

**UNE MÉTHODE ALTERNATIVE POUR OBTENIR LE POUVOIR
THERMOÉLECTRIQUE À TEMPÉRATURE FINIE**

par

Anne-Marie Gagnon

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

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 25 mai 2016

Le 20 mai 2016

Le jury a accepté le mémoire de Anne-Marie Gagnon dans sa version finale

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay

Directeur de recherche

Département de physique

Professeur Claude Bourbonnais

Président-rapporteur

Département de physique

Professeur Patrick Fournier

Membre interne

Département de physique

Sommaire

Dans ce mémoire sera présentée une nouvelle méthode numérique envisagée dans le but d'obtenir le pouvoir thermoélectrique à température finie. Une méthode d'entropie maximale est utilisée, ce qui était une caractéristique requise des équations dérivées. Toutes les équations nécessaires y sont présentées, ainsi que certaines astuces reliées au prolongement analytique de quantités bruitées ou de fonctions dont la convergence est lente etc. De plus, les trois fonctions de corrélation d'intérêt y sont calculées de trois façons différentes, avec les détails et les explications nécessaires. On y présente le cas de la conductivité électrique, du pouvoir thermoélectrique ainsi que la fonction de corrélation courant de chaleur-courant de chaleur. L'implémentation numérique finale s'est butée à des difficultés qui sont expliquées dans ce mémoire.

Mots-clés: Physique des problèmes à N-corps, fonctions de transport, pouvoir thermoélectrique, prolongement analytique

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier mon directeur de maîtrise, André-Marie Tremblay, qui est toujours d'une aide et d'une écoute presque immédiate lorsqu'on en a besoin, pour sa patience et son optimisme, et aussi puisqu'il m'a fait confiance pour que je puisse faire cette maîtrise. Je me dois aussi de remercier mon comité de suivi, pour leur temps dans la révision de ce travail. Je dois aussi être reconnaissante envers mes collègues de bureau, plus précisément Alexis et Reza, qui m'ont fourni des outils, ainsi que des explications qui ont été très utiles dans le développement de mon travail, sans oublier Louis-François Arseneault, qui m'a fourni des données et répondu à certaines questions. En ce qui concerne les réponses aux questions, je dois remercier Dominic Bergeron, qui a répondu à mes multiples e-mail toujours rapidement. Toujours en ce qui concerne l'université, je voudrais remercier le RECSUS, ses gens et son café, qui ont donné lieu à d'agréables discussions enrichissantes et un peu de support moral caféiné. Je tiens à remercier Benoît, pour son soutien, son aide et son écoute inconditionnels, et ça depuis qu'on se connaît. Je remercie aussi Manuel, pour toutes les discussions aussi différentes les unes des autres qu'on partage depuis quelques années déjà. Pour terminer, et non le moindre, je remercie mes parents, Louise et Maurice, pour leur appui et leur écoute lors de mes études et autres drames de la vie.

Table des matières

Sommaire	v
Remerciements	vii
1 Introduction	1
2 Méthodologie	7
2.1 Fonctions de Green	8
2.1.1 Fonctions de Green en temps réel	8
2.1.2 Fonctions de Green de Matsubara	10
2.2 Théorie du champ moyen dynamique (DMFT)	12
2.2.1 Introduction	12
2.2.2 Comment cela fonctionne	13
2.3 Le modèle de Hubbard	14
2.4 Monte-Carlo quantique en temps continu (CTQMC)	15
2.4.1 Principes de base et motivation	15
2.4.2 Mises à jour Monte-Carlo	18
3 Théorie du transport	21
3.1 Réponse linéaire en problème à N-corps	21

TABLE DES MATIÈRES

3.1.1	Dérivation	21
3.1.2	Équations utiles	23
3.2	Définitions de base et dérivations des coefficients de transport	25
3.2.1	Relations d’Onsager	25
3.2.2	Relations de transport de Luttinger	26
3.3	Preuve de l’expression utile pour le calcul de coefficient de transport L_{12}	29
3.3.1	L_{12} sous sa forme complète	29
3.3.2	Lien avec la forme conventionnelle	30
3.4	Calculs analytique des fonctions de corrélation : différentes approches	33
3.4.1	Définitions utiles	33
3.4.2	Cas de la fonction de corrélation L_{11}	34
3.4.3	Cas de la fonction de corrélation L_{12}	39
3.5	Comportement asymptotique de la conductivité longitudinale	45
3.5.1	Utilité et équation à dériver	45
3.5.2	Dérivation	46
4	Prolongement analytique	51
4.1	Méthode d’entropie maximale	51
4.1.1	Mise en contexte	51
4.1.2	La méthode en bref	52
4.2	Méthode des approximants de Padé	54
4.2.1	Introduction	54
4.2.2	Comment cela fonctionne en bref	55
4.3	Comment contourner le problème de la non-positivité d’une fonction de corrélation	57

TABLE DES MATIÈRES

4.3.1	Pouvoir thermoélectrique	57
4.3.2	Le cas des fonctions de Green auxiliaires et poids spectraux anormaux (supraconductivité)	61
5	Implémentation, problèmes et résultats	65
5.1	Implémentation et résultats	65
5.1.1	Ce qui a été effectué	65
5.1.2	Essais et vérifications préalables	67
5.1.3	L'idée principale pour obtenir le pouvoir thermoélectrique	73
5.2	Problèmes numériques rencontrés	75
5.2.1	Convergence numérique	75
5.2.2	Problèmes d'unités - vérifications	76
	Conclusion	79
A	Détails du calcul de la fonction de corrélation χ_{jQjQ}	81
A.1	Calcul de $\chi_{jjQ}(i\omega_n)$	81
A.2	Calcul de $\chi_{jQjQ}(i\omega_n)$	85
B	Moments de la Self-Énergie	89
C	Méthode de prolongement analytique d'une self-énergie bruitée	93
D	Preuve de la formule utile pour le calcul de la densité électronique	95

Chapitre 1

Introduction

De nouvelles façons de calculer les quantités de transport dans les systèmes électroniques fortement corrélés : À quoi bon ?

Il est d'intérêt d'étudier les propriétés de transport dans les matériaux à électrons fortement corrélés, que ce soit dans le but d'en faire une utilisation optimale en ingénierie, ou bien d'améliorer notre connaissance théorique de certains phénomènes physiques fondamentaux. Il est nécessaire d'étudier ces propriétés théoriquement avec des modèles approximatifs dans une certaine limite, bien qu'il demeure indispensable d'avoir recours à des mesures en laboratoire sur de vrais matériaux. En effet, le but des études numériques est de nous guider dans la recherche de nouveaux matériaux avec des propriétés intéressantes

pour l'industrie.

Un des buts intéressants serait de trouver le meilleur matériau thermoélectrique possible. La thermoélectricité est, comme son nom l'indique, la transformation de la chaleur perdue en électricité, qui elle peut être utile. Des applications réalistes et intéressantes seraient par exemple la conception de réfrigérateurs et de générateurs de courant, utiles où la fiabilité importe davantage que la performance. On pourrait imaginer par exemple des composants d'ordinateur thermoélectriques qui se refroidissent elles-mêmes ou des applications pour les stations spatiales ou les satellites qui s'auto-alimentent en électricité. Il se trouve aussi que les matériaux intéressants sont probablement des matériaux fortement corrélés ou des semi-conducteurs, des composés intermétalliques de terres rares, tel que suggéré par Mahan dans cet article important sur le pouvoir thermoélectrique [13]. Certaines classes de matériaux, ont déjà été étudié avec succès à l'aide de la théorie des bandes [17], comme ceux dit à structure skutterudite.

L'efficacité thermoélectrique d'un matériau se mesure à l'aide du facteur de mérite, qui dépend de ses quantités de transport :

$$Z = \frac{\sigma S^2}{\kappa_e + \kappa_l}. \quad (1.1)$$

Ici κ_e est la conductivité thermique due aux électrons, κ_l celle du au réseau, σ la conductivité électrique et S le pouvoir thermoélectrique :

$$S(w) = \frac{-1}{T} \frac{L_{12}(w)}{L_{11}(w)}, \quad (1.2)$$

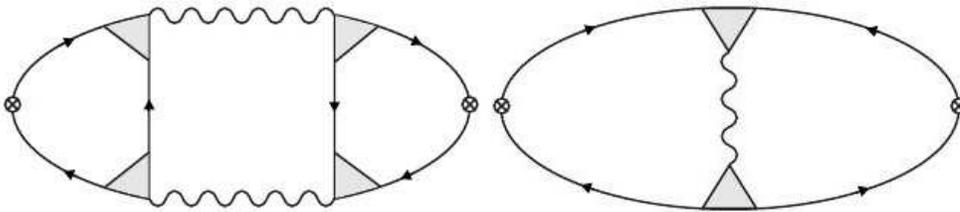
qui sera discuté davantage dans le chapitre 3. Les quantités L_{12} et L_{11} correspondent aux fonctions de transport dont il sera aussi discuté dans le chapitre 3. On note alors que pour obtenir un facteur de qualité optimal, il est nécessaire d'augmenter la conductivité électrique ou le pouvoir thermoélectrique, ou de diminuer la conductivité thermique du

matériau. Il a été démontré que la diminution de la conductivité thermique due au réseau est limitée [18]. En ce qui concerne les métaux ordinaires, ils n'ont pas la capacité de fournir un pouvoir thermoélectrique important. Les métaux simples ont la symétrie particule-trou autour du niveau de Fermi et donc un pouvoir thermoélectrique presque nul. Par exemple, dans les métaux les plus connus, l'argent et le cuivre ont des coefficients de Seebeck de $1,5 \mu V/K$ et l'aluminium de $-1,5 \mu V/K$ seulement. Pour une efficacité vraiment utile il faudrait des coefficients de l'ordre des milliers plutôt que de l'unité.

Ici on vise plutôt l'obtention d'un matériau à S maximal. Plus spécifiquement, le but de ce travail était de vérifier la faisabilité d'une nouvelle méthode pour obtenir le pouvoir thermoélectrique en fréquences réelles, la seule quantité véritablement comparable à l'expérience. La méthode pourrait être utilisée pour calculer le pouvoir thermoélectrique de tout type de matériau, tant que l'on soit en mesure d'obtenir des données numériques adéquates (voir le chapitre 2 sur les méthodes de simulation numériques utilisées, section 2.2). Dans le cas de ce mémoire, on vise l'obtention de résultats pour des matériaux du type isolant de Mott dopés à réseaux cubique face centrées. Il se trouve que le pouvoir thermoélectrique, étant constitué d'une fonction de réponse calculée avec deux opérateurs de courant différents, (se référer à la section 3.4.3 pour davantage de détails) n'a pas un poids spectral défini positif. On a alors des problèmes avec le processus de prolongement analytique (4.3) lorsque l'on veut procéder avec une méthode d'entropie maximale (4.1). En effet, les calculs numériques sont généralement faits en fréquences de Matsubara ou en temps imaginaire en ce qui concerne le Monte-Carlo (2.4) et ce n'est pas possible de faire un prolongement analytique directement dans ce cas. On procède alors avec une méthode utilisant les approximants de Padé (4.2.1), ou une méthode d'entropie maximale, ce qui est la méthode la plus stable lorsque les données numériques n'ont pas une précision numérique assez grande. La méthode d'entropie maximale requiert cependant le traitement

de fonctions avec des poids spectraux positifs. Il est bien entendu possible de contourner ce problème en calculant les fonctions de corrélation en fréquences réelles avec les poids spectraux à une particule lorsqu'il n'y a pas de corrections de vertex. Cependant, le but ultime serait d'envisager les calculs en incorporant des corrections de vertex. Ceci se plus facilement en fréquences imaginaires lorsqu'on considère directement les diagrammes de Feynmann ci-dessous [11], qui se veulent des corrections supraconductrices à la conductivité ordinaire.

Figure 1.1 – Diagrammes d'Alamazov-Larkin (gauche) et de Maki-Thompson (droite)



Ce travail de maîtrise a été divisé comme suit. Tout d'abord, des tests préalables ont dû être réalisés pour comprendre davantage le nouvel outil de prolongement analytique utilisé, conçu par Dominic Bergeron, lors de son post-doctorat au sein du groupe de travail. Il était question de ce qu'il permettait d'obtenir comme résultats et quelles étaient les conditions nécessaires à l'obtention de résultats fiables. Il s'est avéré que le prolongement analytique n'est pas une tâche numérique facile, et que ceci est hautement sensible à la qualité des données numériques. Tout d'abord la méthodologie y est expliquée sommairement, dans le but de permettre une compréhension de la théorie sur le transport. Les fonctions de Green à température finie y sont brièvement expliquées, ainsi qu'un des solveurs d'impuretés utilisé. La méthode pour simuler un réseau, le théorie du champ moyen dynamique y est aussi présentée. Par la suite, la théorie du transport en problèmes à N-corps, les notions préalables, et la méthode utilisée pour dériver les équations y sont présentées. Les calculs plus lourds et détaillés sont placés en annexe. Ensuite, les deux principales méthodes de

prolongement analytique sont expliquées, ainsi que la méthode envisagée pour résoudre la problématique principale qui consiste à obtenir des résultats avec une méthode de prolongement analytique par entropie maximale. Pour terminer, les résultats obtenus sont présentés ainsi que les problèmes rencontrés et de possibles solutions pour ainsi améliorer la méthode.

Chapitre 2

Méthodologie

Pour comprendre le calcul des fonctions de réponse tel que présenté dans le chapitre sur la théorie du transport [3](#), il est nécessaire d'avoir une compréhension de base des fonctions de Green et de certains théorèmes et outils fondamentaux du problème à n-corps, tel que le formalisme à température finie et le modèle de Hubbard. Un très bref résumé des définitions clés nécessaires seront présentées. De plus, deux méthodes numériques indispensables dans ce domaine, nécessaires au calcul de la fonction de Green locale avec interactions et à la simulation sur un réseau atomique étendu seront résumées. Ce sont les méthodes ayant permis l'obtention de fichiers de données de départ, nécessaire à tout calcul de quantités de transport. La première étant la méthode de champ moyen dynamique pour simuler un réseau atomique, et le Monte-Carlo quantique en temps continu, qui permet de calculer la fonctions de Green locale.

2.1 Fonctions de Green

2.1.1 Fonctions de Green en temps réel

La fonction de Green, objet mathématique fondamental en physique théorique, se veut une fonction de réponse pour la fonction d'onde. Elle est analogue aux fonctions de Green dans le contexte des équations différentielles, d'où son nom. La fonction de Green classique a ce rôle de propagateur pour la fonction d'onde évoluant dans le temps. Dans le cas du problème à N-corps, c'est-à-dire dans le cadre de la seconde quantification, le parallèle avec l'évolution de la fonction d'onde est moins évident à établir. Son calcul est évidemment beaucoup plus compliqué, et rarement l'on peut s'en tirer à l'aide de calculs analytiques, sauf dans quelques cas limites très approximés. On définit la fonction de Green en temps réel dans le problème à n-corps comme :

$$G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \langle \{\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')\} \rangle \theta(t - t'), \quad (2.1)$$

où les opérateurs ψ et ψ^\dagger sont respectivement les opérateurs de destruction et de création des électrons. Cette fonction est appropriée pour décrire les fermions, d'où l'anti-commutateur satisfaisant le principe d'exclusion de Pauli, lors de l'échange des opérateurs fermioniques. La fonction de Green est dite retardée, ou causale, ce qui est assuré par la fonction thêta de Heaviside. La fonction de Green avancée en temps réel existe aussi, mais c'est la retardée qui est le plus souvent utile, qui a un sens physique plus pratique. La moyenne est prise thermodynamiquement avec la matrice de densité du système. S'il y a invariance sous

2.1. FONCTIONS DE GREEN

translation dans le temps une forme plus commode à évaluer est :

$$G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \frac{\text{Tr}[\{e^{-\beta(H-\mu N)} \psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t')\}] \theta(t-t')}{Z}, \quad (2.2)$$

où la moyenne thermodynamique a été explicitée, et est prise dans l'ensemble grand-canonique :

$$\langle O \rangle \equiv \frac{\text{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)} O]}{Z}. \quad (2.3)$$

La fonction de Green permet d'obtenir le poids spectral, généralisation de la densité d'états pour un système à plusieurs particules et en présence d'interactions. On a la relation très importante suivante, dans l'espace des vecteurs d'onde et des fréquences, qui sont généralement les plus pertinentes pour l'analyse physique et les comparaisons avec l'expérience :

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -2 \text{Im}[G^R(\mathbf{k}, \omega)]. \quad (2.4)$$

Le poids spectral est normalisé à l'unité, c'est-à-dire,

$$\int \frac{d\omega'}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega') = \langle \{c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}}^\dagger\} \rangle = 1. \quad (2.5)$$

Dans le cas sans-interaction seulement, c'est un delta de Dirac, puisqu'ajouter une particule (ou un trou) dans un état propre de quantité de mouvement ne peut résulter en un état propre d'un problème à N-corps que si les moments individuels sont conservés, ce qui est un cas sans interaction. De plus, en effectuant la somme sur les vecteurs d'onde du poids spectral on retrouve la densité d'états locale d'un système. Dans une expérience de photoémission, il est aussi possible de relier la section efficace d'éjection d'un électron de quantité de mouvement \mathbf{k}_{\parallel} et d'énergie ω au poids spectral, ce qui fait donc un lien entre une expérience et la théorie en problèmes à N-corps. \mathbf{k}_{\parallel} est la quantité de mouvement de l'électron parallèle

au plan d'éjection. Sans entrer dans les détails de la preuve, on a l'équation suivante :

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega} \propto f(\omega) A(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega). \quad (2.6)$$

2.1.2 Fonctions de Green de Matsubara

Les fonctions de Green de Matsubara servent à décrire la mécanique quantique à température finie. L'idée provient d'une analogie entre la physique statistique, où la température est statistiquement décrite par une exponentielle réelle contenant la température et la mécanique quantique où on décrit l'évolution temporelle avec un facteur exponentiel du temps multiplié par l'unité imaginaire. Il se trouve bien des circonstances où les calculs sont plus simples s'ils sont faits directement dans l'espace des fréquences imaginaires, dites de Matsubara. Tout dans cette maîtrise étant effectué à température finie, un traitement en fréquences de Matsubara est nécessaire. La fonction de Green de Matsubara en temps imaginaire, dans l'espace des vecteurs d'onde est définie comme :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau - \tau') &= -\langle T_{\tau} \psi(\mathbf{k}, \tau) \psi^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau') \rangle \\ &= -\langle \psi(\mathbf{k}, \tau) \psi^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau') \rangle \theta(\tau - \tau') + \langle \psi^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau') \psi(\mathbf{k}, \tau) \rangle \theta(\tau' - \tau). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Le temps imaginaire est défini sur l'intervalle $[0, \beta)$, et la moyenne thermodynamique est prise comme à l'équation 2.3. L'évolution temporelle des opérateurs de champs est donnée par $\psi(\mathbf{k}, \tau) = e^{\tau K} \psi(\mathbf{k}) e^{-\tau K}$ avec $K = H - \mu N$ et $\tau := -\text{Im } t = it$ le temps imaginaire. On définit la transformée de Fourier, ou de Matsubara, comme la transformation de Fourier discrète habituelle comme suit :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n), \quad (2.8)$$

2.1. FONCTIONS DE GREEN

où les fréquences de Matsubara sont impaires pour les fermions $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$, $n \in \mathbb{N}$. Pour les bosons on aurait plutôt $\omega_n = 2m\pi/\beta$, $m \in \mathbb{N}$. On retrouve alors des propriétés d'antipériodicité pour les fonctions fermioniques et de périodicité pour les fonctions bosoniques. Trouver $G^R(\mathbf{k}, \omega)$ le long de l'axe réel à partir de la fonction de Matsubara est un problème de prolongement analytique. G. Baym et N.D. Mermin [3] ont démontré par arguments mathématiques que si $G(z)$ est analytique sur le demi-plan supérieur des fréquences et que $\lim_{z \rightarrow \infty} zG(z) = C$ où C est une constante, le prolongement analytique est bien défini. C'est-à-dire qu'une seule fonction en fréquences réelles correspond à la fonction en fréquences imaginaires lorsqu'on procède à la limite suivante :

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta). \quad (2.9)$$

Par contre l'opération demeure instable numériquement, et des méthodes sophistiquées doivent être envisagées lorsque que les calculs s'effectuent sur des données numériques, ce qui est le sujet du chapitre 4.

