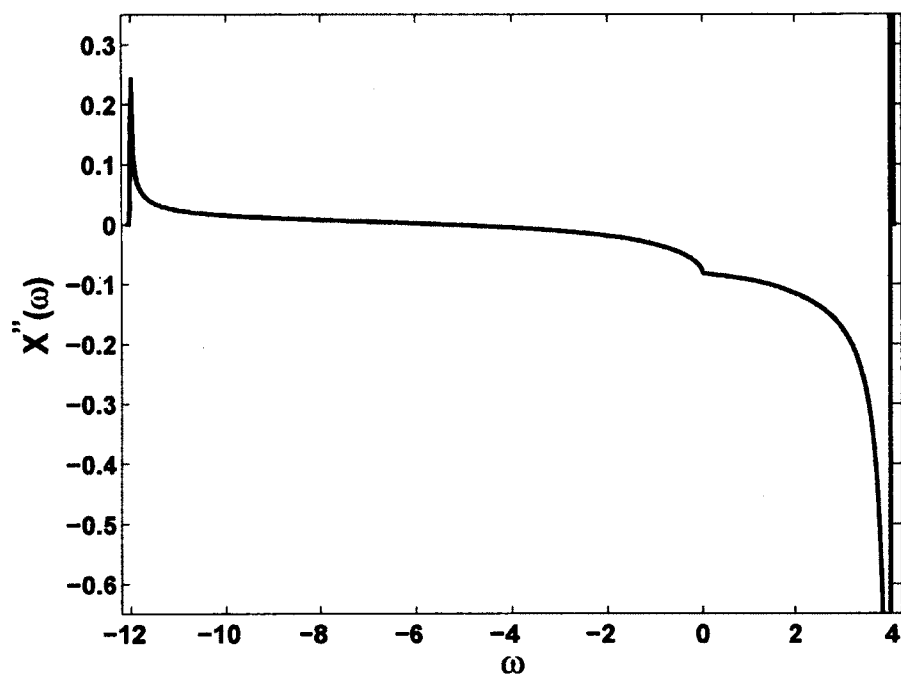


FIGURE B.5 – Fonction $X''(\omega)$

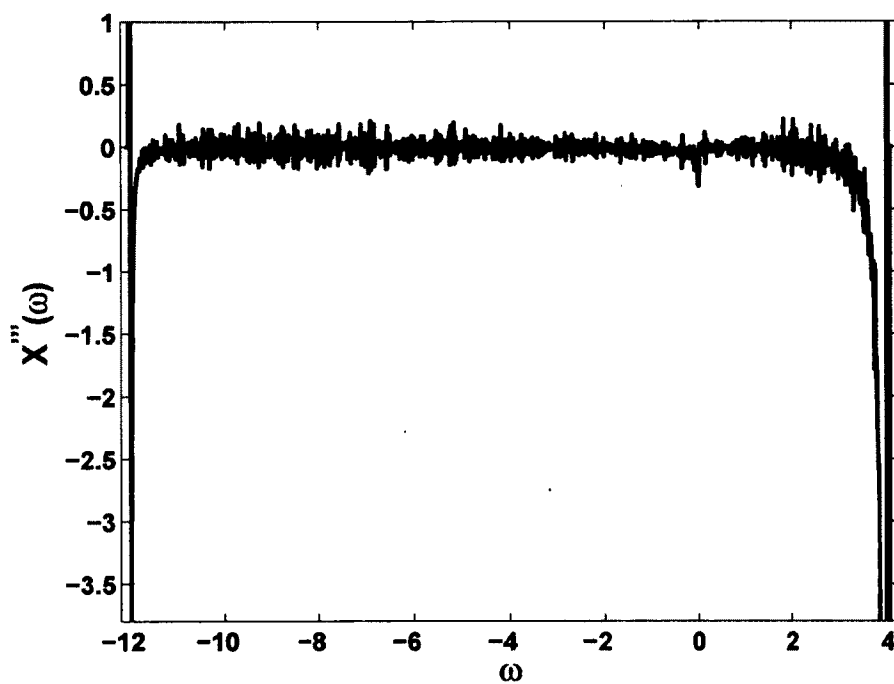


FIGURE B.6 – Fonction $X'''(\omega)$

B.3 Lorentzienne

Nous sommes obligés d'utiliser une moins bonne approximation de la fonction delta, une Lorentzienne, pour le calcul de $(T_f^{(2)})^2$. Ce type de fonction s'étend jusqu'à $\pm\infty$ et donne des résultats douteux pour les bords de bande et au-delà. Mais, nous nous attendons à obtenir des résultats qualitativement corrects à l'intérieur de la bande. Nous remplaçons $\delta(\omega - \varepsilon_k) \approx \frac{\gamma}{(\omega - \varepsilon_k)^2 + \gamma^2}$, où γ est un nombre petit. L'intégrale en 3d sur k est résolue en utilisant la méthode adaptative décrite dans l'Annexe A du Chapitre 2. Nous pouvons calculer $N_0(\varepsilon)$, $X(\varepsilon)$ et $X'(\varepsilon)$. Les fonctions restantes $N_0'(\varepsilon)$, $X''(\varepsilon)$ et $X'''(\varepsilon)$ sont obtenues en prenant la différence finie de $N_0(\varepsilon)$ et $X'(\varepsilon)$. Tel qu'attendu, les résultats sont mauvais pour les bords de bande et au-delà, mais nous ne sommes pas intéressés par ces régions puisque là les fonctions sont nulles. Les résultats sont montrés dans les Figs B.1 et B.2. L'utilisation des différences finies introduit des erreurs numériques visibles, mais cela n'est pas problématique puisque nous voulons seulement avoir une idée des valeurs et celles-ci sont bien visibles dans les deux figures.