2.2 Théorie du champ moyen dynamique (DMFT)

2.2.1 Introduction

La méthode du champ moyen dynamique permet d'obtenir la fonction de Green d'un réseau atomique infini à partir de la fonction de Green d'un seul site. La physique de ce site est non-triviale. Habituellement, on essaie de calculer la fonction de Green avec interactions de ce site, qu'on peut modéliser avec le modèle de Hubbard (voir section 2.3). Il est alors nécessaire d'avoir recours à un *solutionneur d'impureté* (voir la section plus bas sur le Monte-Carlo quantique en temps continu 2.4). Il existe plusieurs types de solutionneurs d'impureté. À température finie, le CTQMC, *continuous time quantum Monte-Carlo* et l'IPT, la théorie des perturbations itérées, ou les méthodes plus analytiques s'appuyant sur le groupe de renormalisation sont bien utiles[7]. Dans cette maîtrise des données issues de l'IPT ont été utilisées, ainsi que des données obtenues par CTQMC. Dans le cas des données obtenues par CTQMC, une variante de la DMFT ordinaire a été utilisée. Celle-ci est aussi une méthode de champ moyen dynamique, mais l'on obtient d'abord la fonction de Green avec interaction sur un amas de site entouré d'un bain plutôt que celle calculée pour un seul site. Dans ce cas on appelle la méthode la CDMFT, pour *cluster dynamical mean field theory*. Cela nécessite des explications supplémentaires, comme pour la périodisation, un changement de base particulier, et des considérations de la théorie des groupes finies, et tout ça ne sera pas expliqué ici. Il est mieux de se référer à la revue de David Sénéchal sur

2.2. THÉORIE DU CHAMP MOYEN DYNAMIQUE (DMFT)

le sujet [20]. Dans le cas des données obtenues par IPT, c'est la DMFT ordinaire qui fût utile cependant.

2.2.2 Comment cela fonctionne

La théorie de la DMFT a été développée par G. Kotliar, A. Georges [7] et de façon indépendante par M. Jarrell. La DMFT se base sur le modèle d'impureté d'Anderson, qui est en résumé un seul site d'un modèle de Hubbard avec une interaction U dans un bain d'électrons sans interaction en dimension infinie, où la self-énergie dépend seulement de la fréquence. La stratégie réside dans une relation d'auto-cohérence entre la fonction de Green calculée pour le réseau infini projetée sur un seul site (ou l'amas de sites) et la fonction de Green complète calculée avec un solveur d'impureté. On fait l'hypothèse que la self-énergie de la fonction de Green calculée sur un site est la même que celle calculée pour le réseau au complet. On a pour la fonction de Green locale :

$$G_{ii}^{-1}(i\omega_n) = \left(\mathcal{G}_{ii}^0(i\omega_n)\right)^{-1} - \Sigma(i\omega_n). \quad (2.10)$$

On peut extraire la self-énergie, $\Sigma(i\omega_n)$, de 2.10 et l'injecter dans la fonction de Green du réseau infini, qu'on projettera sur un site avec une transformée de Fourier appropriée (voir ci-bas 2.11). On considère donc que l'effet du bain est simplement de faire bouger les électrons du site vers l'extérieur et vice-versa. Ci-bas sont présentées les équations des fonctions de Green globale et locale :

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega_n)} \\ G_{ii}(i\omega_n) &= \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{1}{i\omega_n - (\epsilon(\mathbf{k}) - \mu) - \Sigma(i\omega_n)}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Par la suite il faut vérifier si la fonction de Green projetée et celle en 2.11 coïncident. Sinon il faut modifier $\mathcal{G}_{ii}^0(i\omega_n)$ et recalculer le tout, jusqu'à ce que les deux fonctions de Green

soient similaires en tenant compte d'une incertitude, ce qui constitue la boucle d'auto-cohérence de la DMFT.

2.3 Le modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard est le modèle le plus simple pouvant décrire la physique des électrons en interactions, comme en présence de l'interaction de Coulomb. Il ne comprend que deux termes, un terme d'énergie cinétique et un terme d'interaction. Pour faciliter les choses le modèle de base ne considère qu'une interaction localisée, c'est-à-dire que deux électrons doivent se trouver sur un même site du réseau pour subir l'interaction de Coulomb, qu'on modélise par une valeur constante U . Pour des résultats plus réalistes, on peut utiliser une valeur écrantée du potentiel de Coulomb. Bien que ce modèle soit simple en apparence, il doit être résolu de façon approximative avec des méthodes numériques sophistiquées. La raison est que le nombre de configurations augmente exponentiellement avec le nombre de sites du réseau considéré, et on s'attend à ce qu'un matériau simulé de façon réaliste en comprenne une quantité énorme, ce qui rend un calcul impossible en pratique. De ce fait, parmi les méthodes les plus populaires figurent la DMFT, expliquée ci-haut à la section 2.2, ainsi que les solveurs d'impureté, dont un de ceux-ci, le CTQMC, est décrit ci-bas (voir section 2.4). Le modèle de base est présenté ci-dessous :

$$H = \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\downarrow} n_{i\uparrow}. \quad (2.12)$$

2.4. MONTE-CARLO QUANTIQUE EN TEMPS CONTINU (CTQMC)

Dans l'équation 2.12 ci-haut, $n_{i\downarrow}(n_{i\uparrow})$ est la densité électronique au site i de spin *down* ou *up*. $t_{ij} = t_{ji}^*$ est l'amplitude de saute entre le site i et le site j du réseau, et $c_{j\sigma}(c_{i\sigma}^\dagger)$ est l'opérateur de création au site j d'électrons de spin σ ou l'opérateur de destruction au site i .

2.4 Monte-Carlo quantique en temps continu (CTQMC)

2.4.1 Principes de base et motivation

Le but du Monte-Carlo quantique en temps continu est de partir d'un Hamiltonien total d'un système, de le décomposer en deux parties, disons $H = H_1 + H_2$, et de faire le développement de la fonction de partition $Z = e^{-\beta H}$ en représentation d'interaction par rapport à H_1 , en puissance de H_2 . Dans le cas du Monte-Carlo en temps continu utile dans ce travail (CTQMC-hyb), on fait le développement en puissance de l'hamiltonien d'hybridation ($H_{hyb} = H_2$), et donc ($H_1 = H_0 + H_U + H_{bain}$). On appelle aussi cette méthode un développement en couplage fort.

On considère d'abord le modèle de Hubbard ordinaire (voir ci-haut 2.3) auquel on ajoute un terme correspondant à un bain d'électrons sans-interaction, ainsi qu'un terme de couplage, l'hamiltonien d'hybridation, faisant le lien entre le réseau et ce bain. Dans le cadre d'un modèle d'impureté d'Anderson, fondamental à la méthode de Monte-Carlo quantique

utilisée, on a les hamiltoniens suivants :

$$\begin{aligned}
 H_{hyb} &= - \sum_{\sigma \mathbf{k} j} (V_{i\mathbf{k}} c_{i\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + c.h) \\
 H_1 &= H_0 + H_U + H_{bain} \\
 &= \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu_e \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U n_{\downarrow} n_{\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

où les opérateurs c^\dagger créent des électrons sur le réseau et les opérateurs d^\dagger créent des électrons itinérants dans le bain. t_{ij} est le paramètre de saut sur l'amas considéré dans le modèle.

Les méthodes de Monte-Carlo quantique en temps continu ont d'abord été motivées par le fait que l'intégrale de chemin de la fonction de partition en temps imaginaire est bien définie mathématiquement. Il a été suggéré qu'une approche numérique serait possible, d'une part en discrétisant la variable de temps, et avec la possibilité d'utiliser une méthode Monte-Carlo pour effectuer la somme sur les états intermédiaires nécessaires pour une décomposition de la fonction de partition. Il s'avéra qu'une modélisation avec un modèle d'impureté d'Anderson est une meilleure approche, contrairement à une simulation avec un réseau complet. En effet, dans ce cas le problème de signe est réduit considérablement. À la base, le problème de signe est dû au fait qu'en mécanique quantique on a un changement de signe lors de l'échange de deux fermions identiques. Ceci entraîne dans le cas d'un calcul Monte-Carlo que les probabilités reliées à la mise à jour des configurations peuvent devenir négatives et nécessitent un traitement particulier. Il faut échantillonner avec la valeur absolue des poids pour que leur sens mathématique soit respecté, mais il faut faire intervenir la moyenne du signe $\langle s \rangle$ lors des mesures. On montre que le rapport entre la variance de cette moyenne et la moyenne est $\sigma_s / \langle s \rangle = \sqrt{1 - \langle s \rangle^2} / \langle s \rangle \rightarrow 1 / \langle s \rangle$, puisque $\langle s^2 \rangle = 1$. Lorsque la moyenne du signe devient petite, puisqu'échantillonnée sur beaucoup de configurations de signes qui alternent, le rapport $\sigma_s / \langle s \rangle$ a tendance à exploser, et il est alors difficile de calculer le signe avec une grande précision.

2.4. MONTE-CARLO QUANTIQUE EN TEMPS CONTINU (CTQMC)

Diverses quantités peuvent être calculés en CTQMC, telle que la fonction de Green. Le point de départ de la compréhension de la méthode de Monte-Carlo en temps continu est de discrétiser la fonction de partition totale du système en considérant un développement en hybridisation avec une sommation sur les différentes configurations de temps imaginaires $\{\tau_1, \dots, \tau_n; \tau'_1, \dots, \tau'_n\}$. On considère le développement de Z en une série de diagrammes de Feynmann et on échantillonne stochastiquement avec le Monte-Carlo. On représente la fonction de partition comme une somme (une intégrale) des configurations c avec des poids statistiques ω_c , $Z = \sum_c \omega_c$, et on implémente une marche aléatoire dans l'espace des configurations $c_1 \rightarrow c_2 \rightarrow c_3 \dots$. L'implémentation doit être telle que chacune des configurations possibles peut être atteinte en un nombre fini d'étapes, ce qui est le critère d'ergodicité, fondamental à l'obtention de résultats fiables. On impose que le *bilan détaillé* soit satisfait pour toutes les configurations possibles :

$$|\omega_1|p(c_1 \rightarrow c_2) = |\omega_2|p(c_2 \rightarrow c_1). \quad (2.14)$$

Dans l'équation ci-haut $p(c_1 \rightarrow c_2)$ correspond à la probabilité que l'on passe d'un état c_1 à un état c_2 . Réécrivant la fonction de partition comme une intégrale sur le temps imaginaire des différentes configurations possible, soit comme une intégrale de Feynman, on peut écrire :

$$Z = \sum_n \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n \int_0^\beta d\tau'_1 \dots \int_{\tau'_{n-1}}^\beta d\tau'_n \\ \times \text{Tr} \left[e^{-\beta H_1} T H_{hyb}^c(\tau_n) H_{hyb}^{c^\dagger}(\tau'_n) \dots H_{hyb}^c(\tau_n) H_{hyb}^{c^\dagger}(\tau'_1) \right]. \quad (2.15)$$

où l'évolution temporelle est donnée par H_1 de l'équation 2.13. En substituant explicitement les expression de H_{hyb} et remarquant que la trace sur les opérateurs est séparable, puisque les opérateurs de sites et de bain c et d agissent dans des sous-espaces vectoriels

différents on a :

$$\begin{aligned}
 Z &= Z_{bain} \sum_{\{n_\sigma\}} \prod_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau_1^{\sigma} \dots \int_{\tau_{n_{\sigma-1}}^{\sigma}}^{\beta} d\tau_{n_{\sigma}}^{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau_1'^{\sigma} \dots \int_{\tau_{n_{\sigma-1}}^{\sigma}}^{\beta} d\tau_{n_{\sigma}}'^{\sigma} \\
 &\times \text{Tr}_c \left[e^{-\beta(H_0+H_U)} T \prod_{\sigma} c_{\sigma}(\tau_{n_{\sigma}}^{\sigma}) c_{\sigma}^{\dagger}(\tau_{n_{\sigma}}'^{\sigma}) \dots c_{\sigma}(\tau_1^{\sigma}) c_{\sigma}^{\dagger}(\tau_1'^{\sigma}) \right] \\
 &\times \frac{1}{Z_{bain}} \text{Tr}_d \left[e^{-\beta H_{bain}} T \prod_{\sigma} \sum_{p_1, \dots, p_{n_{\sigma}}} \sum_{p_1', \dots, p_{n_{\sigma}}'} V_{p_1}^{\sigma} V_{p_1'}^{\sigma*} \dots V_{p_{n_{\sigma}}}^{\sigma} V_{p_{n_{\sigma}}'}^{\sigma*} \right. \\
 &\left. d_{\sigma, p_{n_{\sigma}}}^{\dagger}(\tau_{n_{\sigma}}^{\sigma}) d_{\sigma, p_{n_{\sigma}}'}(\tau_{n_{\sigma}}'^{\sigma}) \dots d_{\sigma, p_1}^{\dagger}(\tau_1^{\sigma}) d_{\sigma, p_1'}(\tau_1'^{\sigma}) \right]. \tag{2.16}
 \end{aligned}$$

Pour la trace sur les opérateurs d on peut utiliser le théorème de Wick puisque le bain est sans interaction. Le tout se décompose en produit de déterminants de matrices. Pour la trace sur les opérateurs c , on remarque que l'évolution temporelle ne renverse pas le spin et on se place dans la base des états propres de $H_U + H_0$. Dans cette base, les opérateurs d'évolution temporelle sont diagonaux. Il vaut mieux se référer à la revue complète [8], pour les formules et la théorie en entier.

2.4.2 Mises à jour Monte-Carlo

En résumé, les mises à jour Monte-Carlo, c'est-à-dire le processus de chaîne de Markov, se déroulent de la façon suivante. Une mise à jour d'une configuration \mathbf{x} à une nouvelle configuration \mathbf{y} est proposée avec une probabilité $W_{\mathbf{xy}}^{prop}$ mais acceptée seulement avec une probabilité $W_{\mathbf{xy}}^{acc}$. En fait la probabilité totale de passer de \mathbf{x} à \mathbf{y} est séparée en probabilités que le changement soit d'abord proposé et ensuite accepté. Concrètement, on propose d'insérer ou d'enlever une paire d'opérateurs de création et de destruction dans une configuration (un diagramme), avec un temps choisi aléatoirement et uniformément entre $[0, \beta)$. On s'intéresse au ratio des probabilités que le changement soit proposé, multiplié par un ratio des poids statistiques associés. Ceci a pour effet que les intervalles de temps infinitésimaux gênants, présents dans les définitions théoriques mais n'ayant pas de sens numériquement,

2.4. MONTE-CARLO QUANTIQUE EN TEMPS CONTINU (CTQMC)

disparaissent. Il reste de tout ça le ratio des probabilités, dite d'acceptation du changement. Dans le cas du Monte-Carlo cela nécessite le calcul de déterminants de matrices (la trace sur les opérateurs c dans l'équation 2.16), à chaque mise à jour, pour déterminer les poids statistiques entrant dans les ratios. Ces matrices sont construites à l'ajout de nouvelles paires d'opérateur.

Cela fait du Monte-Carlo quantique en temps continu un processus très lourd numériquement. Par la suite, après que le système se soit réchauffé, c'est-à-dire que suffisamment de mises à jour Monte-Carlo se soient effectuées pour que la simulation soit réaliste, les moyennes des quantités physiques intéressantes, comme la fonction de Green, peuvent être calculées à chaque changement subséquent. Heureusement le tout se réécrit à l'aide des mêmes déterminants de matrices, calculés pour les poids. Une partie de ces explications est tirée des notes de cours de l'école d'été sur les méthodes numériques en physique du problème à N-corps [22] de P. Werner.

En résumé, les méthodes numériques utilisées ont été brièvement expliquées. En fait, rien de ce qui a été montré plus haut n'est nécessaire pour comprendre la suite, tout ceci n'était que dans le but de montrer la complexité de la résolution des modèles physique considérés, dans le but d'obtenir des données permettant le calcul des quantités de transport, qui est l'intérêt principal de ce travail.

Chapitre 3

Théorie du transport

3.1 Réponse linéaire en problème à N-corps

3.1.1 Dérivation

La réponse linéaire résulte de l'application de la théorie des perturbations dépendantes du temps. On ne conserve que le premier terme non-trivial de l'équation de d'Heisenberg, d'où l'appellation *linéaire*. C'est donc un traitement relativement simpliste, mais qui peut devenir très complexe selon la forme des fonctions de corrélation. C'est parfois tout ce qu'on est en mesure de calculer dans le cas d'un problème à N-corps. Considérons d'abord l'effet d'une perturbation externe et le Hamiltonien H_0 total d'un système, non-perturbé à la base. On ajoute à cet Hamiltonien une perturbation, représentée par $\delta\mathcal{H}(t)$ dépendante du temps. Un exemple typique serait la réponse de l'aimantation d'un système lorsque

perturbée par un champ magnétique externe. L'expression de la perturbation est :

$$\mathcal{H}(t) = H_0 + \delta\mathcal{H}(t) \quad (3.1)$$

$$\delta\mathcal{H}(t) = - \int d^3\mathbf{r} A_i(\mathbf{r}, t) a_i(\mathbf{r}, t), \quad (3.2)$$

où A_i est l'observable se couplant au champ externe a_i , et la dépendance temporelle dans la représentation d'Heisenberg implique $A_i(\mathbf{r}, t) = e^{iHt/\hbar} A_i(\mathbf{r}, t) e^{-iHt/\hbar}$. Ici il est à noter que le champ externe est considéré comme classique. Il n'est pas quantifié. On peut qualifier cette approximation d'approche semi-classique puisque l'observable qui s'y couple est quant à elle quantifiée. Considérons un opérateur B évoluant dans le temps à partir d'un temps t_0 . À partir de l'équilibre thermique, laissons évoluer l'opérateur $B(\mathbf{r})$ avec l'opérateur d'évolution temporelle et l'Hamiltonien incluant la perturbation externe.

$$\langle B(\mathbf{r}, t)_{h.e} \rangle = \langle \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) B(\mathbf{r}) \mathcal{U}(t, t_0) \rangle \quad (3.3)$$

Ici il est nécessaire d'aborder la représentation d'interaction. Dans la représentation d'interaction, les opérateurs évoluent avec l'Hamiltonien H seulement. On pose d'abord que $\mathcal{U}(t, 0) \equiv e^{-iH_0 t/\hbar} \mathcal{U}_I(t, 0)$ et donc on a que $\mathcal{U}(t, t_0) \equiv e^{-iH_0 t/\hbar} \mathcal{U}_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar}$. Cette représentation se justifie puisque l'équation de Schrödinger démontre que l'opérateur d'évolution temporelle dans la représentation d'interaction \mathcal{U}_I évolue avec l'hamiltonien d'interaction \mathcal{H}_I , ce qui est cohérent. En effet, en prenant la dérivée partielle par rapport au temps de \mathcal{U}_I , on trouve que :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_I(t, t_0) = \delta\mathcal{H}_I(t) \mathcal{U}_I(t, t_0). \quad (3.4)$$

3.1. RÉPONSE LINÉAIRE EN PROBLÈME À N-CORPS

On a alors l'expression suivante, au premier ordre, pour l'opérateur d'évolution temporelle :

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta \mathcal{H}_I(t') \mathcal{U}_I(t', t_0). \quad (3.5)$$

Insérant l'évolution temporelle dans la représentation d'interaction dans la première équation pour l'évolution dans le temps de l'observable B , à l'équation 3.3, on obtient :

$$\langle B(\mathbf{r}, t)_{h.e.} \rangle = \langle e^{-iH_0 t_0/\hbar} \mathcal{U}_I^\dagger(t, t_0) e^{iH_0 t/\hbar} B_I(\mathbf{r}) e^{-iH_0 t/\hbar} \mathcal{U}_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} \rangle. \quad (3.6)$$

L'abréviation *h.e.* signifie hors-équilibre. L'équation 3.6 ci-haut peut se manipuler en utilisant la propriété cyclique de la trace ainsi que le fait que la matrice de densité, utilisée et cachée dans le calcul des moyennes, commute avec les opérateurs d'évolution temporelle $e^{-iH_0 t_0/\hbar}$. On obtient la forme simplifiée suivante :

$$\langle B(\mathbf{r}, t)_{h.e.} \rangle = \langle \mathcal{U}_I^\dagger(t, t_0) B_I(\mathbf{r}, t) \mathcal{U}_I(t, t_0) \rangle. \quad (3.7)$$

Nous sommes passé ci-haut à la représentation d'interaction, plutôt qu'à l'habituelle représentation de Schrödinger. Les observables acquièrent alors une dépendance temporelle évoluant selon l'hamiltonien non-perturbé.

3.1.2 Équations utiles

Avec l'équation d'Heisenberg à la rescousse, on peut écrire le terme linéaire en champ comme :

$$\begin{aligned} \delta \langle B(\mathbf{r}, t) \rangle &= \langle B(\mathbf{r}, t)_{h.e.} \rangle - \langle B(\mathbf{r}, t) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int d^3 \mathbf{r} \langle [B(\mathbf{r}, t), A_i(\mathbf{r}, t')] \rangle a_i(\mathbf{r}, t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^3 \mathbf{r} \chi_{BA_i}^R(r, t; r', t') a_i(\mathbf{r}, t'). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Cette fonction de réponse est causale, ou retardée, puisque la réponse survient après la perturbation, ce qui est assuré par la fonction thêta dans la fonction de corrélation ci-bas :

$$\chi_{BA_i}^R(r, t; r', t') = \frac{i}{\hbar} \langle [B(\mathbf{r}, t), A_i(\mathbf{r}, t')] \rangle \theta(t - t'). \quad (3.9)$$

La façon pratique de calculer $\chi_{A,B}^R$ est de faire d'abord le calcul de la bulle en fréquences de Matsubara en faisant la transformée de Fourier analytiquement avec l'opérateur d'ordonnance dans le temps. Pour des fonctions de corrélation sans corrections de vertex, le prolongement analytique nécessaire par la suite se fait très bien analytiquement.

3.2 Définitions de base et dérivations des coefficients de transport

3.2.1 Relations d'Onsager

Les relations de réciprocité d'Onsager permettent d'exprimer l'égalité de certaines quantités d'un système thermodynamique hors-équilibre, mais considérant qu'un équilibre local existe. On y définit les coefficients d'Onsager, qui sont des matrices si on considère un vrai système tridimensionnel non-uniforme. L'apport du physicien Lars Onsager fût de démontrer que ces matrices sont définies positives, et symétriques, en physique statistique. La démonstration ne sera pas énoncée ici, puisqu'il existe bien des ouvrages sur le sujet depuis les premiers articles d'Onsager parus dans les années 1930. De façon condensée ces lois s'écrivent de la façon suivante :

$$J_\alpha = \sum_\beta L_{\alpha,\beta} \nabla f_\beta, \quad (3.10)$$

où les forces thermodynamiques f sont conjuguées à ce qu'on pourrait considérer comme des déplacements. $L_{\alpha,\beta}$ est la matrice des coefficients d'Onsager.

3.2.2 Relations de transport de Luttinger

Le but de la section présentée ici est de montrer la théorie qui a permis de valider le calcul du pouvoir thermoélectrique dans le cadre de la réponse linéaire, expliqué à la section 3.1 ci-haut, qui est la méthode utilisée pour des calculs de fonctions de transport en problème à N-corps. Les nouvelles fonctions ajoutées \hat{L} se calculent dans le cadre de la réponse linéaire, en réponse au champ mécanique introduit par Luttinger $\psi(x, t)$. Le but est alors d'exprimer les constantes L que l'on sait reliées aux quantités connues en fonction de celles que l'on sait calculer \hat{L} . Ces constantes représentent par exemple la conductivité à $\omega = 0$, $L_{11} = \sigma(0)$ et le coefficient de Seebeck $S = L_{12}/TL_{11}$.

Considérons la forme utilisée dans la revue de Shastry [16] puisque les dérivations ci-dessous s'inspirent de ce qui se retrouve dans cette revue du sujet. Le point de départ de la dérivation consiste à prendre les définitions que l'on peut y retrouver. L'analogie du champ "mécanique" de Luttinger, qui a introduit l'équivalent mécanique d'un gradient thermique et donc permis le calcul avec la théorie de la réponse linéaire 3.1 de cas généralisés aux courants de chaleur et donc au pouvoir thermoélectrique. Par analogie avec le cas du courant électrique, Luttinger a défini les équations suivantes,

$$\frac{1}{V} \langle \hat{J}_x \rangle = L_{11} E_x + L_{12} (-\nabla_x T/T) + \hat{L}_{12} (-\nabla_x \psi(x, t)) \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{V} \langle \hat{J}_x^Q \rangle = L_{21} E_x + L_{22} (-\nabla_x T/T) + \hat{L}_{22} (-\nabla_x \psi(x, t)), \quad (3.12)$$

où \hat{J}_x est l'opérateur de courant électrique et \hat{J}_x^Q est l'opérateur de courant de chaleur. V est le volume total du système, E le champ électrique et $\nabla_x T/T$ la force externe (T est la température). On considère qu'une seule direction de l'espace x par simplicité d'écriture. Le champ mécanique $\psi(x, t)$ est analogue à un champ gravitationnel fictif se couplant avec la *masse effective* de densité $m_{eff}(x) = K(x)/c^2$. Dans cette expression $K_{tot} = \sum_x K +$

3.2. DÉFINITIONS DE BASE ET DÉRIVATIONS DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT

$K(x)\psi(x, t)$ et $K(x) = H(x) - \mu n(x)$ est la densité hamiltonienne grand-canonique habituelle. Les deux quantités dynamiques \hat{L}_{12} et \hat{L}_{22} sont calculables à partir de la théorie de la réponse linéaire, en considérant le champ $\psi(x, t)$ comme une petite perturbation mécanique. On peut considérer ψ comme un champ à l'origine d'une force dans les équations ci-haut. L'idée ensuite est de trouver comment éliminer les termes qu'on ne sait pas comment calculer L_{12} et L_{22} en fonctions des autres. Toujours dans la revue de Shastry, on y explique comment retrouver les inconnus indésirables dans les équations ci-haut L_{12} et L_{22} en termes des fonctions de réponse qu'il est possible de déterminer (voir les pages huit à dix de [16]). On considérera la suite du développement pour une seule fréquence et longueur d'onde, ce qui est le cas d'un traitement en réponse linéaire. L'essentiel de la démonstration est de considérer les cas en limite rapide (dites aussi de transport) ou les limites lentes et de dériver les deux termes L_{12} et \hat{L}_{22} . On arrive finalement à la conclusion qu'il est possible de faire l'association suivante, pour toute fréquence ou vecteur d'onde, et pas seulement pour les cas limites :

$$L_{ij}(q, \omega) = \hat{L}_{ij}(q, \omega). \quad (3.13)$$

Les équations à considérer pour la suite sont alors, en transformées de Fourier et en supposant des champs électrique et mécanique oscillants :

$$\frac{1}{V} \delta J_x = L_{11}(q_x, \omega)(iq_x \phi_q) + L_{12}(q_x, \omega)(iq_x \psi_q) \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{V} \delta J_Q = L_{21}(q_x, \omega)(iq_x \phi_q) + L_{22}(q_x, \omega)(iq_x \psi_q). \quad (3.15)$$

Il est à noter qu'on a $\langle \hat{J}_x(q_x) \rangle = \delta J_x$ pour le courant électrique et la notation analogue pour le courant de chaleur. Par analogie avec la première loi de la thermodynamique $T(dQ/dt) = (dE/dt) - \mu(dn/dt)$, on définit aussi le courant de chaleur de la façon suivante, où \hat{J}_x^E est le

courant d'énergie :

$$\hat{j}_x^Q = \hat{j}_x^E - \frac{\mu}{q_e} \hat{j}_x. \quad (3.16)$$

Considérons plus spécifiquement le cas du pouvoir thermoélectrique et le coefficient de transport associé L_{12} . Les fonctions de réponse à calculer sont celles résultant d'un Hamiltonien perturbé par une composante de Fourier $K_{Tot} = K + Q_2 e^{-i\omega_c t}$, où la perturbation prend la forme suivante $Q_2 = \frac{1}{iq_x} K(-q_x) \mathcal{Y}_2$. $K(-q_x) = (E - \mu N)(-q_x)$ est la densité d'énergie grand-canonique et \mathcal{Y}_2 est $iq_x \psi_q$ pour le cas du pouvoir thermoélectrique. La fréquence dénotée ω_c doit être prise comme étant $\omega + i\eta$, soit une fréquence réelle avec une petite composante imaginaire, comme c'est le cas après un prolongement analytique (voir chapitre 4) d'une fréquence de Matsubara par exemple. Le coefficient d'Onsager d'intérêt est alors, selon l'équation 43 de [16],

$$L_{12}(q_x, \omega) = \frac{1}{V} \lim_{\mathcal{Y}_2 \rightarrow 0} \frac{-\chi_{J_x, Q_2}^R(\omega_c)}{\mathcal{Y}_2}. \quad (3.17)$$

En y insérant la relation pour la perturbation de l'hamiltonien Q_2 on obtient :

$$L_{12}(q_x, \omega) = \frac{i}{q_x V} \chi_{j_x(q_x, t), K(-q_x, 0)}^R(\omega_c). \quad (3.18)$$

Ce qui nous amène à devoir calculer la fonction de réponse $\chi_{j_x(q_x, t), K(-q_x, 0)}^R$. Tout comme c'est le cas pour un calcul de fonction de réponse courant-densité, pour le cas de la conductivité électrique, deux termes seront obtenus. Dans le cas de la conductivité électrique, le terme additionnel était le terme diamagnétique. Le terme additionnel pour le cas du pouvoir thermoélectrique, s'apparentera à la moyenne de l'opérateur thermoélectrique, qui sera défini dans la suite.

3.3 Preuve de l'expression utile pour le calcul de coefficient de transport L_{12}

3.3.1 L_{12} sous sa forme complète

Le truc consiste à partir de la définition de la fonction de corrélation et d'en prendre la dérivée par rapport au temps, tel que fait dans la référence [21], mais pour la conductivité électrique. On a :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \chi_{j_x, K}^R(q_x, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \{i\theta(t) \langle [j_x(q_x, t), K(-q_x, 0)] \rangle\} \\
 &= i\delta(t) \langle [j_x(q_x, t), K(-q_x, 0)] \rangle + i\theta(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle [j_x(q_x, t), K(-q_x, 0)] \rangle \\
 &= i\delta(t) \langle [j_x(q_x, 0), K(-q_x, 0)] \rangle + i\theta(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle [j_x(q_x, 0), K(-q_x, -t)] \rangle \\
 &= i\delta(t) \langle [j_x(q_x, 0), K(-q_x, 0)] \rangle - q_x \theta(t) \langle [j_x(q_x, 0), J_Q(-q_x, -t)] \rangle,
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

où pour arriver à la dernière ligne, l'équation de conservation du courant de chaleur a été utilisée :

$$\frac{\partial K(q_x, t)}{\partial t} = -iq_x J_Q(q_x, t). \tag{3.20}$$

Prenant la transformée de Fourier en temps de la troisième ligne de l'équation 3.19, où on définit $\omega_c = \omega + i\eta$:

$$-i(\omega + i\eta)\chi_{j_x, K}^R(q_x, \omega) = i\langle [j_x(q_x), K(-q_x)] \rangle - iq_x\chi_{j_x, j_Q}^R(q_x, \omega) \quad (3.21)$$

$$\chi_{j_x, K}^R(q_x, \omega) = \frac{1}{\omega_c} \left[-\langle [j_x(q_x), K(-q_x)] \rangle + q_x\chi_{j_x, j_Q}^R(q_x, \omega) \right], \quad (3.22)$$

et portant le tout dans l'expression du coefficient d'Onsager L_{12} on obtient :

$$L_{12}(q_x, \omega) = \frac{i}{V\omega_c} \left[-\frac{\langle [j_x(q_x), K(-q_x)] \rangle}{q_x} + \chi_{j_x, j_Q}^R(q_x, \omega) \right]. \quad (3.23)$$

Dans une limite uniforme, soit $q_x \rightarrow 0$ et définissant l'opérateur thermoélectrique $\Phi_{xx} = \lim_{q_x \rightarrow 0} -\frac{\langle [j_x(q_x), K(-q_x)] \rangle}{q_x}$, on obtient :

$$L_{12}(\omega) = \lim_{q_x \rightarrow 0} \frac{i}{V\omega_c} \left[-\frac{\langle [j_x(q_x), K(-q_x)] \rangle}{q_x} + \chi_{j_x, j_Q}^R(\omega) \right] \quad (3.24)$$

$$= \frac{i}{V\omega_c} \left[\Phi_{xx} + \chi_{j_x, j_Q}^R(\omega) \right]. \quad (3.25)$$

La façon pratique de calculer ces fonctions de réponse à l'aide de la fonction de Green, est de passer à la représentation en temps imaginaire, puis de prendre le prolongement analytique après la somme sur les fréquences de Matsubara ($\chi_{j_x, j_Q}^R(q, \omega) = \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta} \chi_{j_x, j_Q}(q, i\omega_n)$).

3.3.2 Lien avec la forme conventionnelle

Il est possible de réécrire l'expression 3.23 sous une forme plus adéquate afin d'en tirer les parties imaginaire et réelle. Pour cela on doit d'abord modifier le premier terme pour l'écrire comme une fonction de corrélation courant-courant similaire au deuxième. Toujours avec l'expression en transformée de Fourier de l'équation de continuité pour le

3.3. PREUVE DE L'EXPRESSION UTILE POUR LE CALCUL DE COEFFICIENT DE TRANSPORT L_{12}

courant de chaleur ($i\omega K(q_x, \omega) = iq_x J_Q(q_x, \omega)$), on trouve que :

$$\begin{aligned} \frac{\langle [j_x(q_x, 0), K(-q_x, 0)] \rangle}{q_x} &= \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, K}(q_x, \omega')}{q_x} \\ &= - \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega')}{\omega'}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Portant le tout dans l'expression du coefficient de transport on a :

$$\begin{aligned} L_{12}(q_x, \omega) &= \frac{1}{iV(\omega + i\eta)} \left[\int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega')}{\omega'} + \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega')}{\omega' - \omega - i\eta} \right] \\ &= \frac{1}{iV(\omega + i\eta)} \left[\int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega')(\omega + i\eta)}{\omega'(\omega' - \omega - i\eta)} \right] \\ &= \frac{1}{iV} \left[\int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega')}{\omega'(\omega' - \omega - i\eta)} \right]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Avec une forme particulière du théorème de Sokhotski-Plemelj pour une intégration sur l'axe réel, on extrait les parties réelles et imaginaires de l'expression ci-haut, où \mathcal{P} est la partie principale :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_a^b \frac{f(x)}{x \pm i\epsilon} dx = \mp i\pi f(0) + \mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x)}{x} dx. \quad (3.28)$$

Considérant la limite de l'équation 3.27 lorsque $\eta \rightarrow 0^+$, on trouve :

$$\begin{aligned} L_{12}(q_x, \omega) &= \frac{1}{iV} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega')}{\omega'} \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega' - \omega} \right) + i\pi\delta(\omega' - \omega) \right] \\ L_{12}(q_x, \omega) &= \frac{1}{iV} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega')}{\omega'} \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega' - \omega} \right) + \frac{1}{V} \frac{\chi''_{j_x, j_Q}(q_x, \omega)}{\omega}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

D'où l'expression de la partie réelle du coefficient de transport L_{12} , exprimée en fonction de la fonction de réponse en fréquences imaginaires :

$$\text{Re } L_{12}(q_x, \omega) = \frac{1}{V} \frac{\text{Im } \chi_{j_x, j_Q}^R(q_x, \omega)}{\omega} \equiv \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta} \frac{1}{V} \frac{\text{Im } \chi_{j_x, j_Q}(q_x, i\omega_n)}{\omega}. \quad (3.30)$$

Le passage de χ'' à χ^R est direct puisque nous avons 2 opérateurs hermitiques j_x et j_Q qui ont la même signature sous inversion du temps. La relation suivante est alors valable : $\text{Im } \chi_{j_x, j_Q}^R = \chi''_{j_x, j_Q}(\omega)$. La relation de droite de l'équation ci-haut est par ailleurs celle qu'on retrouve le plus souvent dans la littérature et celle qu'on essaie de calculer numériquement. On peut donc faire le lien entre la formulation des relations de transport dans la revue de Shastry [16] et la fonction de réponse qu'on implémente numériquement, tel que présenté dans la thèse de Louis-François Arseneault [1], à l'équation 1.108. En effet, on démontre que l'on peut calculer la réponse avec l'équation 3.30 ci-haut, plutôt que l'équation 3.18, qui inclue un opérateur K difficile à interpréter selon nos modèles numériques.

3.4 Calculs analytique des fonctions de corrélation : différentes approches

3.4.1 Définitions utiles

Suite à la section sur la réponse linéaire 3.1, et plus particulièrement suite au dernier paragraphe, on peut écrire la fonction de corrélation pour deux opérateurs quelconques, qui ici sont des opérateurs de courant, comme suit :

$$\chi_{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{1}{V} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau \mathbf{j}_a(\mathbf{q}, \tau) \mathbf{j}_b(-\mathbf{q}, 0) \rangle, \quad (3.31)$$

où, se référant à l'équation 3.30 ainsi qu'à la section 3.2, les coefficients de transport entrant dans les équations de réponse en champ électromagnétique sont, après prolongement analytique :

$$L_{ab}(\mathbf{q}, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\frac{\text{Im} \chi_{a,b}(\mathbf{q}, \omega + i\eta)}{\omega} \right]. \quad (3.32)$$

On vérifie que cette définition donne le même résultat final. Les courants utilisés en temps réel sont les suivants : \mathbf{j} est le courant électrique et \mathbf{j}_Q le courant de chaleur. Se référer à

l'article de Paul et Kotliar [14] pour de plus amples détails. On a l'expression suivante :

$$\mathbf{j}(t = 0) = e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (3.33)$$

$$\mathbf{j}_{\mathbf{Q}}(t = 0) = \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \dot{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - \dot{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma}), \quad (3.34)$$

où la notation \dot{c} représente la dérivée temporelle de l'opération c . En temps imaginaire le facteur i devant $\mathbf{j}_{\mathbf{Q}}$ disparaît dans la définition $t = i\tau$:

$$\mathbf{j}_{\mathbf{Q}}(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}(\tau) \dot{c}_{\mathbf{k}, \sigma}(\tau) - \dot{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{k}, \sigma}(\tau)). \quad (3.35)$$

3.4.2 Cas de la fonction de corrélation L_{11}

Première méthode

Dans un cas sans interaction, le théorème de Wick s'applique, et tel que fait dans le cours de problèmes à N-corps [21] pour la fonction de corrélation densité-densité, il est possible de factoriser en produit de fonction de Green. Ici $q = 0$, parce qu'on considère le cas d'un courant uniforme. De façon plus générale, ceci s'avère aussi vrai pour un modèle à une bande en dimension infinie, puisque dans ce cas on peut négliger les corrections de vertex. En prenant la transformée de Fourier selon la définition suivante en temps imaginaire

$$\mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, \tau) = 1/\beta \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) :$$

$$\begin{aligned} \chi_{11}(i\omega_n) &= -\frac{e^2}{dV} \lim_{q \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \\ &\quad \times \sum_{ip_n} \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n + ip_n) \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, ip_n). \end{aligned} \quad (3.36)$$

3.4. CALCULS ANALYTIQUE DES FONCTIONS DE CORRÉLATION : DIFFÉRENTES APPROCHES

Il est à noter qu'une seule composante de \mathbf{v}_k a été choisie pour le calcul de la fonction de corrélation ci-haut à l'équation 3.36, d'où le produit scalaire avec un vecteur unitaire \mathbf{x} dans une direction de l'espace. De plus, l'on se place à vecteur d'onde nul ($\mathbf{q} = 0$). Dans un premier temps, on peut effectuer la somme sur les fréquences de Matsubara et ensuite prendre le prolongement analytique avec la méthode des fractions partielles, ce qui est la façon la plus simple et commune. Pour obtenir la forme désirée, considérons l'expression en représentation spectrale et effectuons l'algèbre pour décomposer en fractions partielles le produit de fonctions de Green :

$$\begin{aligned} \sum_{ip_n} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n + ip_n) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n) &= \quad (3.37) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_2}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left(\frac{1}{ip_n - \epsilon_1} \frac{1}{i\omega_n + ip_n - \epsilon_2} \right) &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_2}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left(\frac{1}{ip_n - \epsilon_1} - \frac{1}{i\omega_n + ip_n - \epsilon_2} \right) \frac{1}{i\omega_n + \epsilon_1 - \epsilon_2}. \end{aligned}$$

Ensuite, pour la somme sur les fréquences de Matsubara, il faut se référer à la section *Sums over Matsubara frequencies* des notes de problèmes à N-corps [21]. La sommation fait apparaître les distributions de Fermi-Dirac $n_F(\epsilon)$ dans l'expression :

$$\begin{aligned} \sum_{ip_n} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n + ip_n) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n) &= \quad (3.38) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_2}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \frac{n_F(\epsilon_1) - n_F(\epsilon_2)}{i\omega_n + \epsilon_1 - \epsilon_2}, \end{aligned}$$

et portant le tout dans l'expression de la fonction de corrélation on obtient :

$$\chi_{11}(i\omega_n) = -\frac{e^2}{dV} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{x})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_2}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \frac{n_F(\epsilon_1) - n_F(\epsilon_2)}{i\omega_n + \epsilon_1 - \epsilon_2}. \quad (3.39)$$

Procédant d'abord au prolongement analytique, i.e $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ et prenant la partie imaginaire, en portant le tout dans l'expression du coefficient de transport L_{11} , on obtient en

considérant seulement la partie imaginaire de la relation 3.28 :

$$L_{11} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{e^2}{d} \frac{1}{\beta V \omega} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_2}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \quad (3.40)$$

$$\times \pi(n_F(\epsilon_1) - n_F(\epsilon_2)) \delta(\omega + \epsilon_1 - \epsilon_2),$$

$$L_{11} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{e^2}{2d\beta V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) A(\mathbf{k}, \epsilon_1 + \omega) \frac{n_F(\epsilon_1) - n_F(\epsilon_1 + \omega)}{\omega} \quad (3.41)$$

$$= \frac{e^2}{2d\beta V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \left(\frac{-\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) A_{\sigma}^2(\mathbf{k}, \epsilon).$$

Ce qui démontre l'équation 19 de l'article de Paul et Kotliar [14].