Annexe C

Prolongement analytique par approximants de Padé

Nous suivons l'algorithme présenté dans l'article de Vidberg et Serene [49]. De façon générale, un approximant de Padé sur N points est donné par un ratio de polynômes

$$P_N(z) = \frac{A_N(z)}{B_N(z)}, \quad (\text{C.1})$$

où z est une variable complexe. Si N est pair, $A_N(z)$ et $B_N(z)$ sont des polynômes de degrés $\frac{N}{2} - 1$ et $\frac{N}{2}$ alors qu'ils sont de degrés $\frac{N-1}{2}$ et $\frac{N-1}{2}$ si N est impair. La forme donnée par l'Eq. (C.1) peut aussi être écrite comme une fraction continue

$$P_N(z) = \frac{a_1}{1 + \frac{a_2(z-z_1)}{1 + \frac{a_3(z-z_2)}{1 + \frac{a_4(z-z_3)}{\dots}}}}. \quad (\text{C.2})$$

Nous désirons utiliser l'approximant pour prolonger une fonction $f(i\omega_n)$ en fréquences de Matsubara vers des fréquences réelles. Nous identifions les coefficients de telle sorte que nous satisfaisons

$$P_N(i\omega_n) = f(i\omega_n) \quad n = 1 \dots N. \quad (\text{C.3})$$

La forme de l'Eq. (C.2) permet de trouver les coefficients qui satisfont l'Eq. (C.3). Nous pouvons écrire une procédure récursive débutant à $i = 1$. La forme générale est

$$\begin{aligned} a_n &= g_{n,n}, \quad g_{1,n} = f(i\omega_n), \quad n = 1, \dots, N \\ g_{i,j} &= \frac{g_{i-1,i-1} - g_{i-1,j}}{(i\omega_j - i\omega_{i-1})g_{i-1,j}}. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Pour connaître l'approximant à un z quelconque (en fréquences réelles pour nous $\omega + i0^+$), il est efficace d'utiliser la forme donnée par l'Eq. (C.1), ce qui permet d'obtenir

$$\begin{aligned} A_{n+1}(z) &= A_n(z) + a_{n+1}(z - z_n)A_{n-1}(z) \\ B_{n+1}(z) &= B_n(z) + a_{n+1}(z - z_n)B_{n-1}(z), \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

où $A_0 = 0$, $A_1 = a_1$ et $B_0 = B_1 = 1$.

Nous pourrions aussi y aller de manière matricielle au lieu de récursive comme Beach, Gooding et Marsiglio [50]. Mais, comme mentionné dans la Section 1.4.2, la matrice obtenue est extrêmement mal conditionnée et pour obtenir de meilleurs résultats que la méthode récursive, nous devons être en mesure de considérer plusieurs dizaines de décimales.

Annexe D

Introduction à la méthode de l'entropie maximale

Nous désirons obtenir les valeurs en fréquences réelles d'une fonction en fréquence de Matsubara $f(i\omega_n)$ quand le bruit numérique rend la méthode par approximants de Padé inutile. Nous regardons comme exemple la fonction de Green en fréquences fermioniques et la conductivité optique en fréquences bosoniques. Nous suivons de près les approches et notations développées par Bergeron *et al.* [48, 93].

La fonction de Green a la forme spectrale

$$G(i\omega_n) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\omega)}{i\omega_n - \omega}, \quad (\text{D.1})$$

où $A(\omega)$ est la fonction spectrale. Nous pouvons approximer cette intégrale comme une intégrale numérique soit

$$G(i\omega_n) \approx \sum_j K_{nj} A_j, \quad (\text{D.2})$$

où A_j est une fonction strictement positive.

Si nous avons des déviations moyennes différentes pour chacune des fréquences n , ϵ_n^{Re} et ϵ_n^{Im} , l'écart quadratique est donné par

$$\chi^2 = \sum_{n=0}^{N_n-1} \left[\left(\frac{\text{Re}\{G(i\omega_n) - \sum_j K_{nj} A_j\}}{\epsilon_n^{\text{Re}}} \right)^2 + \left(\frac{\text{Im}\{G(i\omega_n) - \sum_j K_{nj} A_j\}}{\epsilon_n^{\text{Im}}} \right)^2 \right]. \quad (\text{D.3})$$

Nous pouvons de plus définir l'entropie d'information comme

$$s = - \sum_j p_j \ln(p_j). \quad (\text{D.4})$$

Dans un cas où les intervalles de fréquences $\Delta\omega_j$ ne seraient pas égaux, la fonction de probabilité p_j peut être définie de deux façons $p_j = A_j(\omega_{j+1} - \omega_j)$ ou $p_j = A_j(\omega_j - \omega_{j-1})$ ce qui permet d'obtenir deux formes pour l'entropie

$$S_g = - \sum_{j=0}^{N-2} A_j(\omega_{j+1} - \omega_j) \ln(A_j(\omega_{j+1} - \omega_j)) \quad (\text{D.5})$$

et

$$S_d = - \sum_{j=0}^{N-2} A_j(\omega_j - \omega_{j-1}) \ln(A_j(\omega_j - \omega_{j-1})). \quad (\text{D.6})$$

Nous pouvons finalement définir une entropie moyenne

$$s = \frac{s_g + s_d}{2}. \quad (\text{D.7})$$

La méthode de l'entropie maximale consiste à minimiser une fonction Q , mixant l'écart quadratique et l'entropie d'information

$$Q = \chi^2 - \alpha s, \quad (\text{D.8})$$

où α est une constante qui détermine l'influence de l'entropie. Dans la présente méthode, la minimisation est effectuée à α constante, débutant avec une grande valeur tout en diminuant celle-ci en effectuant plusieurs itérations. Cela permet de trouver le meilleur A_j possible.

La méthode peut aussi être adaptée pour le prolongement de fonctions bosoniques, par exemple la conductivité optique. La méthode est présentée en grands détails dans [48]. Dans ce cas, nous utilisons la représentation spectrale de la susceptibilité

$$\chi_{11}(i\Omega_n) = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega^2}{\omega^2 + \Omega_n^2} \sigma^r(\omega), \quad (\text{D.9})$$

où $\sigma^r(\omega)$ est la partie réelle de la conductivité optique.

Comme pour la fonction de Green, nous approximations l'intégrale comme une intégrale numérique soit

$$\chi_{11}(i\omega_n) \approx \sum_j K_{nj} \sigma_j^r. \quad (\text{D.10})$$

Puisque les susceptibilités $\chi_{ab}(i\Omega_n)$ ont une partie imaginaire nulle

$$\chi^2 = \sum_n \left(\frac{\chi_{11}(i\Omega_n) - \sum_j K_{nj} \sigma_j^r}{\epsilon_n} \right)^2. \quad (\text{D.11})$$

L'entropie d'information est définie comme

$$s = - \int_0^\infty d\omega \sigma^r(\omega) \ln \left(\frac{\sigma^r(\omega)}{m(\omega)} \right), \quad (\text{D.12})$$

où, contrairement au cas du calcul de la fonction spectrale présenté plus haut, nous avons ajouté une fonction modèle par défaut $m(\omega)$. Encore une fois, la méthode consiste à minimiser la fonction Q définie par l'Eq. (D.8).

Il est important de noter que la méthode de l'entropie maximale ne peut être appliquée au prolongement de la susceptibilité spécifique au pouvoir thermoélectrique χ_{12} . La raison étant que $\chi_{12}(\omega)$ n'est pas strictement positive.

Annexe E

Comportement asymptotique de la fonction d'hybridation

E.1 Comportement asymptotique à $B = 0$

L'implémentation de IPT en général est discutée dans l'Annexe B du Chapitre 2. La seule dérivation manquante est celle de montrer que le résultat asymptotique pour la fonction d'hybridation que nous donnons est bien le bon soit $\Delta(i\omega_n)_{n \rightarrow \infty} \equiv \frac{c}{i\omega_n}$. Koch *et al.* présente ce résultat dans [94] pour le contexte de la diagonalisation exacte, c'est-à-dire avec un nombre fini de sites de bain. Nous obtenons ici le résultat équivalent en considérant un bain infini. Nous dérivons le comportement asymptotique de la fonction d'hybridation $\Delta(i\omega_n)$. Son utilité n'est pas limitée au solveur IPT, mais peut être nécessaire pour la plupart des calculs demandant une somme sur les fréquences de Matsubara en DMFT. En DMFT, la fonction de Green locale est reliée à la fonction d'hybridation au travers de la relation d'auto-cohérence. Nous allons donc développer la fonction de Green locale asymptotiquement.

$$\begin{aligned}
 G_{mm} &= \sum_k \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma(i\omega_n)} \\
 &= \sum_k \frac{1}{i\omega_n} \frac{1}{1 - \frac{(\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n)}{i\omega_n}}.
 \end{aligned} \tag{E.1}$$

Si $\Sigma(i\omega_n)$ est de puissance moindre que linéaire en $i\omega_n$ quand $\omega_n \rightarrow \infty$, nous avons la relation $1/(1-x)$ avec $x < 1$ et donc nous pouvons utiliser $1/(1-x) = 1+x+x^2+x^3+\dots$.

Conséquemment,

$$G_{mm} = \frac{1}{i\omega_n} \sum_k \left[1 + \frac{(\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n)}{i\omega_n} + \left(\frac{(\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n)}{i\omega_n} \right)^2 + \left(\frac{(\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n)}{i\omega_n} \right)^3 + \dots \right]. \quad (\text{E.2})$$

Pour $\Delta(i\omega_n)$, nous avons besoin de G_{mm}^{-1} . Nous appelons $X \equiv \frac{(\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n)}{i\omega_n}$

$$\begin{aligned} G_{mm}^{-1} &= i\omega_n [1 + \langle X \rangle + \langle X^2 \rangle + \langle X^3 \rangle + \dots]^{-1} \\ &\equiv i\omega_n [1 - X']^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

où $\langle \rangle$ est pour \sum_k et $X' = -(\langle X \rangle + \langle X^2 \rangle + \langle X^3 \rangle + \dots)$. X' est plus petit que un à haute fréquence puisque G_{mm} va comme $1/i\omega_n$ à l'infini. Ainsi, une fois encore, nous pouvons utiliser $1/(1 - X') = 1 + X' + X'^2 + X'^3 + \dots$.

$$\begin{aligned} G_{mm}^{-1} &= i\omega_n [1 + X' + X'^2 + X'^3 + \dots] \\ &\equiv i\omega_n [1 + (-\langle X \rangle - \langle X^2 \rangle - \langle X^3 \rangle - \dots) + (-\langle X \rangle - \langle X^2 \rangle - \langle X^3 \rangle - \dots)^2 + \dots] \\ &= i\omega_n [1 - \langle X \rangle - \langle X^2 \rangle - \langle X^3 \rangle - O(\langle X^4 \rangle) + (\dots)^2 + (\dots)^3 + \dots] \\ &= i\omega_n - \sum_k \varepsilon_k + \mu - \Sigma(i\omega_n) \\ &\quad + i\omega_n [-\langle X^2 \rangle - \langle X^3 \rangle - O(\langle X^4 \rangle) + (\dots)^2 + (\dots)^3 + \dots]. \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

Nous nous attardons maintenant à $\Delta(i\omega_n)$. La théorie de la DMFT nous dit que la relation d'auto-cohérence est

$$\begin{aligned} \Delta(i\omega_n) &= -\Sigma(i\omega_n) - G_{mm}^{-1}(i\omega_n) + i\omega_n + \mu \\ &= i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - i\omega_n + \sum_k \varepsilon_k - \mu + \Sigma(i\omega_n) \\ &\quad - i\omega_n [-\langle X^2 \rangle - \langle X^3 \rangle - O(\langle X^4 \rangle) + (\dots)^2 \dots] \\ &= \sum_k \varepsilon_k + \frac{1}{i\omega_n} \sum_k ((\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n))^2 - i\omega_n [-\langle X^3 \rangle - O(\langle X^4 \rangle) + (\dots)^2 \dots]. \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Mais, dans le terme en $(\dots)^2$, il y a $\langle X \rangle^2$ qui est du même ordre que $\langle X^2 \rangle$ et donc nous devons le conserver explicitement.