Méthode 2 : intégration particulière dans le plan complexe

Pour démontrer l'expression suivante, une méthode différente de celle rencontrée habituellement doit être utilisée. Puisque $\mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, z)$ a un pôle à $\text{Im}z = 0$ et que $\mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, z + i\epsilon_n)$ en a un à $\text{Im}z = -i\epsilon_n$, on a :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, i\epsilon_n + ip_n) \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, ip_n) \quad (3.42)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} n_F(\epsilon) A_{\sigma}(\mathbf{k}, \epsilon) [\mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, \epsilon + i\omega_n) + \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, \epsilon - i\omega_n)].$$

3.4. CALCULS ANALYTIQUE DES FONCTIONS DE CORRÉLATION : DIFFÉRENTES APPROCHES

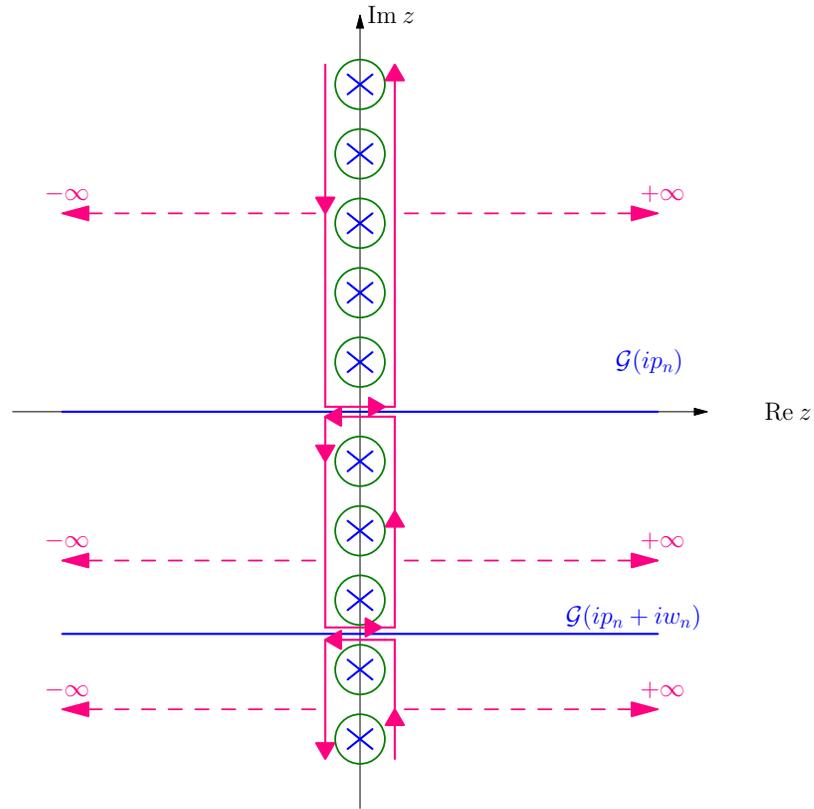


Figure 3.1 – Contour d’intégration dans le plan complexe de la fonction de réponse χ_{j-j} ou χ_{j_0-j} . Les lignes bleues représentent les endroits où $g(z)$ a une coupure et les lignes pointillées que les contours vont à l’infini.

Tout d’abord, il faut se rappeler la façon de sommer sur les fréquences le long de l’axe imaginaire. Le truc habituel est de passer dans le plan complexe et d’utiliser une fonction $(-\beta/(e^{\beta z} + 1))$ ayant des poles aux fréquences fermioniques $z = ip_n$. De plus, cette fonction a un résidu unité à chacun de ces poles.

$$\frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n) = -\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, z)}{e^{\beta z} + 1}. \quad (3.43)$$

On démontre cela en considérant $z = ip_n + \delta z$, et en prenant ensuite la limite $z - ip_n \rightarrow 0$. Ici, aucun facteur de convergence additionnel n’est nécessaire avant d’effectuer la somme, puisque le produit de fonctions de Green à sommer a un comportement en $\sim 1/z^2$ à hautes

fréquences. La somme à effectuer est donc :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n + i\omega_n) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, z) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, z + i\omega_n). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Considérant le parcours dans le plan complexe illustré à la figure 3.1, on a que les contours verticaux peuvent être déplacés à l'infini. Leur contribution est nulle, selon le lemme de Jordan. En effet, puisque le produit de fonctions à sommer décroît en $1/z^2$, ou en $1/R^2$ en coordonnées polaires ($z \rightarrow Re^{i\theta}$) faisant disparaître le facteur de volume proportionnel à R :

$$- \lim_{R \rightarrow \infty} \int iRe^{i\theta} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, Re^{i\theta}) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, Re^{i\theta} + i\omega_n) d\theta = 0. \quad (3.45)$$

Les contributions non-nulles à l'intégration sur le parcours se situent alors uniquement près des coupures à $z = \epsilon$ et $z = \epsilon - i\omega_n$, d'où le changement de nom de variable et d'arguments des fonctions de Green. Il reste les intégrales sur les parcours horizontaux en sens inverse et infiniment près l'un de l'autre, disons d'une distance $i\eta$. On a alors :

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n + i\omega_n) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi i} n_F(\epsilon) [-\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon - i\eta) + \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon + i\eta)] \mathcal{G}_\sigma(\epsilon + i\omega_n) \\ & \quad + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi i} n_F(\epsilon) [-\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon - i\eta) + \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon + i\eta)] \mathcal{G}_\sigma(\epsilon - i\omega_n). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Avec la définition de la fonction spectrale, soit $A(\mathbf{k}, z) = i [\mathcal{G}^R(\mathbf{k}, z) - \mathcal{G}^A(\mathbf{k}, z)]$ et reconnaissant des fonctions de Green avancées et retardées $\mathcal{G}^{R,A}(\mathbf{k}, z) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \mathcal{G}(\mathbf{k}, z \pm i\eta)$ dans l'équation précédente, on démontre alors l'expression de l'article, l'équation 3.42 ci-haut.

3.4.3 Cas de la fonction de corrélation L_{12}

Méthode 1

La fonction de corrélation courant électrique-courant de chaleur, lorsqu'on néglige les corrections de vertex, est :

$$\begin{aligned} \langle T_\tau j_Q(\tau)j(0) \rangle &= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})^2 \left\{ - \langle T_\tau \dot{c}_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(0) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle \langle \dot{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}(0) \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Il est à noter qu'ici on ne change *pas* $\tau \rightarrow -\tau$ dans les arguments des opérateurs, tel que la notation dans l'article de Kotliar et Paul. C'est-à-dire qu'on utilise la définition de l'opérateur de Matsubara (c_{def}^\dagger) plutôt que (c^\dagger). Cette notation est conservée tout au long des calculs de fonctions de réponse :

$$\begin{aligned} c_{def}^\dagger(\tau) &= e^{H\tau} c^\dagger e^{-H\tau} \neq e^{-H\tau} c^\dagger e^{H\tau} \\ &= [c(-\tau)]^\dagger. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Il est expliqué dans cet article [14] qu'il est légitime de décomposer la fonction de corrélation courant de chaleur-courant électrique comme ci-haut. En effet, puisque pour le modèle de Hubbard, on trouve que $\dot{c}_{i,\sigma} = i[H, c_{i,\sigma}] = -i \sum_j t_{ij} c_{j,\sigma} - iU c_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + i\mu c_{i,\sigma}$, on en déduit que la fonction de corrélation $\langle j_Q(\tau)j(0) \rangle$ serait une fonction de corrélation à quatre sommets, et que sa décomposition en produit de fonctions de Green et en leurs dérivées ne serait pas possible. Dans cet article ils font une analyse dimensionnelle, dans la limite *exacte* de la DMFT, soit en dimension infinie ou très grande, et concluent que le terme d'interaction de Hubbard peut être négligé $U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$. La factorisation en produit de fonctions de Green est appropriée.

Pour dériver l'expression de la fonction de réponse, on doit d'abord utiliser les équations du mouvement pour la fonction de Green en temps imaginaire :

$$\partial/\partial\tau\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T_\tau\partial/\partial\tau c(\tau)c^\dagger(0)\rangle - \delta(\tau), \quad (3.49)$$

et exprimer le tout en fréquences de Matsubara. Remarquant de plus que $\langle T_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(0)c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(\tau)\rangle = -\mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau)$, puisque selon la définition générale $-\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau - \tau') = \langle T_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(\tau')\rangle$, et introduisant tout cela dans le premier terme de l'équation 3.47 ci-haut en transformées de Fourier :

$$\begin{aligned} & \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \left(\frac{\partial\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau) + \delta(\tau)\mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau) \right) \\ &= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ip_m} -ip_m e^{-ip_m\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_m) \right) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} e^{ip_l\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l) \right) \\ &+ \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \delta(\tau)\mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau) \\ &= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ip_m} -ip_m e^{-ip_m\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_m) \right) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} e^{ip_l\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l) \right) \\ &+ \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau = 0-) \\ &= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta^2} \sum_{ip_m, ip_l} (-ip_m)\beta \delta_{(i\omega_n, ip_m - ip_l)} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_m)\mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l) \\ &+ \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 n_{\mathbf{k},\sigma} \\ &= -\frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} (ip_l + i\omega_n)\mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l)\mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l + i\omega_n) \\ &+ \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 n_{\mathbf{k},\sigma}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

où $n_{\mathbf{k},\sigma}$ est la densité d'électrons. En faisant un traitement similaire pour la partie correspondante ($\langle T_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(0)\dot{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(\tau)\rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0)\rangle$) sachant que l'équation du mouvement

3.4. CALCULS ANALYTIQUE DES FONCTIONS DE CORRÉLATION : DIFFÉRENTES APPROCHES

pour $\mathcal{G}(-\tau)$ est $\langle T_\tau c(0)c^\dagger(\tau) \rangle = \delta(\tau) - \partial/\partial \tau \tau \mathcal{G}(-\tau)$, on vérifie qu'on obtient l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
& \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \left(\frac{\partial \mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau)}{\partial \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) - \delta(\tau) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) \right) \\
&= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta d\tau \left[e^{i\omega_n \tau} \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ip_m} ip_m e^{ip_m \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_m) \right) \right. \\
&\quad \times \left. \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} e^{-ip_l \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l) \right) \right] - \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \delta(\tau) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) \\
&= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta^2} \sum_{ip_m, ip_l} (ip_m) \beta \delta_{(ip_m, ip_l - i\omega_n)} \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_m) \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l) \\
&\quad - \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau = 0+) \\
&= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} (ip_l - i\omega_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l) \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l - i\omega_n) \\
&\quad - \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 (-1 + n_{\mathbf{k}, \sigma}) \\
&= \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} ip_l \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l + i\omega_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, ip_l) \\
&\quad - \frac{e}{2d} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 (-1 + n_{\mathbf{k}, \sigma}).
\end{aligned} \tag{3.51}$$

À la dernière ligne, un changement de variable sommée a été effectué $ip_l \rightarrow ip_l + i\omega_n$. Dans ce cas, cette expression peut être combinée à l'autre partie plus haut. En remarquant que les deux parties doivent être soustraites l'une de l'autre selon la décomposition de Wick, on obtient χ_{12} avec le terme supplémentaire de densité, qui s'avère important pour la convergence sur les fréquences de Matsubara, tel que démontré plus bas. Il semble donc préférable d'inclure ce dernier terme dans le cas du calcul du pouvoir thermoélectrique directement en fréquences imaginaires lorsque l'objectif est d'en faire le prolongement

analytique par la suite :

$$\chi_{21}(i\omega_n) = -\frac{e}{d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \left\{ \sum_{ip_l} \left(ip_l + \frac{i\omega_n}{2} \right) \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n + ip_l) \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, ip_l) - n_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \right\}. \quad (3.52)$$

Le coefficient de transport L_{12} est obtenue en faisant le prolongement analytique et en divisant par la fréquence (voir l'équation 3.32. Louis-François Arseneault a fait une analyse et une discussion de l'importance du terme additionnel de densité lors d'un calcul effectué en fréquences de Matsubara dans sa thèse [1] (voir le chapitre 1 page 44). La somme sur les fréquences de Matsubara s'effectue toujours avec une décomposition en fractions partielles, en représentation spectrale, avec quelques différences par rapport au cas précédent, en raison du facteur multiplicatif ip_n devant le produit de fonctions de Green :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} \int \int \frac{d\epsilon_1 d\epsilon_2}{(2\pi)^2} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \left\{ \frac{ip_l + \frac{i\omega_n}{2}}{(ip_l - \epsilon_1)(i\omega_n + ip_l - \epsilon_2)} \right\} - n_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} & \quad (3.53) \\ = \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} \int \int \frac{d\epsilon_1 d\epsilon_2}{(2\pi)^2} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \left\{ \frac{ip_l + i\omega_n/2}{(ip_l - \epsilon_1)(i\omega_n + ip_l - \epsilon_2)} - \frac{1}{ip_l - \epsilon_1} \right\}. & \quad (3.54) \end{aligned}$$

L'expression suivante, la densité en somme sur les fréquences de Matsubara, a été utilisée :

$$n_{\mathbf{k}, \sigma} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} \int \frac{d\epsilon_1}{2\pi} \operatorname{Re} \left[\frac{A(\mathbf{k}, \epsilon_1)}{ip_l - \epsilon_1} \right]. \quad (3.55)$$

Il faut comprendre que dans ce cas on somme les fréquences de Matsubara sur les indices négatifs et les positifs en même temps, ce qui revient à prendre la partie réelle. Voir l'annexe D pour plus de détails. Il est à remarquer que la constante de 1/2 s'annule avec celle présente dans l'équation ci-haut, provenant de la somme de $\mathcal{G}(0+)$ et de $\mathcal{G}(0-)$, et donc disparaît dans ce qui suit. En combinant les termes dans l'équation 3.53, on constate qu'il n'y a aucune ambiguïté pour ce qui est de la somme sur les fréquences, puisque les termes

3.4. CALCULS ANALYTIQUE DES FONCTIONS DE CORRÉLATION : DIFFÉRENTES APPROCHES

sommés sont de l'ordre de $1/ip_l^2$, et l'habituelle décomposition en fractions partielles est possible :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l} \int \int \frac{d\epsilon_1 d\epsilon_2}{(2\pi)^2} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \left\{ \frac{\epsilon_2 - i\omega_n/2}{(ip_l - \epsilon_1)(i\omega_n + ip_l - \epsilon_2)} \right\} \\ & = \int \int \frac{d\epsilon_1 d\epsilon_2}{(2\pi)^2} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \left(\epsilon_2 - \frac{i\omega_n}{2} \right) \frac{n_F(\epsilon_1) - n_F(\epsilon_2)}{i\omega_n + \epsilon_1 - \epsilon_2}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$\chi_{21}(i\omega_n) = -\frac{e}{d} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_2}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon_2) \left(\epsilon_2 - \frac{i\omega_n}{2} \right) \frac{n_F(\epsilon_1) - n_F(\epsilon_2)}{i\omega_n + \epsilon_1 - \epsilon_2}. \quad (3.57)$$

Comme précédemment, on procède d'abord au prolongement analytique, ensuite on prend la partie imaginaire. La partie en delta de Dirac fait disparaître l'intégrale sur ϵ_2 . Il reste, pour le coefficient de transport L_{21} :

$$\begin{aligned} L_{21}(\omega) &= \frac{e}{2d\beta} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} A(\mathbf{k}, \epsilon) A(\mathbf{k}, \epsilon + \omega) \\ & \quad \times \left(\epsilon + \frac{\omega}{2} \right) \frac{n_F(\epsilon) - n_F(\epsilon + \omega)}{\omega}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Dans la limite $\omega \rightarrow 0$ le terme multiplié par ω s'annule. Le résultat est donc presque semblable à celui de L_{11} , mais avec un ϵ de plus :

$$L_{21} = \frac{e}{2d\beta} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \epsilon \left(\frac{-\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) A_{\sigma}^2(\mathbf{k}, \epsilon), \quad (3.59)$$

où $n_F(\epsilon)$, est encore la distribution de Fermi-Dirac.

Méthode 2

La dérivation de l'équation en haut de l'équation 20 dans l'article [14] (où le terme additionnel de densité a été négligé) se fait de la même façon qu'à la section "intégration dans le plan complexe spéciale", sauf que le facteur ip_n multiplicatif est changé en facteur ϵ lors de l'intégration sur les coupures. De ce fait on obtient :

$$\frac{1}{\beta} \left\{ \sum_{ip_n} \left(ip_n + \frac{i\omega_n}{2} \right) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n + ip_n) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, ip_n) - n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right\} = \quad (3.60)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} n_F(\epsilon) A_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon) \left[\left(\epsilon + \frac{i\omega_n}{2} \right) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon + i\omega_n) + \left(\epsilon - \frac{i\omega_n}{2} \right) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon - i\omega_n) \right],$$

où les termes additionnels $(-n_{\mathbf{k}} + 1/2)/\beta$ ont été ajoutés, et sont une correction à l'équation de Paul et Kotliar. Ces termes sont nécessaires pour la convergence lorsqu'on fait le calcul directement en fréquences de Matsubara. De plus, l'expression de droite de 3.60 suppose qu'il y a convergence sur les demi-cercles à l'infini lorsqu'on déforme le contour d'intégration de la figure 3.1, ce qui n'est pas le cas si le terme additionnel $(-n_{\mathbf{k}} + 1/2)/\beta$ est absent. Le cas de χ_{22} et donc de L_{22} est discuté à l'annexe A.

3.5 Comportement asymptotique de la conductivité longitudinale

3.5.1 Utilité et équation à dériver

Il peut être nécessaire d'ajouter un comportement asymptotique à l'aide d'une fonction connue analytiquement lors d'un calcul de fonctions de transport en fréquences réelles, que ce soit en raison d'un problème de convergence numérique ou de données brutes insuffisantes. Le but de cette section est de démontrer l'expression du comportement asymptotique parfois utilisée pour accélérer les calculs numériques de sommation sur les fréquences de Matsubara pour obtenir la conductivité électrique. Il est à remarquer que dans le cas de ce travail de maîtrise, la fonction de corrélation causant le plus de problèmes est la conductivité thermique, et aucune expression analytique de son comportement haute fréquence n'est connue. De ce fait, le processus numérique difficile n'est pas vraiment simplifié. Néanmoins, les calculs pour la conductivité électrique sont présentés ici, puisque ceci pourrait être utile à une éventuelle dérivation de d'autres comportements asymptotiques de fonctions de corrélation plus complexes.