$$\begin{aligned}
\Delta(i\omega_n) &= \sum_k \varepsilon_k + \frac{1}{i\omega_n} \sum_k ((\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n))^2 - \frac{1}{i\omega_n} \left[\sum_k ((\varepsilon_k - \mu) + \Sigma(i\omega_n)) \right]^2 + \dots \\
&= \sum_k \varepsilon_k + \frac{1}{i\omega_n} \sum_k (\varepsilon_k^2 + \mu^2 + \Sigma(i\omega_n)^2 + 2\varepsilon_k \Sigma(i\omega_n) - 2\mu\varepsilon_k - 2\mu\Sigma(i\omega_n)) \\
&\quad - \frac{1}{i\omega_n} \sum_{kk'} (\varepsilon_k \varepsilon_{k'} + \mu^2 + \Sigma(i\omega_n)^2 + \varepsilon_k \Sigma(i\omega_n) + \varepsilon_{k'} \Sigma(i\omega_n) - \mu\varepsilon_k - \mu\varepsilon_{k'} - 2\mu\Sigma(i\omega_n)) \\
&\quad + \dots
\end{aligned} \tag{E.6}$$

En utilisant le fait que $\sum_k 1 = 1$ et $\sum_k \varepsilon_k = 0$ nous obtenons

$$\Delta(i\omega_n)_{n \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{i\omega_n} \sum_k \varepsilon_k^2. \tag{E.7}$$

Nous pouvons calculer le résultat pour n'importe quel réseau.

$$\sum_k \varepsilon_k^2 = \begin{cases} 4(t^2 + t'^2 + t''^2) & \text{pour le cubique simple en 2d} \\ 12t^2 + 6t'^2 & \text{pour le fcc 3d} \\ \frac{W^3}{4} & \text{pour le réseau de Bethe} \end{cases} \tag{E.8}$$

E.2 Comportement asymptotique à B fini

Nous avons montré dans le Chapitre 5 que le système effectif d'impuretés à résoudre reste le même en présence d'un champ magnétique. L'effet de \mathbf{B} pour le modèle d'Anderson est inclus dans la fonction d'hybridation \mathfrak{Z}_0^{-1} (ou Δ tel que présenté dans le Chapitre 2) au travers de G_{mm} . Nous pouvons ainsi utiliser les solutionneurs d'impuretés déjà existants sans rien changer. Mais, les plus puissants sont en fréquences de Matsubara. Dans ce cas, il est nécessaire de bien connaître les comportements asymptotiques des différentes fonctions pour être en mesure d'effectuer numériquement les sommes nécessaires dans l'espace de Matsubara. Puisque G , Σ et Δ dépendent de \mathbf{B} , nous devons savoir si leurs comportements asymptotiques sont des fonctions de \mathbf{B} pour être en mesure d'effectuer l'implémentation. Nous allons montrer que les trois premiers moments de la fonction de Green locale et les deux premiers de la *self-energy* sont indépendants

du champ magnétique. Cela implique que le comportement asymptotique de la fonction d'hybridation est celle habituelle tel que donné par l'Eq. (E.7).

À partir de l'Hamiltonien contenant le champ magnétique dans l'ensemble grand-canonique

$$K = - \sum_{ij\sigma} (\tilde{t}_{ij} + \mu\delta_{ij}) c_{i\sigma} c_{j\sigma}^\dagger + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (\text{E.9})$$

la fonction Green locale est définie comme

$$G_\sigma(\tau) = -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^\dagger \right]. \quad (\text{E.10})$$

Celle-ci, une fois exprimée en fréquences de Matsubara, peut être développée en terme de moments

$$G_\sigma(i\omega_n) = - \sum_{k \geq 0} (-1)^{k+1} \frac{G_\sigma^{(k)}(0^+) - G_\sigma^{(k)}(0^-)}{(i\omega_n)^{k+1}}, \quad (\text{E.11})$$

où $G_\sigma^{(k)}$ est la k ième dérivée de G en fonction de τ . La dérivée temporelle va s'appliquer à l'opérateur $c_{i\sigma}(\tau)$ et nous savons que l'équation du mouvement d'un opérateur quantique est donnée par le commutateur avec K . Nous pouvons ainsi obtenir

$$G_\sigma(i\omega_n) = \frac{\langle \{c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger\} \rangle}{i\omega_n} - \frac{\langle \{[K, c_{i\sigma}], c_{i\sigma}^\dagger\} \rangle}{(i\omega_n)^2} + \frac{\langle \{[K, [K, c_{i\sigma}]], c_{i\sigma}^\dagger\} \rangle}{(i\omega_n)^3} + \dots \quad (\text{E.12})$$

Les calculs des commutateurs donnent

$$\{c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger\} = 1 \quad (\text{E.13})$$

$$\{[K, c_{i\sigma}], c_{i\sigma}^\dagger\} = \tilde{t}_{ii} + \mu - U n_{i\bar{\sigma}} = \mu - U n_{i\bar{\sigma}} \quad (\text{E.14})$$

$$\begin{aligned} \{[K, [K, c_{i\sigma}]], c_{i\sigma}^\dagger\} &= \sum_l (\tilde{t}_{il} + \mu\delta_{il}) (\tilde{t}_{li} + \mu\delta_{li}) - 2U n_{i\bar{\sigma}} (\tilde{t}_{ii} + \mu) + U^2 n_{i\bar{\sigma}} \\ &= \sum_l \tilde{t}_{il} \tilde{t}_{li} + 2\mu \tilde{t}_{ii} + \mu^2 - 2U n_{i\bar{\sigma}} (\tilde{t}_{ii} + \mu) + U^2 n_{i\bar{\sigma}} \\ &= \sum_k \varepsilon_k^2 + \mu^2 - 2U n_{i\bar{\sigma}} \mu + U^2 n_{i\bar{\sigma}}, \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