La forme analytique de la conductivité longitudinale à hautes fréquences de Matsubara sera alors détaillée ici. Le cas de la conductivité transverse, le long de l'axe perpendiculaire au plan, est moins évident à évaluer en pratique, puisque les fonctions de Green utilisées dans tous les calculs sont indépendantes de k_z . En raison de ce problème technique, ce qui suit concerne la conductivité longitudinale. En effet, lorsqu'on considère la conductivité

ité transverse avec ces données, on constate que la queue analytique est exactement nulle. Le choix du calcul de la conductivité transverse est purement un choix pratique. Le but était de comparer avec les résultats de Giovanni Sordi, parus dans l'article à la référence [19]. Ceci dit, la dérivée seconde de la relation de dispersion, une fois intégrée sur toutes les valeurs de k_z , donne un résultat nul. De ce fait, on a comme premier moment pour la conductivité transverse un résultat nul. Dans le cas longitudinal, l'intégration fait aussi intervenir la dépendance en k_x et k_y des fonctions de Green, et le résultat n'est donc pas trivial.

Tout d'abord, considérons la formule de Kubo en fréquences de Matsubara, toujours dans le cadre de la réponse linéaire en champ ($\langle j_x(q_x, \omega) \rangle = \sigma_{xx}(q_x, \omega) E_x(q_x, \omega)$), équation 7.51 des notes de cours de problèmes à N-corps [21]. Ici on est en fréquences complexes, donc les équations de cette section sont plutôt en fonction de $i\omega_n$. On a l'expression suivante, valide en général dans le continuum :

$$\sigma_{xx}(i\nu_n) = \frac{1}{i(i\nu_n)} \left(\chi_{j_x, j_x}^R(i\nu_n) - \frac{ne^2}{m} \right), \quad (3.61)$$

où le deuxième terme donné par la fameuse règle de somme-f. ω est la fréquence réelle et donc χ'' est la partie imaginaire de la fonction de réponse en fréquences réelles,

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi_{j_x, j_x}''(\omega)}{\omega} = \frac{ne^2}{m}. \quad (3.62)$$

Le résultat précédent est valable dans le cas du continuum. Il doit être généralisé au cas du modèle de Hubbard.

3.5.2 Dérivation

Dans le cas intéressant ici, on part de l'Hamiltonien de Hubbard en présence d'un champ électromagnétique. Dans le cas d'un Hamiltonien de liaisons fortes, il est possible

3.5. COMPORTEMENT ASYMPTOTIQUE DE LA CONDUCTIVITÉ LONGITUDINALE

de justifier l'ajout du champ électromagnétique en modifiant les paramètres de sauts inter-sites avec un facteur de phase [14] exponentiel, appelé substitution de Peierls, contenant l'intégrale de ligne du potentiel vecteur. L'Hamiltonien de Hubbard à deux dimensions est alors :

$$H(t) = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} e^{-i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t)} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (3.63)$$

où l'intégrale est prise le long du chemin le plus direct entre les sites i et j . Il est à préciser que dans l'expression ci-haut, la constante de Planck, l'unité de charge électrique et la vitesse de la lumière ont été prises égales à l'unité. L'opérateur courant total, constitué du courant paramagnétique et diamagnétique, dans la représentation de Schrödinger, est donné par :

$$\mathbf{j}_x^T(\mathbf{r}, t) = - \frac{\delta H(t)}{\delta A_x(\mathbf{r}, t)}. \quad (3.64)$$

En considérant un potentiel vecteur variant peu sur le réseau, $\int_i^j d\mathbf{x}_{ij} \cdot \mathbf{A}_x(\mathbf{r}, t) \approx \frac{x_{ij}}{2} (A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_j, t))$ où x_{ij} est la composante x du vecteur $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$, on obtient en effectuant la dérivée :

$$\mathbf{j}_x^T(\mathbf{r}_l, t) = \frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta (c_{l,\sigma}^\dagger c_{l-\delta,\sigma} + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma}) \quad (3.65)$$

$$- \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta (c_{l,\sigma}^\dagger c_{l-\delta,\sigma} + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma}). \quad (3.66)$$

δ_x est la projection selon x du vecteur δ entre les voisins et t_δ est l'élément de matrice de saut correspondant. Pour un champ électrique uniforme, on peut prendre le potentiel vecteur indépendant de la position, et donc $q = 0$. Finalement l'expression du courant total

est :

$$j_x^T(t) = \frac{-1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - A(t) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.67)$$

$$\equiv j_x^P(t) + j_x^D(t). \quad (3.68)$$

Où $j_x^P = \frac{-1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$. En réponse linéaire la dépendance en fréquences du courant est :

$$\langle j_x^T(\omega) \rangle_{h.e.} = \langle j_x^T(\omega) \rangle_{eq.} + \chi_{j_x, j_x}(\omega) A_x(\omega), \quad (3.69)$$

où $j_x^T(t)$ est le courant total, avec la contribution paramagnétique et diamagnétique. Se plaçant dorénavant dans une représentation à température finie, en fréquences de Matsubara :

$$\langle j_x^T(i\omega_n) \rangle_{h.e.} = \langle j_x^T(i\omega_n) \rangle_{eq.} + \chi_{j_x, j_x}(i\omega_n) A_x(i\omega_n). \quad (3.70)$$

Les abréviations *eq.* et *h.e.* signifient respectivement que les moyennes sont prises à l'équilibre et hors-équilibre. et $j_x^T(i\omega_n)$ est la transformée de Fourier complexe de $j_x^T(\tau)$. L'évolution temporelle des opérateurs est donnée comme suit $j^T(\tau) = e^{H_0\tau} j^T e^{-H_0\tau}$, où H_0 est l'hamiltonien de l'équation 3.63 sans champ externe A . Puisque la moyenne à l'équilibre du courant paramagnétique est nulle ($\langle j_x^P(\tau) \rangle_{eq.} = 0$), on a que la moyenne thermodynamique à l'équilibre de l'opérateur courant total en représentation d'interaction est donné par le terme diamagnétique seulement

$$\langle j_x^T(\tau) \rangle_{eq.} = \langle j_x^D(\tau) \rangle_{eq.}. \quad (3.71)$$

3.5. COMPORTEMENT ASYMPTOTIQUE DE LA CONDUCTIVITÉ LONGITUDINALE

De ce fait, on obtient :

$$\langle j_x^T(\tau) \rangle = -A(\tau) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \quad (3.72)$$

$$= - \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} A(\tau) \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle. \quad (3.73)$$

À l'aide de la définition de la conductivité électrique, reliant le champ électrique au courant $\langle j_x^T(i\omega_n) \rangle = \sigma_{xx}(i\omega_n) E_x(i\omega_n)$, et sachant que le champ électrique est relié au potentiel vecteur ($E_x(i\omega_n) = i(i\omega_n) A_x(i\omega_n)$). On a finalement que :

$$\sigma_{xx}(i\omega_n) = \frac{- \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle + \chi_{j_x, j_x}(i\omega_n)}{i(i\omega_n)} \quad (3.74)$$

$$= \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \frac{1}{\omega_n} \right) - \frac{\chi_{j_x, j_x}(i\omega_n)}{\omega_n}. \quad (3.75)$$

Il est à remarquer que dans toutes les équations de fonctions de réponse, la fréquence de Matsubara à gauche de l'égalité (ici ω_n) est une fréquence paire, puisqu'elle est bosonique. Les fréquences sommées à droite de l'égalité sont des fréquences fermioniques impaires. On s'intéresse au cas à très grande fréquence de Matsubara. Lorsque $\omega_n \rightarrow \infty$, la fonction de réponse $\chi_{j_x, j_x}(\omega_n) \rightarrow 0$, et donc le deuxième terme de l'équation ci-haut est négligeable comparativement au premier. Le numérateur non-négligeable du second terme correspond donc au premier moment à haute fréquence de la conductivité électrique, soit le coefficient du terme en $1/\omega_n$ de la limite asymptotique de σ_{xx} .

$$\lim_{\omega_n \rightarrow \infty} \sigma_{xx}(i\omega_n) = - \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \frac{1}{\omega_n} \quad (3.76)$$

La relation de dispersion utilisée ici dépend du modèle. Dans le cas étudié ici, avec un amas carré à quatre sites, celle utilisée est $\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))$. Il reste l'évaluation de la densité moyenne aux différents vecteurs d'onde. Pour ce faire, il faut revenir à l'évaluation

de la densité avec la fonction de Green en fréquence de Matsubara, qui est :

$$\langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n = -\infty}^{+\infty} G(\mathbf{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+}. \quad (3.77)$$

Cette dernière expression est très difficile à calculer numériquement. La convergence est très lente, et le facteur de convergence exponentiel est plutôt inutile. Même avec plus de 2500 fréquences de Matsubara et des valeurs de 0^+ de plus en plus petites, jusqu'à 10^{-8} , la somme ne semble même pas tendre vers un résultat ayant du sens. Ce facteur de convergence s'est avéré sans conséquence sur le résultat numérique, bien qu'il soit mathématiquement crucial lors d'une intégration dans le plan complexe. Une façon de procéder numériquement est de laisser tomber le facteur de convergence exponentiel et d'utiliser la formule D.17 :

$$\langle n_{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \text{Re} [G(\mathbf{k}, i\nu_n)], \quad (3.78)$$

où les termes à $n < 0$ et $n > 0$ sont combinés deux à deux lors de la sommation pour assurer rigoureusement la convergence mathématique, ce qui revient à prendre la partie réelle, comme ce qui est démontré dans l'annexe D, dans le cadre de l'analyse complexe. L'expression finale pour les deux spins à évaluer numériquement, pour le cas considéré ici est alors :

$$\lim_{\omega_n \rightarrow \infty} \sigma_{xx}(i\omega_n) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} 2t \cos(k_x) \frac{1}{\omega_n} \left(1 + \frac{2}{\beta} \sum_{i\nu_n} G(\mathbf{k}, i\nu_n) \right). \quad (3.79)$$

Chapitre 4

Prolongement analytique

4.1 Méthode d'entropie maximale

4.1.1 Mise en contexte

Le prolongement analytique défini en 2.9, lorsqu'effectué sur des données numériques, est un processus compliqué et instable. Une méthode d'interpolation peut être utilisée, décrite dans la section suivante 4.2.1. Dans ce cas il n'y a pas de condition sur la fonction à traiter, sauf que les incertitudes sur les données doivent être négligeables. Autrement, cette méthode peut donner des résultats peu fiables. Dans ce chapitre sera présentée la méthode de prolongement analytique principalement utilisée pour ce travail, soit celle d'entropie maximale, ainsi qu'une autre méthode parfois utile, celle des approximants de Padé. Le truc

pour obtenir le prolongement d'une fonction de réponse quelconque sera aussi présenté à la fin du chapitre.

4.1.2 La méthode en bref

Le but de la procédure est de résoudre l'équation générale suivante :

$$G(i\omega_n) = \int d\omega K(i\omega_n, \omega)A(\omega). \quad (4.1)$$

On y introduit un noyau ($K(i\omega_n, \omega)$) correspondant au problème d'intérêt pour trouver des poids spectraux :

$$G(i\omega_n) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{i\omega_n - \omega} A(\omega). \quad (4.2)$$

$A(\omega)$ est la fonction spectrale à déterminer et $G(i\omega_n)$ la fonction en fréquences de Matsubara connue. Puisque $K(\omega, i\omega_n)$ est généralement une fonction très piquée avec de grandes différences entre les petites et les grandes valeurs, il est impossible d'obtenir une bonne solution en discrétisant la variable continue et en inversant le système. La méthode d'entropie maximale résoud plutôt le problème en utilisant la théorie des probabilités Bayésienne. On utilise donc l'information connue a priori, telles que les incertitudes numériques sur la fonction $G(i\omega_n)$ pour restreindre l'intervalle des solutions. Les propriétés déjà connues de $A(\omega)$ tels que le premier moment, sa norme et la forme auxquelles on s'attend, sont aussi pratiquement nécessaire pour obtenir de bons résultats. La quantité la plus importante dans la méthode d'entropie maximale est la fonction de vraisemblance, $P(G|A)$, qui est la probabilité que étant donné A , on obtienne G . La fonction spectrale la plus probable, considérant les données de départ, est obtenue en maximisant la quantité $P(G|A)P(A)$, où $P(A)$ doit contenir des informations sur le spectre sans introduire de corrélations supplémentaires. $P(A)$ est la probabilité d'avoir le spectre A . On suppose $P(A) \propto e^{\alpha S}$ avec α un paramètre

4.1. MÉTHODE D'ENTROPIE MAXIMALE

ajustable à déterminer et S l'entropie différentielle :

$$S = - \sum_i \frac{\Delta\omega_i}{2\pi} A(\omega_i) \ln \left(\frac{A(\omega_i)}{D(\omega_i)} \right). \quad (4.3)$$

$D(\omega)$ dans la dernière équation est le modèle par défaut considéré, qui est souvent une forme gaussienne pour le prolongement de fonctions de Green. En introduisant la covariance des données, on doit alors maximiser dans la méthode d'entropie maximale :

$$P(A|G) \propto e^{\alpha S - \chi^2/2}, \quad (4.4)$$

où nous avons utilisé l'égalité de Bayes, $P(A|G)P(G) = P(G|A)P(A)$ et utilisé que $P(G)$ ici peut être ignoré car il n'y a qu'un ensemble de données à partir duquel on travaille. χ est la matrice de covariance des données. Il est à remarquer que la positivité de la fonction à traiter numériquement est requise dans l'équation 4.3, et c'est ça qui cause problème lorsque l'on veut prolonger des fonctions qui ne sont pas définies positives. Les erreurs sur les données sont aussi d'une importance capitale puisque la matrice de covariance χ intervient directement dans la quantité à maximiser. La tâche délicate est la façon de fixer la variable α . Il n'existe pas de consensus sur la meilleure méthode à utiliser pour le faire. Pour de plus amples explications des équations complètes l'article suivant est à consulter [4].

4.2 Méthode des approximants de Padé

4.2.1 Introduction

La méthode de prolongement analytique par approximants de Padé ne requiert pas que la fonction traitée soit définie positive. Cependant, cette méthode a des limites, puisqu'elle est très instable. De plus étant donné que l'on a un problème mal-conditionné (voir section 4.1), un prolongement avec Padé ne fonctionnera pas toujours, et il est très difficile de déterminer d'avance dans quelles conditions la méthode sera efficace ou non. Cependant, il est important d'expliquer un peu comment cela fonctionne, puisque la méthode de Padé est souvent utilisée pour vérifier des résultats faciles à obtenir avec ce que l'on obtient par la méthode d'entropie maximale.

La méthode des approximants de Padé est simplement l'approximation d'une fonction par une fonction rationnelle d'un certain ordre. C'est généralement une bien meilleure approximation qu'une série de Taylor tronquée à un certain ordre, et nécessaire si la série de Taylor diverge. On cherche à prolonger une fonction à variables complexes connue numériquement en une fonction à variables réelles. Une fois la fonction $f(z)$ approximée en un ratio de polynômes, il suffit d'évaluer le tout considérant que $z = i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ où η est un petit nombre positif. On cherche alors premièrement à satisfaire la condition

4.2. MÉTHODE DES APPROXIMANTS DE PADÉ

ci-dessus :

$$P_N(i\omega_n) = f(i\omega_n). \quad (4.5)$$

4.2.2 Comment cela fonctionne en bref

Un approximant de Padé défini sur une grille de N points, où $z \in \mathbb{C}$ peut s'écrire :

$$P_N(z) = \frac{A_N(z)}{B_N(z)}, \quad (4.6)$$

où de façon pratique les numérateurs et dénominateurs ont les formes suivantes :

$$\begin{aligned} A_{n+1}(z) &= A_n(z) + a_{n+1}(z - z_n)A_{n-1}(z) \\ B_{n+1}(z) &= B_n(z) + a_{n+1}(z - z_n)B_{n-1}(z). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Dans l'équation 4.6, si N est pair, $A_N(z)$ et $B_N(z)$ sont des polynômes de degrés $N/2 - 1$ et $N/2$ tandis qu'ils sont de degrés $(N - 1)/2$ et $(N - 1)/2$ si N est impair. Les conditions initiales sont que $A_0 = 0$, $A_1 = 1$ et $B_0 = B_1 = 1$ On peut aussi écrire ce ratio sous une forme de fraction continue comme ci-dessous :

$$P_N(z) = \frac{a_1}{1 + \frac{a_2(z - z_1)}{1 + \frac{a_3(z - z_2)}{1 + \frac{\dots}{1 + \frac{a_N(z - z_{N-1})}{1}}}}}. \quad (4.8)$$

CHAPITRE 4. PROLONGEMENT ANALYTIQUE

Les coefficients se calculent à l'aide d'un algorithme récursif, qui implémente les équations suivantes, en commençant par $i = 1$:

$$\begin{aligned} a_n &= g_{n,n} & g_{1,n} &= f(i\omega_n) \\ g_{i,j} &= \frac{g_{i-1,j-1} - g_{i-1,j}}{(i\omega_j - i\omega_{i-1})g_{i-1,j}}. \end{aligned} \tag{4.9}$$

4.3 Comment contourner le problème de la non-positivité d'une fonction de corrélation

4.3.1 Pouvoir thermoélectrique

Une fonction de corrélation calculée avec deux opérateurs différents n'est pas nécessairement définie positive, c'est-à-dire qu'elle peut changer de signe en fonction de la fréquence. Ceci n'a rien d'étonnant, et se vérifie avec les propriétés de symétries des opérateurs qui la composent. C'est un problème lorsqu'on envisage de faire le prolongement analytique avec une méthode d'entropie maximale, puisque la fonction à traiter numériquement doit être définie positive (voir la section précédente 4.1). Il a alors été envisagé de contourner le problème de la non-positivité de la fonction de corrélation à courants mixtes en calculant des fonctions de corrélation *composées* qui sont nécessairement définies positives, tel que démontré plus bas dans la section. Ensuite on calcule leurs différences pour en extraire celle d'intérêt. Le résultat final à calculer (4.20) est cité plus bas. Par souci de simplicité, considérons la fonction de corrélation suivante ci-bas 4.10. Il est à noter qu'on a oublié tous les autres facteurs multiplicatifs pouvant entrer dans un calcul réaliste. Ne prenant que la moyenne du commutateur pour la démonstration (τ est le temps imaginaire) :

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{j}(\tau) + \mathbf{j}_Q(\tau), \mathbf{j}(0) + \mathbf{j}_Q(0)] \rangle &= \langle [\mathbf{j}(\tau), \mathbf{j}(0)] \rangle + \langle [\mathbf{j}_Q(\tau), \mathbf{j}_Q(0)] \rangle + \\ &+ \langle [\mathbf{j}(\tau), \mathbf{j}_Q(0)] \rangle + \langle [\mathbf{j}_Q(\tau), \mathbf{j}(0)] \rangle, \end{aligned} \quad (4.10)$$

après la transformée de Fourier on obtient :

$$\begin{aligned} \chi''_{(\mathbf{j}+\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}+\mathbf{j}_Q)}(\omega) &= \chi''_{\mathbf{j}\mathbf{j}}(\omega) + \chi''_{\mathbf{j}_Q\mathbf{j}_Q}(\omega) \\ &+ \chi''_{\mathbf{j}\mathbf{j}_Q}(\omega) + \chi''_{\mathbf{j}_Q\mathbf{j}}(\omega). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Le truc ici est de montrer que la contribution désirée, soit $\chi''_{\mathbf{j}_Q\mathbf{j}}(\omega)$ est équivalente à $\chi''_{\mathbf{j}\mathbf{j}_Q}(\omega)$. On peut alors obtenir dans un premier temps le prolongement analytique de 4.10, qui est définie positive pour tout ω et ensuite y soustraire les deux fonctions de réponses $\chi''_{\mathbf{j}-\mathbf{j}}$ et $\chi''_{\mathbf{j}_Q-\mathbf{j}_Q}$. Ceci permet d'obtenir le prolongement analytique ($\chi''_{\mathbf{j}_Q\mathbf{j}}$) de la fonction de réponse courant-courant de chaleur ($\chi_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}}(i\nu_n)$) nécessaire à l'obtention du pouvoir thermoélectrique. On peut alors l'obtenir avec l'outil de prolongement analytique disponible, qui demande que la fonction soit définie positive. Écrivant l'expression plus en détails on a :

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{j}(\omega) + \mathbf{j}_Q(\omega), \mathbf{j}(-\omega) + \mathbf{j}_Q(-\omega)] \rangle &= \langle [\mathbf{j}(\omega), \mathbf{j}(-\omega)] \rangle + \langle [\mathbf{j}_Q(\omega), \mathbf{j}_Q(-\omega)] \rangle \\ &+ \langle [\mathbf{j}(\omega), \mathbf{j}_Q(-\omega)] \rangle + \langle [\mathbf{j}_Q(\omega), \mathbf{j}(-\omega)] \rangle. \end{aligned} \quad (4.12)$$

En considérant la somme des deux derniers commutateurs, avec le fait que si les deux opérateurs ont *la même signature sous inversion du temps et que l'hamiltonien est invariant sous cette transformation*, on a la propriété suivante : $\chi''_{AB}(\omega) = \chi''_{BA}(\omega)$. En considérant ceci l'on peut obtenir :

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{j}_Q(\omega), \mathbf{j}(-\omega)] \rangle + \langle [\mathbf{j}(\omega), \mathbf{j}_Q(-\omega)] \rangle \\ = 2 \langle [\mathbf{j}_Q(\omega), \mathbf{j}(-\omega)] \rangle. \end{aligned} \quad (4.13)$$

4.3. COMMENT CONTOURNER LE PROBLÈME DE LA NON-POSITIVITÉ D'UNE FONCTION DE CORRÉLATION

Il est important de noter que ceci n'est vrai qu'en l'absence de champ magnétique. Finalement on obtient :

$$\chi''_{(\mathbf{j}+\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}+\mathbf{j}_Q)}(\omega) = \chi''_{\mathbf{j}, \mathbf{j}}(\omega) + \chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}_Q}(\omega) + 2\chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}}(\omega). \quad (4.14)$$

Voici maintenant une autre preuve que les deux commutateurs mixtes $\chi''_{\mathbf{j}, \mathbf{j}_Q}(\omega)$ et $\chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}}(\omega)$ sont égaux. Considérant tout d'abord un des termes et prenant son complexe conjugué :

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [j(t), j_Q(0)] \rangle \right]^* = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \langle [j_Q^\dagger(0), j^\dagger(t)] \rangle \quad (4.15)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \langle [j_Q^\dagger(-t), j^\dagger(0)] \rangle \quad (4.16)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [j_Q(t), j(0)] \rangle$$

$$= \chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}}(\omega)$$

On a alors égalité des deux termes, si $\chi''_{\mathbf{j}, \mathbf{j}_Q}(\omega)$ est réel. Ce dernier résultat s'obtient en passant en représentation de Lehman et en notant qu'on a des opérateurs hermitiens et des états propres réels d'indices n, m , toujours en raison de la symétrie sous inversion du temps. On a alors que $\langle m|\mathbf{j}|n \rangle = \langle n|\mathbf{j}|m \rangle$. En passant en représentation de Lehmann, il est possible de vérifier que la fonction de réponse est effectivement réelle :

$$\chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta K_n}}{Z} \times \left[\langle n|e^{iE_n t/\hbar} \mathbf{j}_Q e^{-iE_m t/\hbar} |m \rangle \langle m|\mathbf{j}|n \rangle - \langle n|\mathbf{j}|m \rangle \langle m|e^{iE_m t/\hbar} \mathbf{j}_Q e^{-iE_n t/\hbar} |n \rangle \right]. \quad (4.17)$$

En changeant les indices de sommation dans le deuxième terme de 4.17 on obtient :

$$\chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n|\mathbf{j}_Q|m \rangle \langle m|\mathbf{j}|n \rangle e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \quad (4.18)$$

$$\chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}}(\omega) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{j}_Q | m \rangle \langle m | \mathbf{j} | n \rangle \pi \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n)). \quad (4.19)$$

L'expression ci-haut est donc clairement réelle.

On remarque aussi que l'expression 4.17 est définie positive pour des opérateurs qui sont le conjugué hermitien l'un de l'autre. En effet pour $\chi''_{B, B^\dagger}(\omega)$, où B est un opérateur quelconque, on remarque qu'on a dans l'expression le carré de l'élément de matrice $\langle m | B | n \rangle \langle n | B^\dagger | m \rangle = |\langle m | B | n \rangle|^2$, donc que l'expression est encore nécessairement définie positive et réelle. De cette façon, on justifie l'équation 4.12 pour des opérateurs quelconques.

Le problème des unités

Si on omet toute constante lors d'un calcul numérique, soit par exemple la charge de l'électron, on doit considérer que les fonctions de corrélation entrant dans l'expression 4.14 n'ont pas les mêmes unités, et donc qu'on devra possiblement calculer une expression modifiée dans le but de ramener les fonctions de réponse à un même ordre de grandeur. Celles-ci n'ont pas les mêmes unités. Il faut alors calculer des fonctions de corrélation avec un courant $\mathbf{j}_{tot}(\omega) = \mathbf{j}(\omega) + \gamma \mathbf{j}_Q(\omega)$, où γ est une constante de proportionnalité ajoutée dans le but de rétablir l'ordre de grandeur des courants. Il est à noter que \mathbf{j}_{tot} n'a pas de sens physique particulier. C'est seulement un artifice de calcul dans le but d'obtenir ce que l'on recherche. Numériquement on aura alors à calculer l'expression 4.20 pour une grille de fréquences définies à l'avance en considérant une interpolation numérique des fonctions de réponse de droite pour effectuer la soustraction. La constante γ est le facteur multiplicatif entre l'expression calculée numériquement, et celle obtenue suite à un prolongement analytique de $\chi''_{\mathbf{j}, \mathbf{j}}(\omega)$ et $\chi''_{\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}_Q}$. Ensuite, il est possible de recalculer la fonction de corrélation

4.3. COMMENT CONTOURNER LE PROBLÈME DE LA NON-POSITIVITÉ D'UNE FONCTION DE CORRÉLATION

$\mathbf{j}_Q + \mathbf{j}$ avec cette constante γ .

$$\chi''_{\mathbf{j}\mathbf{j}_Q}(\omega) = \frac{1}{2\gamma} \left[\chi''_{(\mathbf{j}+\gamma\mathbf{j}_Q, \mathbf{j}+\gamma\mathbf{j}_Q)}(\omega) - \chi''_{\mathbf{j}\mathbf{j}}(\omega) - \gamma^2 \chi''_{\mathbf{j}_Q\mathbf{j}_Q}(\omega) \right] \quad (4.20)$$

4.3.2 Le cas des fonctions de Green auxiliaires et poids spectraux anormaux (supraconductivité)

Le cas présenté ici est seulement un exemple utilisé à titre de comparaison pour le cas des fonctions de réponse. Le poids spectral anormal n'intervient pas dans le calcul de ces dernières, mais l'exemple présenté ici permet de vérifier l'effet d'un calcul avec des opérateurs ayant des unités différentes. Sans entrer dans les détails, le poids spectral dit anormal, en supraconductivité, n'est pas défini positif. Alexis Reymbaut en fit une analyse et des explications détaillées dans sa thèse, disponible sur le site web de l'université (voir [15]). De ce fait, la fonction de Green anormale ne peut être prolongée analytiquement avec une méthode d'entropie maximale, pour les mêmes raisons qu'expliquées dans ce chapitre. D'une façon similaire à celle envisagée pour le calcul des fonctions de réponse 4.3, il est plutôt considéré de faire le prolongement analytique d'une fonction de Green auxiliaire, dont le poids spectral est défini positif, et d'en extraire la quantité d'intérêt par la suite. Pour ce faire, on considère la combinaison d'opérateurs suivante :

$$a_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad (4.21)$$

et on calcule la fonction de Green *auxiliaire* avec cet opérateur $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(\tau)_{aux} = -\langle T_\tau a_{\mathbf{k}}(\tau) a_{\mathbf{k}}^\dagger(0) \rangle$. En insérant la définition du nouvel opérateur considéré 4.21, on obtient une combinaison

de fonctions de Green :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n)_{aux} &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta e^{i\omega_n\tau} \left[-\langle T_\tau c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(0) \rangle - \langle T_\tau c_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau) c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(0) \rangle \right. \\
 &\quad \left. - \langle T_\tau c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) c_{-\mathbf{k}\downarrow}(0) \rangle - \langle T_\tau c_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(0) \rangle \right] d\tau \\
 &= \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n)_\uparrow - \mathcal{G}_{-\mathbf{k}}(-i\omega_n)_\downarrow + 2\mathcal{F}_{\mathbf{k}}(i\omega_n).
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

$\mathcal{F}_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$ ici est la transformée de Fourier de la fonction de Green anormale.

$$-\langle T_\tau c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) c_{-\mathbf{k}\downarrow}(0) \rangle. \tag{4.23}$$

On montre en représentation spectrale que la fonction de Green anormale est réelle, d'où le fait qu'on obtient $2\mathcal{F}_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$ dans l'expression 4.22. Le poids spectral anormal quant à lui est défini comme $A_{\mathbf{k}}(\tau) = \langle \{c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau), c_{-\mathbf{k}\downarrow}(0)\} \rangle$. Nous n'entrerons pas dans les détails puisqu'on est en présence de supraconductivité et que cela nécessiterait de longues explications. Il est à remarquer que ces quantités sont non-nulles, même si les moyennes sont constituées de deux opérateurs de destruction. Le poids spectral anormal s'obtient alors en effectuant trois prolongements analytiques de fonctions définies positives, procédure similaire à ce qui est suggéré en 4.20 :

$$A_{\mathbf{k}}(\omega)_{an} = \frac{1}{2} [A_{\mathbf{k}}(\omega)_{aux} - A_{\uparrow\mathbf{k}}(\omega) - A_{\downarrow-\mathbf{k}}(-\omega)]. \tag{4.24}$$

Les fonctions de corrélation à calculer pour obtenir le poids spectral du pouvoir thermoélectrique n'ont pas les mêmes unités fondamentales. Cela se déduit en constatant qu'elle sont calculées avec des courants différents (courant de chaleur et courant électrique), et c'est pour cette raison que la constante γ a été introduite dans l'équation 4.20. Le cas présenté ici 4.24 n'a pas ce problème. Par contre ce cas a été reproduit avec des facteurs de proportionnalité insérés de façon à simuler un cas avec poids spectraux d'unités différentes. Les

4.3. COMMENT CONTOURNER LE PROBLÈME DE LA NON-POSITIVITÉ D'UNE FONCTION DE CORRÉLATION

graphiques sont présentés dans le chapitre 5 en 5.2.2.

$$A_{\mathbf{k}}(\omega)_{an} = \frac{1}{2\gamma} \left[A_{\mathbf{k}}(\omega)_{aux} - A_{\uparrow\mathbf{k}}(\omega) - \gamma^2 A_{\downarrow-\mathbf{k}}(-\omega) \right] \quad (4.25)$$

Chapitre 5

Implémentation, problèmes et résultats

5.1 Implémentation et résultats

5.1.1 Ce qui a été effectué

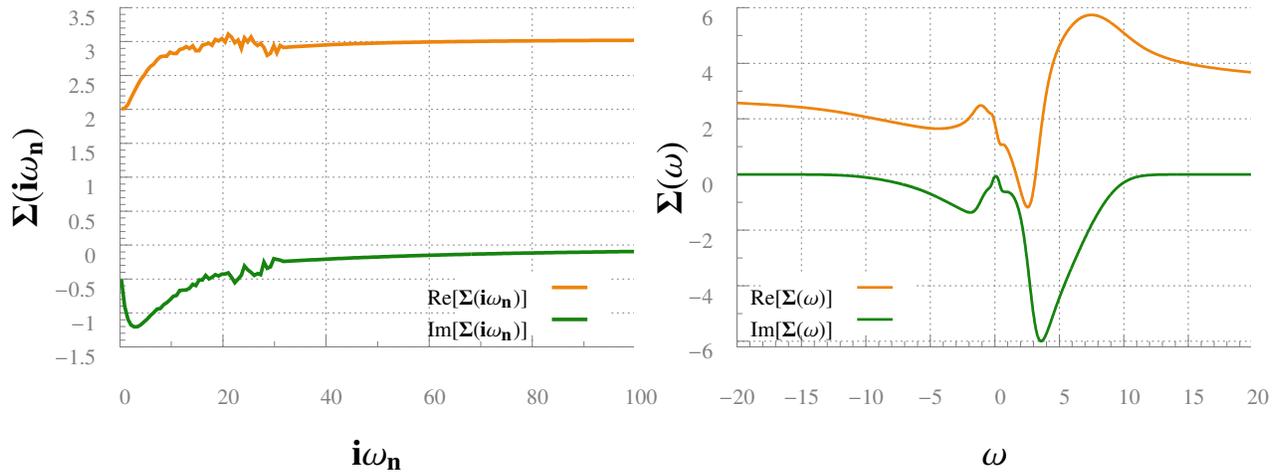
Dans cette section, la méthode utilisée pour implémenter l'équation 4.20 sera expliquée. De plus, les tests de vérification nécessaires seront présentés. Puisqu'il se trouve qu'il n'a pas été possible d'obtenir des résultats de qualité, il sera plutôt expliqué ce qui a été essayé et certaines possibilités d'amélioration. Les codes et algorithmes nécessaires seront aussi sommairement résumés.

Tout d'abord, il a été nécessaire de vérifier s'il était possible de calculer une fonction de réponse directement en fréquences de Matsubara avec l'équation 3.36 de la conductivité, de

procéder au prolongement analytique et de comparer avec un calcul obtenu directement en fréquences réelles, à l'équation 3.41. Ceci n'a aucun lien avec le pouvoir thermoélectrique. Il fallait juste s'assurer que les deux différentes façons de calculer les fonctions de réponse (en fréquences réelles ou en fréquences imaginaires) donnent des résultats similaires à la fin du processus. Les données utilisées avaient été obtenues par une méthode de CTQMC 2.4 et de CDMFT. Les données de départ étaient les self-énergies en fréquences de Matsubara. Il était alors nécessaire de procéder au prolongement analytique de ces self-énergies, utiles pour reconstruire la fonction de Green en fréquences réelles. Un exemple est présenté à la figure 5.1. Il est à noter que ces self-énergies étaient calculées pour des amas à quatre sites. Il y en avait alors trois à prolonger analytiquement avant d'effectuer la périodisation et la reconstruction de la fonction de Green en fréquences réelles. La figure 5.1, partie gauche, est un exemple d'une telle fonction tout droit sorti d'un code Monte-Carlo en fréquences de Matsubara. Celle-ci correspond au vecteur du réseau discret de l'amas $K = (0, 0)$, puisque ces données sont issues d'une méthode de CDMFT (voir article [20]). La partie lisse à la fin est le résultat Hartree-Fock, qui est ajouté avec une formule analytique et non pas calculée par CTQMC. Elles étaient trop bruitées, surtout à hautes fréquences, avant que ne soit ajouté le résultat analytique Hartree-Fock, pour être traitables avec un programme utilisant la méthode d'entropie maximale 4.1. En effet, en Monte-Carlo les hautes fréquences sont difficiles à calculer puisque cela nécessite un échantillonnage beaucoup plus imposant, et la précision à hautes fréquences était moins primordiale pour effectuer les calculs précédents pour lesquels celles-ci furent utiles, soit le calcul de $\chi_{jj}(\omega = 0)$. Une façon de procéder est de faire le prolongement analytique de fonctions de Green auxiliaires qui n'ont pas de sens physique à proprement parler, et puis de retrouver la self-énergie en fréquences réelles par simple inversion de nombres complexes. La procédure est détaillée dans l'annexe C.

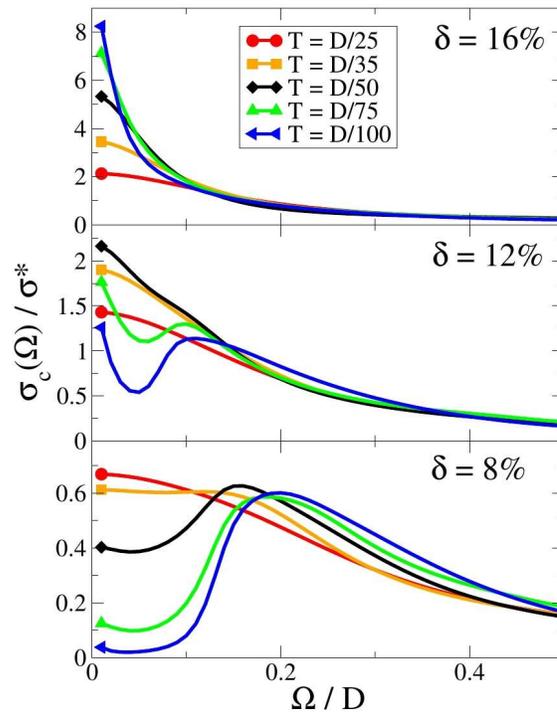
5.1.2 Essais et vérifications préalables

Figure 5.1 – Self-énergie en fréquences de Matsubara (gauche) et en fréquences réelles (droite) à $\beta = 10$, $U = 6$, 2% de dopage et $t' = 0$. Les résultats de gauche sont obtenus par CDMFT pour un amas de 4 sites.



Dans le cas des calculs effectués avec les données Monte-Carlo, en CDMFT, il était possible de comparer grossièrement les résultats obtenus avec ceux présentés dans la figure 2 (section gauche) de l'article de M. Ferrero et O. Parcollet [6], reproduite à la figure montrée ci-dessous. Il est à noter que pour leurs unités ils considèrent $D = 1$, qui est leur demi-largeur de bande et que $\sigma^* = 2e^2ct_0^2/(\hbar abD^2)$. a et b sont les constantes du réseau du modèle et t_0 est le paramètre de saut perpendiculaire considéré le long de l'axe c .

Figure 5.2 – Conductivités transverses à différents dopages de l'article de M. Ferrero et al. [6]

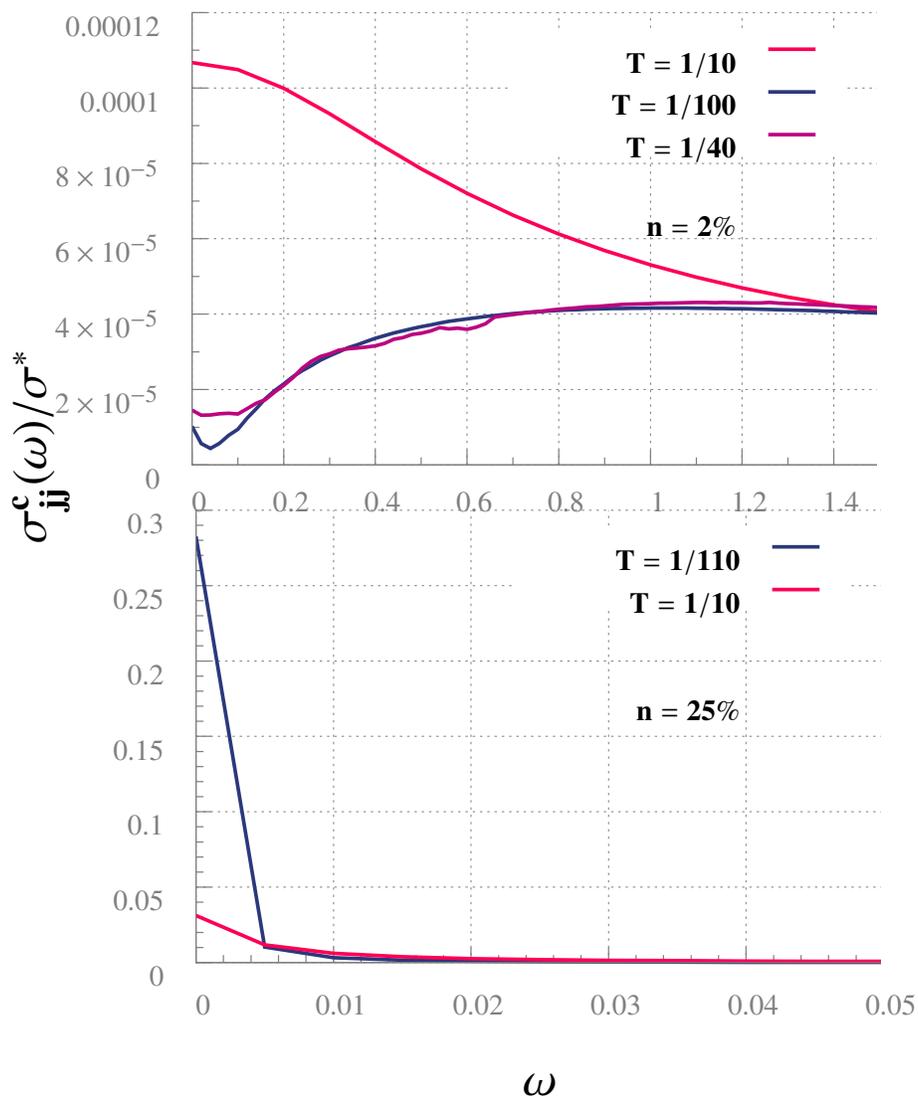


La comparaison avec ces données ne peut être exacte. Les auteurs considèrent un saut t' , c'est-à-dire un saut aux deuxièmes voisins sur un amas carré, ce qui n'est pas considéré dans le cas présent. De plus, la force du potentiel d'interaction du modèle de Hubbard est différente. Ils utilisent un rapport U/t de 10. Les données utilisées ici étaient calculées avec $U = 6$ et $t = 1$. Il est aussi à noter qu'ils utilisent une méthode dite VB-DMFT et un prolongement analytique par méthode de Padé 4.2.1, tandis qu'ici le but était de vérifier le

5.1. IMPLÉMENTATION ET RÉSULTATS

comportement du prolongement analytique à l'aide de l'entropie maximale 4.1. De plus, les données utilisées étaient obtenus avec des dopages en trous de 2% et de 25%, tandis qu'ils considèrent d'autres dopages dans cet article. Cependant on retrouve quelques caractéristiques similaires.