étant donné que $\tilde{t}_{il} \tilde{t}_{li} = t_{il} t_{li}$, les phases s'éliminent. C'est seulement lorsque nous aurons des termes du type $\tilde{t}_{ij} \tilde{t}_{jl} \tilde{t}_{li}$ que le champ magnétique sera présent puisque le chemin fermé

forme une boucle. Cela montre que les trois premiers moments de la fonction de Green sont indépendants du champ magnétique et sont les mêmes qu'usuellement.

$$G_\sigma(i\omega_n, B) = \frac{1}{i\omega_n} + \frac{U\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle - \mu}{(i\omega_n)^2} + \frac{\sum_k \varepsilon_k^2 + \mu^2 + U^2\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle - 2\mu U\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle}{(i\omega_n)^3} + O\left(\frac{f(B)}{(i\omega_n)^4}\right). \quad (\text{E.16})$$

Nous devons maintenant nous préoccuper de la *self-energy*. Pour ce faire, nous utilisons premièrement l'Eq. (5.38) et la réécrivons en terme matricielle. Soit

$$\hat{G} = (z\mathbf{I} + \tilde{\mathbf{t}} - \Sigma)^{-1}. \quad (\text{E.17})$$

Nous considérons la présence du potentiel chimique et nous l'incluons dans la matrice $\tilde{\mathbf{t}}$ c'est-à-dire que les éléments de matrice seront $\tilde{t}_{ij} \equiv t_{ij}e^{if_{ij}} + \mu\delta_{ij}$. Nous utilisons l'identité matricielle, avec X et Y deux matrices

$$(X + Y)^{-1} = X^{-1} - X^{-1}YX^{-1} + X^{-1}YX^{-1}YX^{-1} - \dots,$$

en considérant $X = z\mathbf{I}$ et $Y = \tilde{\mathbf{t}} - \Sigma$. La matrice de la fonction de Green va s'écrire

$$\mathbf{G} = \frac{\mathbf{I}}{z} - \frac{\mathbf{I}}{z}(\tilde{\mathbf{t}} - \Sigma)\frac{\mathbf{I}}{z} + \frac{\mathbf{I}}{z}(\tilde{\mathbf{t}} - \Sigma)\frac{\mathbf{I}}{z}(\tilde{\mathbf{t}} - \Sigma)\frac{\mathbf{I}}{z} + \dots \quad (\text{E.18})$$

Si nous considérons que la *self-energy* peut toujours être exprimée comme une série de Laurent, nous avons

$$\Sigma = \Sigma^{(0)} + \frac{\mathbf{I}}{z}\Sigma^{(1)} + \dots \quad (\text{E.19})$$

et nous pouvons écrire l'Eq. (E.18) comme

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \frac{\mathbf{I}}{z} + \frac{\mathbf{I}}{z}(-\tilde{\mathbf{t}} + \Sigma^{(0)})\frac{\mathbf{I}}{z} + \frac{\mathbf{I}\mathbf{I}}{z^2}\Sigma^{(1)} + \frac{\mathbf{I}}{z}(\tilde{\mathbf{t}} - \Sigma^{(0)})\frac{\mathbf{I}}{z}(\tilde{\mathbf{t}} - \Sigma^{(0)})\frac{\mathbf{I}}{z} + \dots \\ &\equiv \frac{\mathbf{I}}{z} + \frac{1}{z^2}\mathbf{G}^{(2)} + \frac{1}{z^3}\mathbf{G}^{(3)} + \dots, \end{aligned} \quad (\text{E.20})$$

où nous avons défini

$$\mathbf{G}^{(2)} = -\tilde{\mathbf{t}} + \Sigma^{(0)} \quad (\text{E.21})$$

et

$$\mathbf{G}^{(3)} = \Sigma^{(1)} + (\tilde{\mathbf{t}} - \Sigma^{(0)})(\tilde{\mathbf{t}} - \Sigma^{(0)}). \quad (\text{E.22})$$

L'existence de l'Eq. (E.17) repose sur le fait que la *self-energy* est locale et donc la matrice Σ est diagonale. De plus, nous sommes intéressés à la fonction de Green locale (Eq. (E.16)). Par conséquent, nous désirons obtenir la partie diagonale de l'Eq. (E.20). Dans ce cas, nous avons besoin de

$$\left(\mathbf{G}^{(2)}\right)_{ii} = -(\tilde{\mathbf{t}})_{ii} + \Sigma^{(0)} = -\mu + \Sigma^{(0)} \quad (\text{E.23})$$

et

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{G}^{(3)}\right)_{ii} &= \Sigma^{(1)} + \left(\tilde{\mathbf{t}\mathbf{t}}\right)_{ii} - 2\Sigma^{(0)}\tilde{\mathbf{t}} + (\Sigma^{(0)})^2 \\ &= \Sigma^{(1)} + (\Sigma^{(0)})^2 - 2\Sigma^{(0)}\mu + \sum_k \varepsilon_k^2 + \mu^2, \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

car il ne faut pas oublier que nous avons intégré le potentiel chimique dans la définition de la matrice $\tilde{\mathbf{t}}$.

En comparant l'Eq. (E.23) avec le deuxième terme de l'Eq. (E.16), nous trouvons

$$\Sigma^{(0)} = U\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle. \quad (\text{E.25})$$

En remplaçant ce résultat dans l'Eq.(E.24) et en comparant avec le troisième terme de l'Eq. (E.16) nous obtenons

$$\Sigma^{(1)} = U^2\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle(1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle). \quad (\text{E.26})$$

Ces deux résultats sont aussi identiques aux comportements asymptotiques en l'absence du champ magnétique. Ainsi, la *self-energy* à large fréquence s'écrit comme

$$\Sigma_{\sigma}(i\omega_n, B) = U\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle + \frac{U^2\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle(1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle)}{i\omega_n} + O\left(\frac{g(B)}{(i\omega_n)^2}\right). \quad (\text{E.27})$$

Puisque la fonction de Green et la *self-energy* ont le même comportement asymptotique qu'en absence d'un champ magnétique, le comportement asymptotique de la fonction d'hybridation sera celui donné par l'Eq. (E.7)

$$\Delta(i\omega_n)_{n \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{i\omega_n} \sum_k \varepsilon_k^2. \quad (\text{E.28})$$

Bibliographie

- [1] Piers Coleman. Many body physics : Unfinished revolution. *Annales Henri Poincare* **4**, 559–580 (2003). 10.1007/s00023-003-0943-9.
- [2] A. Sedrakian et J.W. Clark. Nuclear superconductivity in compact stars : bcs theory and beyond. In *Pairing In Fermionic Systems*, A. Sedrakian, J.W. Clark, et M. Alford, editors. World Scientific, (2006).
- [3] P. W. Anderson. Plasmons, Gauge Invariance, and Mass. *Phys. Rev.* **130**, 439–442 (1963).
- [4] Subir Sachdev. Condensed Matter and AdS/CFT. Lectures at the 5th Aegean summer school, From gravity to thermal gauge theories : the AdS/CFT correspondence, and the De Sitter Lecture Series in Theoretical Physics 2009, University of Groningen, arXiv :1002.2947, (2010).
- [5] P. W. Anderson. More is different. *Science* **177**, 393–396 (1972).
- [6] R. B. Laughlin et David Pines. The Theory of Everything. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **97**(1), 28–31 (2000).
- [7] K. v. Klitzing, G. Dorda, et M. Pepper. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494–497 (1980).
- [8] D. C. Tsui, H. L. Stormer, et A. C. Gossard. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559–1562 (1982).
- [9] B. Bradu. La première liquéfaction de l'hélium par Heike Kamerlingh Onnes. http://www.bibnum.education.fr/files/BRADU_HELIUM_LIQUIDE.pdf.
- [10] N. Angier. The mighty mathematician you've never heard of. http://www.nytimes.com/2012/03/27/science/emmy-noether-the-most-significant-mathematician-youve-never-heard-of.html?_r=2&pagewanted=all&.
- [11] Jun Kondo. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of Theoretical Physics* **32**(1), 37–49 (1964).
- [12] P. Hohenberg et W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.* **136**, B864–B871 (1964).

- [13] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**(1365), 238–257 (1963).
- [14] P. Taylor et O. Heinonen. *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, (2002).
- [15] Elliott H. Lieb et F. Y. Wu. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.* **20**(25), 1445–1448 (1968).
- [16] Natan Andrei. Integrable Models in Condensed Matter Physics. Lectures given at the Trieste Summer School 1992 on Low-dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physicists, arXiv :cond-mat/9408101, (1994).
- [17] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, et C. A. Marianetti. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. *Reviews of Modern Physics* **78**(3), 865 (2006).
- [18] Jaime Merino et Ross H. McKenzie. Transport properties of strongly correlated metals : A dynamical mean-field approach. *Phys. Rev. B* **61**, 7996–8008 (2000).
- [19] E. D. Mun, S. Jia, S. L. Bud'ko, et P. C. Canfield. Thermoelectric power of the YbT₂Zn₂₀ (T = Fe, Ru, Os, Ir, Rh, and Co) heavy fermions. *Phys. Rev. B* **86**, 115110 (2012).
- [20] T. Honma et P. H. Hor. Unified electronic phase diagram for hole-doped high-T_c cuprates. *Phys. Rev. B* **77**(18), 184520 (2008).
- [21] I. Terasaki, Y. Sasago, et K. Uchinokura. Large thermoelectric power in NaCo₂O₄ single crystals. *Phys. Rev. B* **56**, R12685–R12687 (1997).
- [22] B. Buschinger, C. Geibel, F. Steglich, D. Mandrus, D. Young, J.L. Sarrao, et Z. Fisk. Transport properties of FeSi. *Physica B : Condensed Matter* **230-232**(0), 784 – 786 (1997). Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems.
- [23] Jan M. Tomczak, K. Haule, et G. Kotliar. *Thermopower of the Correlated Narrow Gap Semiconductor FeSi and Comparison to RuSi*. NATO Science for Peace and Security Series B : Physics and Biophysics. Springer Netherlands, (2013).
- [24] Walter Metzner et Dieter Vollhardt. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **62**(3), 324–327 (1989).
- [25] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, et M. J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 – 25 (1996).
- [26] M. Potthoff. Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons. *Eur. Phys. J. B (France)* **32**(4), 429 – 436 (2003).
- [27] M. Potthoff. Self-energy-functional approach : analytical results and the Mott-Hubbard transition. *Eur. Phys. J. B* **36**, 335 – 48 (2003).