Figure 5.3 – Conductivités tranverses à différents dopages



À très fort dopage (25%) on obtient le pic de Drude caractéristique. Dans le cas de la figure ci-haut 5.3, le pic de Drude à $\beta = 110$ et $n = 25\%$ est une discontinuité, du à la très petite température et au très grand dopage, et est difficile à résoudre numériquement à très petite fréquences. Pour le cas à $n = 2\%$, on peut noter que les ordres de grandeur des valeurs à $\omega = 0$ concordent. En effet, c'est que la normalisation de la fonction de réponse dans les données de l'article σ^* est différente à celle de la figure 5.3, qui est $\sigma_0^c = e^2 c / (\hbar a b)$. Vu que le $t_0 = 0.01$ dans la figure 5.3, il y un facteur 2000 entre les origines des courbes. Il a donc été conclu, étant donné les circonstances et les données accessibles, qu'il était à tout le moins possible d'obtenir des courbes ayant des caractéristiques auxquelles on se serait attendu. Les seules courbes présentées sont celles qui visiblement étaient le moins influencées par le bruit Monte-Carlo présent dans les données de départ, qui rendait le prolongement analytique des self-énergies beaucoup plus difficile. Les autres courbes calculées présentaient des défauts résultant d'une intégration difficile. Il aurait été nécessaire d'effectuer des lissage ou des interpolation afin de masquer ces défauts, ce qui n'était pas désiré.

Il a aussi été essayé d'améliorer la convergence des fonctions de réponse, mais puisque la conductivité selon l'axe perpendiculaire au plan ne dépend pas de la coordonnée z par rapport à laquelle la dérivée de la relation de dispersion est prise pour obtenir la vitesse, le premier moment de la conductivité est nul dans cette approximation. Les moments de la conductivité longitudinale (dans le plan $x - y$) ont aussi été calculés (voir la section 3.5). Puisque l'intérêt et les comparaisons étaient avec des résultats pour le cas transverse, le tout fût mit de côté. Ceci a cependant permis de retrouver la formule utile pour calculer la densité électronique numérique (voir Annexe D).

Comparaison entre un calcul en fréquences réelles et en fréquences de Matsubara

Il a été vérifié si un calcul en fréquences réelles avec l'équation de la conductivité électrique en fréquences réelles 3.41 et un calcul en faisant la convolution discrète sur les fréquences de Matsubara avec l'équation 3.36 suivi d'un prolongement analytique donnaient le même résultat. Théoriquement cela devrait être le cas, numériquement cela est une autre histoire. En effet, il faut se rappeler que les sommations discrètes ne convergent pas nécessairement facilement et que le prolongement analytique qui suit est très sensible aux erreurs et au comportement asymptotique de la fonction traitée. Deux exemples sont présentés ci-dessous. La légende doit être interprétée comme suit : ω signifie que la fonction a été calculée directement en fréquences avec les self-énergies en fréquences réelles, comme celle présentée à droite de la figure 5.1. $\omega \rightarrow i\omega_n$ qu'elle fût d'abord calculée en fréquences de Matsubara à l'aide d'une convolution discrète sur les fréquences de Matsubara suivi d'un prolongement analytique (voir équation 3.36). Les conductivités sont transverses puisqu'on considère un courant selon l'axe perpendiculaire au plan modélisé par le modèle de Hubbard.

Figure 5.4 – Conductivités transverses à $\beta = 8$, $U=6$, $t=1$ et $t'=0$

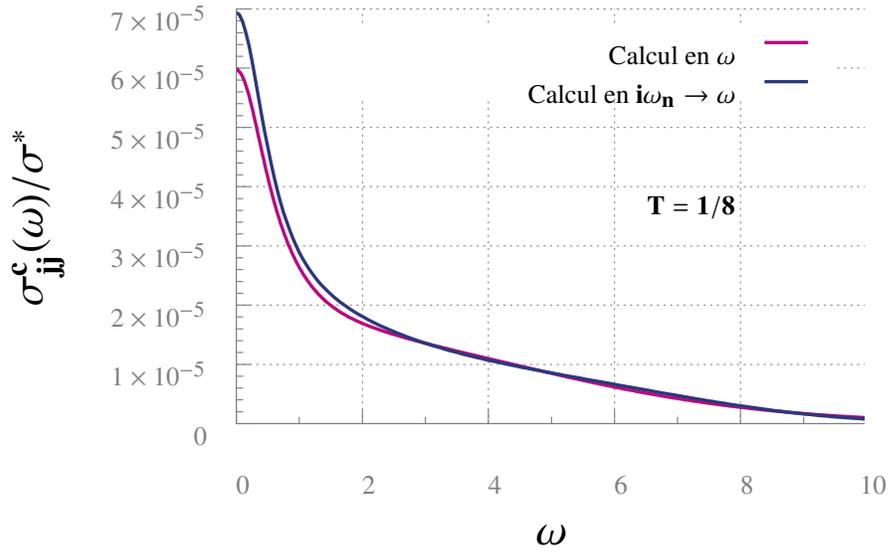
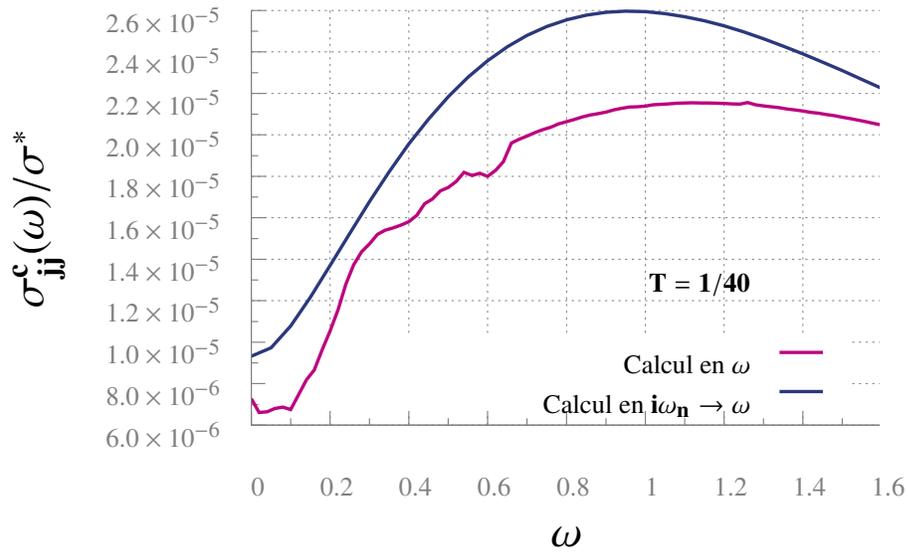


Figure 5.5 – Conductivités transverses à $\beta = 40$, $U=6$, $t=1$ et $t'=0$



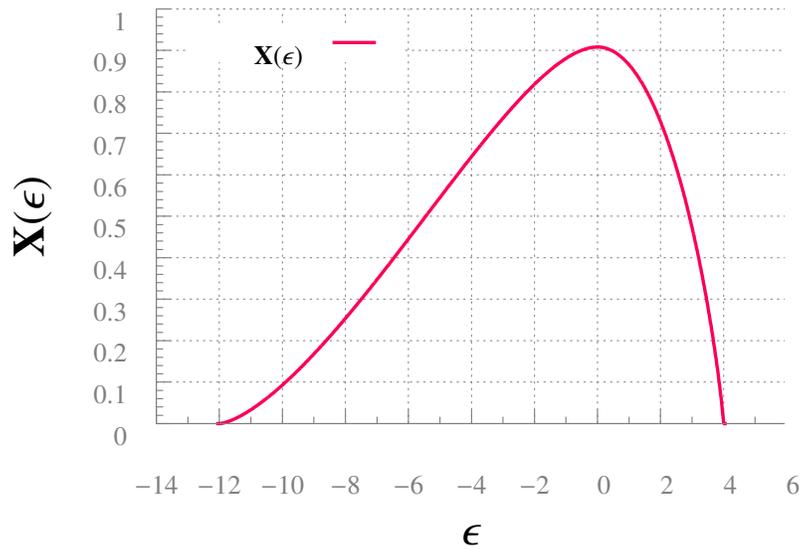
5.1.3 L'idée principale pour obtenir le pouvoir thermoélectrique

Le but ultime était de vérifier qu'il était possible d'obtenir le pouvoir thermoélectrique à l'aide de l'équation 4.20 et que cela donnait un résultat similaire à celui obtenu lorsque calculé avec l'équation 3.58. Selon les résultats, ou plutôt ce qu'on pourrait appeler des tests, présentés dans la sous-section précédente 5.1.2, il a été décidé de changer de données de départ. Les fonctions de Green utilisées dans la sous-section précédentes étaient obtenues par méthode de CTQMC+CDMFT, tandis que celles utilisées pour les essais suivants proviennent de la méthode IPT+DMFT. Aucune périodisation n'était alors nécessaire. La méthode numérique IPT n'est pas présentée dans ce mémoire, il vaut se référer à la thèse de L-F. Arseneault pour plus de détails [1]. Le but était d'implémenter le calcul de la fonction de réponse sans qu'il ne soit nécessaire d'obtenir les poids spectraux en fréquences réelles. L'implémentation était assez directe, sauf qu'une fonction de transport obtenue par une intégration Monte-Carlo fût utilisée pour réduire la dimensionalité de l'intégration numérique, ce qui réduit le temps d'intégration substantiellement. On se retrouvait donc à calculer l'équation ci-dessous pour σ_{jj} . Introduisant la fonction $X(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})$ on a que la conductivité peut se réécrire comme :

$$\begin{aligned}
 \chi_{jj}(ip_m) &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 G_{\mathbf{k}}(i\omega_n) G_{\mathbf{k}}(i\omega_n + ip_m) \\
 &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \int d\epsilon \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 G(\epsilon, i\omega_n) G(\epsilon, i\omega_n + ip_m) \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \\
 &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \int d\epsilon X(\epsilon) G(\epsilon, i\omega_n) G(\epsilon, i\omega_n + ip_m), \tag{5.1}
 \end{aligned}$$

et donc une simple intégration unidimensionnelle est requise.

Figure 5.6 – Fonction de transport du réseau fcc



Il est à remarquer qu'une sommation discrète sur les fréquences de Matsubara est nécessaire, et bien que cette opération puisse sembler simpliste, elle ne l'est pas du tout numériquement considérant qu'il est nécessaire d'obtenir le comportement asymptotique attendu pour toutes les fonctions de corrélation, tel que décrit dans l'annexe A dans le cas de $\chi_{j_0 j_0}$.

5.2 Problèmes numériques rencontrés

5.2.1 Convergence numérique

Il s'avère que la convergence d'une somme sur les fréquences de Matsubara est relativement lente. C'est-à-dire qu'il est nécessaire de sommer des centaines de milliers de fréquences de Matsubara pour que le comportement asymptotique se manifeste. La connaissance des moments est d'une importance primordiale pour le prolongement analytique puisque ceci constitue l'information connue a priori, tel que souligné à la section 4.1. Des résultats ont été obtenus pour la conductivité ordinaire χ_{jj} , mais le cas de la fonction de corrélation $\chi_{j_0j_0}$ s'est avéré particulièrement difficile. Il a été essayé d'améliorer le comportement asymptotique des fonctions en faisant un lissage en $1/p_n^2$ sur la partie de la fonction qui avait ce comportement avant que l'erreur numérique devienne non-négligeable lors de la sommation et de l'intégration à de très grandes fréquences. Cependant, le prolongement analytique étant très sensible à la valeur des moments, il n'est pas évident qu'un lissage permette d'obtenir un moment d'ordre un précis. Faute d'une analyse d'erreur numérique ou de méthode de sommation plus élaborée pour des cas où les indices de sommation sont très grands et les nombres très petits, il est difficile d'émettre un constat plus précis de la situation. Ces méthodes de sommation existent dans les ouvrages de calcul numérique plus avancés, comme par exemple dans le livre de Higham[10], chapitre quatre. Je crois qu'une approche plus réfléchie de ce côté aurait été nécessaire, et ceci fût d'ailleurs confirmé après m'être renseignée auprès de Jean-Pierre Dusseault, professeur-chercheur en

mathématiques appliqués à l'université de Sherbrooke. Il est à noter que la convergence de sommes numériques sur de grands ensembles de données est une opération délicate. Nous n'avons qu'à penser à la série harmonique qui converge mathématiquement mais diverge numériquement. Puisque les sommes sont intégrées, il se trouve que l'erreur maximale de la routine d'intégration est importante aussi.

Il serait nécessaire d'essayer d'implémenter la sommation avec une technique différente, en alternant les termes positifs et négatifs par exemple, et surtout en utilisant une librairie à précision améliorée (multi-précision). Cependant, le temps de calcul de la sommation sur les fréquences de Matsubara, qui est déjà de quelques heures en raison de l'intégration nécessaire pour chacun des termes sommés, se verrait augmenter de façon significative. Une autre possibilité serait de trouver les équations analytiques des moments pour la fonction de réponse $\chi_{j_0 j_0}$ à l'équation A.20 et de les fournir au programme de prolongement analytique, pour compenser le manque de précision. Il reste à savoir si cela vaut la peine.

5.2.2 Problèmes d'unités - vérifications

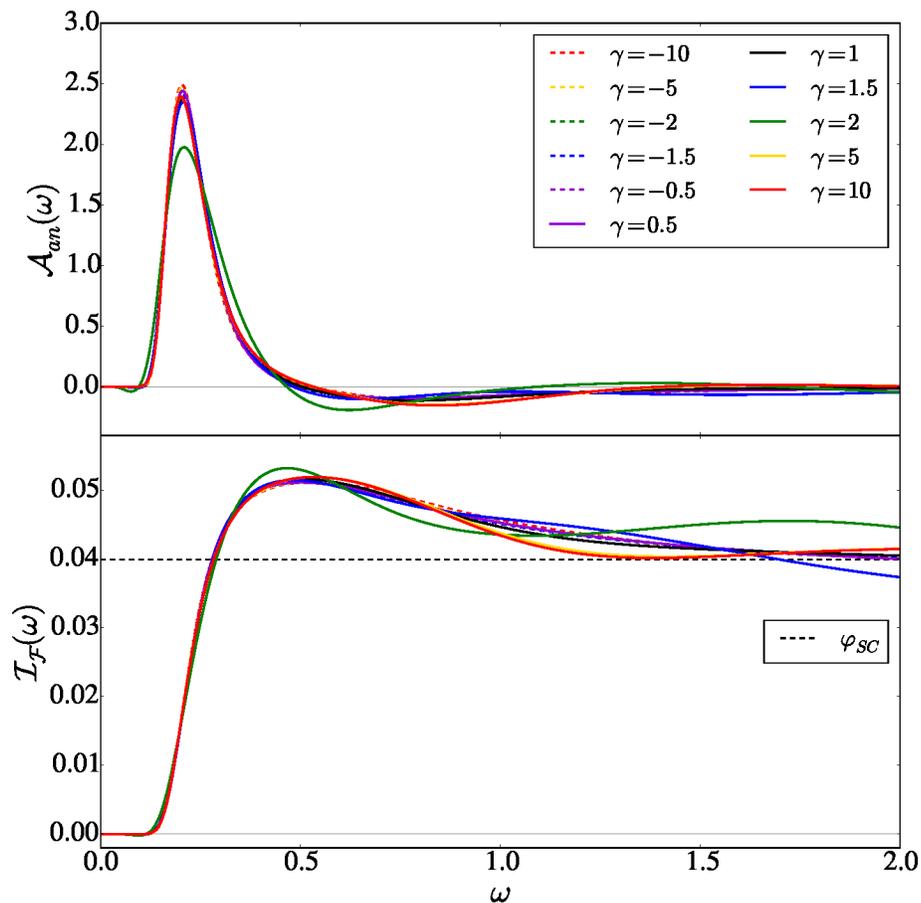
Les graphiques présentés dans cette section sont les poids spectraux anormaux et les paramètres d'ordre cumulatifs obtenus avec différents facteurs γ calculés selon l'équation 4.25. Les données ainsi que les programmes sont les mêmes que ceux utilisés par Alexis Reymbaut pour ses résultats de thèse. en supraconductivité. Sans entrer dans les détails, puisque cela relève de la supraconductivité ce qui n'est pas le sujet de cette maîtrise, le paramètre d'ordre cumulatif à température et fréquence finie s'obtient avec le poids spectral anormal dont on parle brièvement à la section 4.3.2. Il se calcule de la façon suivante :

$$\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\omega'}{2\pi} A_{an}(\mathbf{k}, \omega') f(-\omega'). \quad (5.2)$$

5.2. PROBLÈMES NUMÉRIQUES RENCONTRÉS

Pour plus d'informations au sujet du paramètre d'ordre supraconducteur, il vaut mieux se référer à la section 7.3 de la thèse d'Alexis Reymbaut. Dans un cas idéal, les paramètres d'ordre cumulatifs devraient être tous relativement similaires pour différentes valeurs de γ .

Figure 5.7 – Comparaison des poids spectraux anormaux (en haut) et des paramètres d'ordre cumulatifs (en bas) obtenus avec différentes valeurs de γ



Les différentes courbes sont relativement similaires à basses fréquences, sauf dans le cas de $\gamma = 2$. Il se trouve que pour ce dernier cas la convergence du prolongement analytique était mauvaise. On remarque aussi que les résultats sont meilleurs à basses fréquences qu'à hautes fréquences, ce qui peut être une source de problème pour obtenir le pouvoir

CHAPITRE 5. IMPLÉMENTATION, PROBLÈMES ET RÉSULTATS

thermoélectrique avec la méthode proposée dans ce mémoire lorsqu'une grande plage de fréquences réelles est requise.

Conclusion

Lors de cette maîtrise, beaucoup d'essais ont été effectués dans le but de vérifier le comportement du prolongement analytique de différentes quantités, telles que la self-énergie et la conductivité électrique. Des façons de procéder ont été mises en place et vérifiées avec des données issues de l'IPT et du Monte-Carlo, ce qui a mené à de petits travaux à l'intérieur du but premier du projet, tels que présentés dans les annexes C, D et A. Certaines nouvelles équations sont présentées, comme celle de la fonction de corrélation courant de chaleur-courant de chaleur. La théorie et le calcul des fonctions de transport d'intérêt ont aussi été améliorés. Une de ces améliorations est présentée dans le chapitre 3, pour le calcul du pouvoir thermoélectrique en fréquences de Matsubara. Une approche différente a dû être développée pour le calcul des fonctions de corrélation en fréquences imaginaires, puisque cette dernière n'est pas présente dans la littérature. Le tout est présenté au chapitre 3 et à l'annexe A. Plus précisément, la fonction de corrélation de chaleur a dû être calculée en fréquences de Matsubara (voir équation A.20). Il s'est avéré que l'implémentation numérique est plus complexe que ce qui avait été prévu. Il est absolument nécessaire pour le prolongement analytique (chapitre 4) que les fonctions de corrélation aient un comportement en $1/\omega_n^2$, tel qu'expliqué dans l'annexe A, et ce pour toutes les fonctions calculées. L'obtention d'une convergence adéquate lors d'une sommation numérique discrète n'est pas garantie. Il aurait probablement été nécessaire d'utiliser des bibliothèques à multi-précision et d'envisager une analyse d'erreur numérique de la sommation, tel que suggéré dans une communication par courriel avec un expert du domaine, Jean-Pierre Dusseault, professeur

en mathématiques de l'Université de Sherbrooke. De plus, un test tardif a été effectué avec des poids spectraux anormaux, avec les données et les codes d'Alexis Reymbaut (voir chapitre 5). Il s'avère qu'obtenir le poids spectral anormal à partir de quantités ayant des unités différentes ajoutées artificiellement donne un résultat acceptable. Les cas pour des facteurs différents de un sont relativement similaires lorsqu'on est à basses fréquences. La partie numérique n'a pas été développée autant qu'il serait nécessaire pour obtenir des résultats, mais toute la théorie a été développée et les vérifications préalables ont été effectuées. Ceci pourrait éventuellement être complété plus tard.