- [28] A. M. S. Tremblay, B. Kyung, et D. Sénéchal. Pseudogap and high-temperature superconductivity from weak to strong coupling. towards a quantitative theory. *Low Temp. Phys.* **32**(4-5), 424–451 (2006).
- [29] J. M. Luttinger et J. C. Ward. Ground-state energy of a many-fermion system. ii. *Phys. Rev.* **118**(5), 1417–1427 (1960).
- [30] Dieter Vollhardt. Dynamical Mean-Field Theory of Electronic Correlations in Models and Materials. Lecture Notes (65 pages, 26 figures), published version including corrections, published in "Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV", eds. A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceedings (2010), arXiv :1004.5069, (2010).
- [31] M. Troyer. Monte Carlo simulations and error analysis. international summer school new trends in computational approaches for many-body systems, sherbrooke 2012. http://pitp.physics.ubc.ca/confs/sherbrooke2012/archives/sherbrooke2012_troyer.pdf.
- [32] A. Millis. Dynamical mean field theory : Basic ideas and cluster extensions. 2012 tallahassee winter school. <http://phys.columbia.edu/~millis/MillisTLH.pdf>.
- [33] P. Werner. Diagrammatic Monte Carlo simulation of quantum impurity models - weak and strong coupling approach. international summer school new trends in computational approaches for many-body systems, sherbrooke 2012. http://pitp.physics.ubc.ca/confs/sherbrooke2012/archives/lecturenotes_werner.pdf.
- [34] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, et G. Kotliar. Mott transition in the $d = \infty$ hubbard model at zero temperature. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1666–1669 (1993).
- [35] Henrik Kajueter et Gabriel Kotliar. New iterative perturbation scheme for lattice models with arbitrary filling. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 131–134 (1996).
- [36] M. Potthoff, T. Wegner, et W. Nolting. Interpolating self-energy of the infinite-dimensional hubbard model : Modifying the iterative perturbation theory. *Phys. Rev. B* **55**, 16132–16142 (1997).
- [37] D. Meyer, T. Wegner, M. Potthoff, et W. Nolting. The asymmetric single-impurity anderson model - the modified perturbation theory. *Physica B : Condensed Matter* **270**(3-4), 225 – 232 (1999).
- [38] H. Kajueter. Thèse de Doctorat, Rutgers, The State University of New Jersey, (1996).
- [39] A. Martin-Rodero, E. Louis, F. Flores, et C. Tejedor. Interpolative solution for the periodic anderson model of mixed-valence compounds. *Phys. Rev. B* **33**, 1814–1822 (1986).
- [40] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics, 3rd edition, Section 6.4.4*. Kluwer/Plenum, (2000).
- [41] Ryogo Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan* **12**(6), 570–586 (1957).

- [42] J. M. Luttinger. Theory of thermal transport coefficients. *Phys. Rev.* **135**, A1505–A1514 (1964).
- [43] J. M. Luttinger. Thermal transport coefficients of a superconductor. *Phys. Rev.* **136**, A1481–A1485 (1964).
- [44] B Sriram Shastry. Electrothermal transport coefficients at finite frequencies. *Reports on Progress in Physics* **72**(1), 016501 (2009).
- [45] Wenhui Xu, Cédric Weber, et Gabriel Kotliar. High-frequency thermoelectric response in correlated electronic systems. *Phys. Rev. B* **84**, 035114 (2011).
- [46] Indranil Paul et Gabriel Kotliar. Thermal transport for many-body tight-binding models. *Phys. Rev. B* **67**(11), 115131 (2003).
- [47] Hiroshi Kontani. General formula for the thermoelectric transport phenomena based on fermi liquid theory : Thermoelectric power, Nernst coefficient, and thermal conductivity. *Phys. Rev. B* **67**, 014408 (2003).
- [48] Dominic Bergeron, Vasyl Hankevych, Bumsoo Kyung, et A.-M. S. Tremblay. Optical and dc conductivity of the two-dimensional hubbard model in the pseudogap regime and across the antiferromagnetic quantum critical point including vertex corrections. *Phys. Rev. B* **84**(8), 085128 (2011).
- [49] H. J. Vidberg et J. W. Serene. Solving the Eliashberg equations by means of N-point Padé approximants. *Journal of Low Temperature Physics* **29**, 179–192 (1977). 10.1007/BF00655090.
- [50] K. S. D. Beach, R. J. Gooding, et F. Marsiglio. Reliable Padé analytical continuation method based on a high-accuracy symbolic computation algorithm. *Phys. Rev. B* **61**, 5147–5157 (2000).
- [51] B. Sriram Shastry, Boris I. Shraiman, et Rajiv R. P. Singh. Faraday rotation and the Hall constant in strongly correlated fermi systems. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2004–2007 (1993).
- [52] Neil W. Ashcroft et David N. Mermin. *Solid State Physics*. Thomson Learning, Toronto, 1 edition (1976).
- [53] Th. Pruschke, D. L. Cox, et M. Jarrell. Hubbard model at infinite dimensions : Thermodynamic and transport properties. *Phys. Rev. B* **47**, 3553–3565 (1993).
- [54] Gunnar Pálsson et Gabriel Kotliar. Thermoelectric response near the density driven Mott transition. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4775–4778 (1998).
- [55] P. M. Chaikin et G. Beni. Thermopower in the correlated hopping regime. *Phys. Rev. B* **13**, 647–651 (1976).
- [56] Michael R. Peterson et B. Sriram Shastry. Kelvin formula for thermopower. *Phys. Rev. B* **82**, 195105 (2010).
- [57] G. León, C. Berthod, T. Giamarchi, et A. J. Millis. Hall effect on the triangular lattice. *Phys. Rev. B* **78**, 085105 (2008).

- [58] O. Gunnarsson, M. W. Haverkort, et G. Sangiovanni. Analytical continuation of imaginary axis data for optical conductivity. *Phys. Rev. B* **82**, 165125 (2010).
- [59] Louis-François Arsenault, Patrick Sémon, et A.-M. S. Tremblay. Benchmark of a modified iterated perturbation theory approach on the fcc lattice at strong coupling. *Phys. Rev. B* **86**, 085133 (2012).
- [60] Louis-François Arsenault, B. Sriram Shastry, Patrick Sémon, et A.-M. S. Tremblay. Entropy, frustration, and large thermopower of doped mott insulators on the fcc lattice. *Phys. Rev. B* **87**, 035126 (2013).
- [61] Gerardo Beni. Thermoelectric power of the narrow-band Hubbard chain at arbitrary electron density : Atomic limit. *Phys. Rev. B* **10**, 2186–2189 (1974).
- [62] Subroto Mukerjee et Joel E. Moore. Doping dependence of thermopower and thermoelectricity in strongly correlated materials. *Applied Physics Letters* **90**(11), 112107 (2007).
- [63] V. Zlatić et J. K. Freericks. Strongly enhanced thermal transport in a lightly doped Mott insulator at low temperature. *ArXiv :1210.5977* (2012).
- [64] P. Wissgott, A. Toschi, G. Sangiovanni, et K. Held. Effects of electronic correlations and disorder on the thermopower of Na_xCoO_2 . *Phys. Rev. B* **84**, 085129 (2011).
- [65] P. Wissgott, A. Toschi, H. Usui, K. Kuroki, et K. Held. Enhancement of the Na_xCoO_2 thermopower due to electronic correlations. *Phys. Rev. B* **82**, 201106 (2010).
- [66] X. Deng, J. Mravlje, R. Zitko, M. Ferrero, G. Kotliar, et A. Georges. How bad metals turn good : spectroscopic signatures of resilient quasiparticles. *ArXiv :1210.1769* (2012).
- [67] A. Georges. Lecture Notes, Collège de France. http://www.college-de-france.fr/media/antoine-georges/UPL3541230901580176393_cours_13juin.pdf, (2012).
- [68] Nicolas Doiron-Leyraud, Cyril Proust, David LeBoeuf, Julien Levallois, Jean-Baptiste Bonnemaïson, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, et Louis Taillefer. Quantum oscillations and the fermi surface in an underdoped high- T_c superconductor. *NATURE* **447**(7144), 565–568 (2007).
- [69] Andrew J. Millis et M. R. Norman. Antiphase stripe order as the origin of electron pockets observed in 1/8-hole-doped cuprates. *Phys. Rev. B* **76**, 220503 (2007).
- [70] Tudor D. Stanescu, Victor Galitski, et H. D. Drew. Effective masses in a strongly anisotropic fermi liquid. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 066405 (2008).
- [71] Ivailo Dimov, Pallab Goswami, Xun Jia, et Sudip Chakravarty. Competing order, fermi surface reconstruction, and quantum oscillations in underdoped high-temperature superconductors. *Phys. Rev. B* **78**, 134529 (2008).
- [72] Xun Jia, Pallab Goswami, et Sudip Chakravarty. Resolution of two apparent paradoxes concerning quantum oscillations in underdoped high- T_c superconductors. *Phys. Rev. B* **80**, 134503 (2009).

- [73] T. Pereg-Barnea, H. Weber, G. Refael, et M. Franz. Quantum oscillations from fermi arcs. *Nature Physics* **6**, 44 (2010).
- [74] M. R. Norman, Jie Lin, et A. J. Millis. Lifshitz transition in underdoped cuprates. *Phys. Rev. B* **81**, 180513 (2010).
- [75] David Garcia-Aldea et Sudip Chakravarty. Multiple quantum oscillation frequencies in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ and bilayer splitting. *New Journal of Physics* **12**(10), 105005 (2010).
- [76] Jonghyoun Eun, Xun Jia, et Sudip Chakravarty. Quantum oscillations in electron-doped high-temperature superconductors. *Phys. Rev. B* **82**, 094515 (2010).
- [77] Jonghyoun Eun et Sudip Chakravarty. Magnetic breakdown and quantum oscillations in electron-doped high-temperature superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B* **84**, 094506 (2011).
- [78] Jonghyoun Eun, Zhiqiang Wang, et Sudip Chakravarty. Quantum oscillations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ from period-8 d-density wave order. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **109**(33), 13198–13203 (2012).
- [79] Satoshi Okamoto et Andrew J. Millis. Theory of Mott insulator-band insulator heterostructures. *Phys. Rev. B* **70**, 075101 (2004).
- [80] J.K. Freericks. *Transport in multilayered nanostructures : the dynamical mean-field theory approach*. Imperial College Press, (2006).
- [81] Takeo Matsubara et Takahito Kaneyoshi. Contribution to the theory of impurity band conduction. ii - Hall effect. *Progress of Theoretical Physics* **40**(6), 1257–1272 (1968).
- [82] M. Khodas et A. M. Finkel'stein. Hall coefficient in an interacting electron gas. *Phys. Rev. B* **68**, 155114 (2003).
- [83] Kuang-Ting Chen et Patrick A. Lee. Unified formalism for calculating polarization, magnetization, and more in a periodic insulator. *Phys. Rev. B* **84**, 205137 (2011).
- [84] Takafumi Kita et Masao Arai. Theory of interacting Bloch electrons in a magnetic field. *Journal of the Physical Society of Japan* **74**(10), 2813–2830 (2005).
- [85] J. K. Freericks et Mark Jarrell. Iterated perturbation theory for the attractive Holstein and Hubbard models. *Phys. Rev. B* **50**, 6939–6953 (1994).
- [86] M. Berciu et A. M. Cook. Efficient computation of lattice Green's functions for models with nearest-neighbour hopping. *EPL (Europhysics Letters)* **92**(4), 40003 (2010).
- [87] Douglas R. Hofstadter. Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields. *Phys. Rev. B* **14**, 2239–2249 (1976).
- [88] M. Koshino, H. Aoki, T. Osada, K. Kuroki, et S. Kagoshima. Phase diagram for the Hofstadter butterfly and integer quantum hall effect in three dimensions. *Phys. Rev. B* **65**, 045310 (2002).

- [89] Z. Kunszt et A. Zee. Electron hopping in three-dimensional flux states. *Phys. Rev. B* **44**, 6842–6848 (1991).
- [90] G. Montambaux et M. Kohmoto. Quantized Hall effect in three dimensions. *Phys. Rev. B* **41**, 11417–11421 (1990).
- [91] Maciej M. Maska. Lattice Green function for electrons in magnetic field. *physica status solidi (b)* **236**(2), 384–387 (2003).
- [92] Gunnar Palsson. *Computational studies of thermoelectricity in strongly correlated electron systems*. Thèse de Doctorat, Rutgers, The State University of New Jersey, (2001).
- [93] Dominic Bergeron. *non publié* (2011).
- [94] Erik Koch, Giorgio Sangiovanni, et Olle Gunnarsson. Sum rules and bath parametrization for quantum cluster theories. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* **78**(11), 115102 (2008).