Annexe A

Détails du calcul de la fonction de corrélation χ_{jQjQ}

A.1 Calcul de $\chi_{jjQ}(i\omega_n)$

Une autre façon de calculer la fonction de réponse entrant dans l'expression du pouvoir thermoélectrique d'intérêt 4.3 dans cet ouvrage est d'y aller directement en représentation spectrale avec la représentation suivante des moyennes thermodynamiques. Ces dernières se trouvent à partir de ce qui est fait à la section 22.8 du cours de problèmes à N-corps [21].

La somme sur les fréquences de Matsubara pour $\tau < 0$ et pour $\tau > 0$ effectuée avec le contour approprié dans le plan complexe fait apparaître les distributions de Fermi-Dirac. Sans détailler le calcul de ces relations, les résultats ci-bas sont ceux qui seront utiles pour

le calcul des fonctions de réponse :

$$\langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}(\tau) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-\omega\tau} A_{\mathbf{k}}(\omega)}{e^{\beta\omega} + 1} \quad \text{Pour } \tau < 0, \quad (\text{A.1})$$

$$\langle c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-\omega\tau} A_{\mathbf{k}}(\omega)}{e^{-\beta\omega} + 1} \quad \text{Pour } \tau > 0. \quad (\text{A.2})$$

En jouant sur l'invariance sous inversion du temps, et en prenant une dérivé temporelle si nécessaire, on trouve aussi toutes les relations utiles pour le calcul subséquent de la fonction de réponse :

$$\langle c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}} \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{\omega\tau} A_{\mathbf{k}}(\omega)}{e^{\beta\omega} + 1}, \quad (\text{A.3})$$

$$\langle \dot{c}_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}} \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega e^{\omega\tau} A_{\mathbf{k}}(\omega)}{e^{\beta\omega} + 1}, \quad (\text{A.4})$$

$$\langle \dot{c}_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega e^{-\omega\tau} A_{\mathbf{k}}(\omega)}{e^{-\beta\omega} + 1}. \quad (\text{A.5})$$

En remarquant qu'en prenant la transformée de Fourier pour passer en fréquences de Matsubara, on intègre de 0 à β en temps imaginaire, il est possible d'utiliser les expression des moyennes ci-haut et de ne considérer que les termes non-nuls de la décomposition de Wick dans le cas particulier de $\tau > 0$. En se référant à l'équation 3.47 dans le chapitre 3 on a que :

$$\langle T_\tau j_{\mathbf{k}}^Q(\tau > 0) j_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \left\{ - \langle \dot{c}_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \dot{c}_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}} \rangle \langle c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \right\}. \quad (\text{A.6})$$

A.1. CALCUL DE $\chi_{JJQ}(I\omega_N)$

En traitant tout d'abord le premier terme de l'équation A.6, et en y insérant les relations appropriées qui se trouvent ci-haut on a :

$$\begin{aligned}
-\int_0^\beta e^{i\omega_m\tau} \langle \dot{c}_{\mathbf{k}}(\tau)c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau)c_{\mathbf{k}} \rangle d\tau &= -\int_0^\beta d\tau \int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} e^{i\omega_m\tau} e^{\tau(\omega'-\omega)} \frac{\omega A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')}{(e^{-\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega'} + 1)} \\
&= -\int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{\omega A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')}{(e^{-\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega'} + 1)} \frac{e^{\beta\omega'} e^{-\beta\omega} - 1}{i\omega_m + \omega' - \omega} \\
&= -\int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{\omega A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')}{i\omega_m + \omega' - \omega} \frac{e^{\beta\omega'} - e^{\beta\omega}}{(e^{\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega'} + 1)}.
\end{aligned} \tag{A.7}$$

On remarque une différence de fonctions de Fermi-Dirac qui y est cachée $n_F(\omega) - n_F(\omega')$:

$$-\int_0^\beta e^{i\omega_m\tau} \langle \dot{c}_{\mathbf{k}}(\tau)c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau)c_{\mathbf{k}} \rangle d\tau = -\int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')\omega \left\{ \frac{n_F(\omega) - n_F(\omega')}{i\omega_m + \omega' - \omega} \right\}. \tag{A.8}$$

Pour le deuxième terme de l'équation A.6, on a de façon similaire :

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta e^{i\omega_m\tau} \langle \dot{c}_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau)c_{\mathbf{k}} \rangle \langle c_{\mathbf{k}}(\tau)c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle d\tau &= -\int_0^\beta e^{i\omega_m\tau} d\tau \int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} e^{\tau(\omega-\omega')} \frac{\omega A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')}{(e^{\beta\omega} + 1)(e^{-\beta\omega'} + 1)} \\
&= -\int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{\omega A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')}{(e^{\beta\omega} + 1)(e^{-\beta\omega'} + 1)} \frac{e^{\beta\omega} e^{-\beta\omega'} - 1}{i\omega_m + \omega - \omega'} \\
&= -\int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{\omega A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')}{i\omega_m + \omega - \omega'} \frac{e^{\beta\omega} - e^{\beta\omega'}}{(e^{\beta\omega} + 1)(e^{\beta\omega'} + 1)} \\
&= -\int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{\omega' A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')}{i\omega_m + \omega' - \omega} \frac{e^{\beta\omega'} - e^{\beta\omega}}{(e^{\beta\omega'} + 1)(e^{\beta\omega} + 1)} \\
&= -\int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_{\mathbf{k}}(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega')\omega' \left\{ \frac{n_F(\omega) - n_F(\omega')}{i\omega_m + \omega' - \omega} \right\},
\end{aligned} \tag{A.9}$$

où à l'avant-dernière ligne du bloc d'équations ci-haut, un changement de variable $\omega \rightarrow \omega'$ et vice-versa a été effectué dans les intégrales. De ce fait, ce terme peut être combiné avec

le précédent, pour obtenir la fonction de réponse :

$$\chi_{\mathbf{k}}^{jQ,j}(i\omega_m) = -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_{\mathbf{k}}(\omega) A_{\mathbf{k}}(\omega') (\omega + \omega') \left\{ \frac{n_F(\omega) - n_F(\omega')}{i\omega_m + \omega' - \omega} \right\}. \quad (\text{A.10})$$

En décomposant les $n_F(\omega)$ en sommations sur les fréquences de Matsubara, on voit qu'il est possible de réécrire le tout en fonctions de Green seulement :

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}}^{jQ,j}(i\omega_m) &= \frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_{\mathbf{k}}(\omega) A_{\mathbf{k}}(\omega') (\omega + \omega') \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left(\frac{1}{ip_n - \omega'} \right) \left(\frac{1}{i\omega_m + ip_n - \omega} \right) \\ &= -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left\{ G_{\mathbf{k}}(ip_n) \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega A_{\mathbf{k}}(\omega)}{i\omega_m + ip_n - \omega} + G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m) \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\omega' A_{\mathbf{k}}(\omega')}{ip_n - \omega'} \right\} \\ &= -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left\{ G_{\mathbf{k}}(ip_n) \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[-A_{\mathbf{k}}(\omega) + (ip_n + i\omega_m) \frac{A_{\mathbf{k}}(\omega)}{ip_n + i\omega_m - \omega} \right] \right. \\ &\quad \left. + G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m) \int \frac{d\omega'}{2\pi} \left[-A_{\mathbf{k}}(\omega') + (ip_n) \frac{A_{\mathbf{k}}(\omega')}{ip_n - \omega'} \right] \right\} \\ &= -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \{ G_{\mathbf{k}}(ip_n) [-1 + (ip_n + i\omega_m) G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m)] \\ &\quad + G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m) [-1 + (ip_n) G_{\mathbf{k}}(ip_n)] \} \\ &= -\sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{e}{\beta} \sum_{ip_n} \left\{ \left(ip_n + \frac{i\omega_m}{2} \right) G_{\mathbf{k}}(ip_n) G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m) - G_{\mathbf{k}}(ip_n) \right\}. \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

On a alors le même résultat qu'en partant d'un calcul à l'aide de la définition de la fonction de Green ainsi que son équation du mouvement.

A.2 Calcul de $\chi_{jQjQ}(i\omega_n)$

La façon de faire présentée ci-haut est plus appropriée pour le cas de la fonction de réponse $\chi_{jQ,jQ}$, puisque son calcul fait intervenir des dérivées secondes d'opérateurs fermioniques, et la simple équation du mouvement pour $G(\tau)$ ne peut plus être utilisée sans faire intervenir des ambiguïtés mathématiques dans le calcul. En effet, la façon de faire présentée ci-dessous est à comparer avec ce qui est fait à la section 3.4.3 méthode 1. La fonction de corrélation courant de chaleur-courant de chaleur a comme décomposition de Wick :

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}}^{jQ,jQ}(i\omega_m) = & -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int_0^\beta e^{i\omega_m \tau} d\tau \left\{ \langle T_\tau \dot{c}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau \dot{c}_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle + \langle T_\tau \ddot{c}_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \rangle \right. \\ & \left. + \langle T_\tau c_{\mathbf{k}} \ddot{c}_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle + \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) \dot{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) \dot{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Pour obtenir la décomposition de Wick ci-haut, il faut procéder à la décomposition, mais ensuite modifier certaines moyennes y apparaissant. Il est à remarquer que dans certains termes la dérivé temporelle sur certains opérateurs est déplacée sur l'opérateur voisin dans la moyenne, ce qui entraîne un changement signe devant le terme en question (voir A.13). Cela s'avère plus commode pour les calculs de la suite, et c'est aussi le genre d'expression qui se trouve dans la littérature [14]. On peut déduire ce comportement avec un exemple simplifié, avec des opérateurs quelconque A et B en utilisant les propriétés de l'invariance

sous translation dans le temps de la moyenne :

$$\begin{aligned}
 \langle \dot{A}(\tau)B(0) \rangle &= \frac{\partial}{\partial \tau} \langle A(\tau)B(0) \rangle \\
 &= \frac{\partial}{\partial \tau} \langle A(0)B(-\tau) \rangle \\
 &= \langle A(0) \frac{\partial B(-\tau)}{\partial \tau} \rangle \\
 &= - \langle A(0) \frac{\partial B(x)}{\partial x} \Big|_{x=-\tau} \rangle \\
 &= - \langle A(\tau) \dot{B}(0) \rangle.
 \end{aligned} \tag{A.13}$$

Pour $\tau > 0$, les moyennes non-nulles à considérer sont :

$$\begin{aligned}
 &- \langle T_\tau \dot{c}_\mathbf{k}^\dagger(\tau) \dot{c}_\mathbf{k} \rangle \langle T_\tau \dot{c}_\mathbf{k}(\tau) c_\mathbf{k}^\dagger \rangle \\
 &- \langle T_\tau \ddot{c}_\mathbf{k}(\tau) c_\mathbf{k}^\dagger \rangle \langle T_\tau \dot{c}_\mathbf{k}^\dagger(\tau) c_\mathbf{k} \rangle \\
 &- \langle T_\tau \dot{c}_\mathbf{k}^\dagger(\tau) c_\mathbf{k} \rangle \langle T_\tau c_\mathbf{k}(\tau) c_\mathbf{k}^\dagger \rangle \\
 &- \langle T_\tau \dot{c}_\mathbf{k}^\dagger(\tau) c_\mathbf{k} \rangle \langle T_\tau c_\mathbf{k}(\tau) \dot{c}_\mathbf{k}^\dagger \rangle.
 \end{aligned} \tag{A.14}$$

En utilisant les relations qui se trouvent plus haut, on a :

$$\chi_{\mathbf{k}}^{j_0, j_0}(i\omega_m) = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})^2 \int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_\mathbf{k}(\omega) A_\mathbf{k}(\omega') (\omega + \omega')^2 \left\{ \frac{n_F(\omega) - n_F(\omega')}{i\omega_m + \omega - \omega'} \right\}. \tag{A.15}$$

Après prolongement analytique et en prenant la partie imaginaire on a comme condition que $\omega' = \omega + \epsilon$. Pour un calcul en fréquences réelles on obtient la fonction suivante :

$$\chi_{\mathbf{k}}''^{j_0, j_0}(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})^2 \int \frac{d\omega}{4\pi} A_\mathbf{k}(\omega) A_\mathbf{k}(\omega + \epsilon) \left(\omega + \frac{\epsilon}{2} \right)^2 \{ n_F(\omega) - n_F(\omega + \epsilon) \}. \tag{A.16}$$

A.2. CALCUL DE $\chi_{JQJQ}(I\omega_N)$

En fréquences imaginaires avec sommation sur les fréquences de Matsubara on a l'expression ci-bas :

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}}^{j_Q, j_Q}(i\omega_m) &= \frac{-1}{4} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_{\mathbf{k}}(\omega) A_{\mathbf{k}}(\omega') (\omega + \omega')^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left[\left(\frac{1}{ip_n - \omega} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \left(\frac{1}{i\omega_m + ip_n - \omega'} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Comme $ip_n + i\omega_m$ demeure une fréquence fermionique, on peut écrire (avec $ip_l^+ = ip_n + i\omega_m$ et $ip_l^- = ip_n$) :

$$\chi_{\mathbf{k}}^{j_Q, j_Q}(i\omega_m) = \frac{-1}{4} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \int \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_{\mathbf{k}}(\omega) A_{\mathbf{k}}(\omega') (\omega + \omega')^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l^\pm} \left(\frac{1}{ip_l^- - \omega} \right) \left(\frac{1}{ip_l^+ - \omega'} \right). \quad (\text{A.18})$$

En réécrivant le numérateur comme $(\omega - ip_l^- + \omega' - ip_l^+ + (ip_l^+ + ip_l^-))^2$ et en divisant par $(ip_l^- - \omega)(ip_l^+ - \omega')$ on a :

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}}^{j_Q, j_Q}(i\omega_m) &= \frac{-1}{4} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_l^\pm} \{ -(\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle - ip_l^-) G_{\mathbf{k}}(ip_l^+) + 2 - (\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle - ip_l^+) G_{\mathbf{k}}(ip_l^-) \\ &\quad - 2(ip_l^+ + ip_l^-)[G_{\mathbf{k}}(ip_l^+) + G_{\mathbf{k}}(ip_l^-)] + (ip_l^+ + ip_l^-)^2 G_{\mathbf{k}}(ip_l^+) G_{\mathbf{k}}(ip_l^-) \}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

La forme ci-bas est aussi une forme équivalente :

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}}^{j_Q, j_Q}(i\omega_m) &= \frac{-1}{4} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x})^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \{ -(\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle - ip_n) G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m) + 2 - (\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle - ip_n - i\omega_m) G_{\mathbf{k}}(ip_n) \\ &\quad - 2(2ip_n + i\omega_m)[G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m) + G_{\mathbf{k}}(ip_n)] + (2ip_n + i\omega_m)^2 G_{\mathbf{k}}(ip_n + i\omega_m) G_{\mathbf{k}}(ip_n) \}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Ici $\langle \omega_{\mathbf{k}} \rangle$ est égal à $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + Un_{\sigma}$, et provient de :

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \omega A_{\mathbf{k}}(\omega) = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + Un_{\sigma}, \quad (\text{A.21})$$

où $n_{\sigma} = n/2$. Ceci est en fait le deuxième moment de la fonction de Green lorsqu'on considère son développement à hautes fréquences. Il est à noter qu'il a été vérifié que l'équation A.20 a bel et bien un comportement asymptotique en $1/\omega_m^2$, et que les termes additionnels d'ordre un s'annulent entre eux, en considérant les limites à hautes fréquences.

Annexe B

Moments de la Self-Énergie

Tout d'abord pour trouver l'expression des premiers moments de la self-énergie, il se doit de considérer les moments de la fonction de Green elle-même et son développement en fréquences. Ensuite on en déduit par association des coefficients les moments de la self-énergie. Considérons l'expression suivante pour la fonction de Green de l'impureté :

$$G_{d,\sigma} = \frac{1}{i\omega_n + \mu - E_d - \Delta - \Sigma(i\omega_n)}, \quad (\text{B.1})$$

où Δ est la fonction d'hybridation en CDMFT 2.4. En considérant la limite lorsque $\omega_n \rightarrow \infty$ on trouve en faisant un développement limité,

$$\lim_{i\omega_n \rightarrow \infty} G_{d,\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n} \left(1 - \frac{\mu - E_d - \Delta(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n)}{i\omega_n} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{i\omega_n^3}\right). \quad (\text{B.2})$$

On introduit de plus le développement de la fonction d'hybridation dans l'équation ci-haut,

$$\lim_{\omega_n \rightarrow \infty} \Delta(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}^2}{i\omega_n} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{i\omega_n^3}\right), \quad (\text{B.3})$$

ainsi que le développement de la self-énergie et celui de la fonction de Green pour comparer :

$$\begin{aligned} \lim_{i\omega_n \rightarrow \infty} G_{d,\sigma}(i\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n} \left(1 - \frac{\mu - E_d - \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} - \Sigma(\infty) - \frac{\Sigma^1}{i\omega_n}}{i\omega_n} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{i\omega_n^3}\right) \\ &= \frac{G^0}{i\omega_n} + \frac{G^1}{(i\omega_n)^2} + \frac{G^2}{(i\omega_n)^3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\omega_n^4}\right). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

On remarque alors que pour trouver $\Sigma(\infty)$ on doit calculer le moment d'ordre un de la fonction de Green, et que pour trouver Σ^1 on doit trouver G^2 et ainsi de suite. Se référer à la section X.I de l'article suivant [8] pour les équations et de plus amples détails à propos de l'expansion à hautes fréquences de la self-énergie. Cependant il est à noter qu'ils n'ont pas la même définition que nous du potentiel chimique et que cela modifie l'expression finale des moments. Le premier moment G_1^{ab} de la fonction de Green se calcule de la façon suivante :

$$G_1^{ab} = \langle \{ [H, d_{\sigma',a}], d_{\sigma',b}^\dagger \} \rangle, \quad (\text{B.5})$$

et on obtient les moments d'ordres supérieurs en calculant des commutateurs.

$$G_2^{ab} = \langle \{ [H, d_{\sigma',a}], [H, d_{\sigma',b}^\dagger] \} \rangle \quad (\text{B.6})$$

L'expression B.5 correspond au développement à haute fréquence de la fonction de Green en interaction :

$$G(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n} G_0 + \frac{1}{(i\omega_n)^2} G_1 + \frac{1}{(i\omega_n)^3} G_2 + \dots \quad (\text{B.7})$$

Le moment d'ordre zéro correspond à la normalisation et vaut normalement un. Ces coefficients à haute fréquence sont obtenues des discontinuités dans les dérivées de G ainsi que

de \mathcal{G}^0 autour de $\tau = 0$:

$$G_n = (-1)^{n+1} \left[\partial_\tau^{(n)} G(\tau)|_{\tau=0} + \partial_\tau^{(n)} G(\tau)|_{\tau=\beta} \right]. \quad (\text{B.8})$$

Utilisant la définition de la fonction de Green pour obtenir les dérivés par rapport au temps imaginaire ($G^{ab}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau d_a(\tau) d_b^\dagger(\tau') \rangle$) et en supposant un développement pour $\tau \approx 0$ de l'opérateur dépendant du temps ($d_a(\tau) = e^{H\tau} d_a e^{-H\tau}$), le résultat B.5 est obtenu. Considérant que le modèle est un modèle DMFT 2.2 à un site, les commutateurs doivent être évalués avec l'hamiltonien suivant :

$$H = \sum_\sigma (\epsilon_{\sigma,i}(\mathbf{k}) - \mu) n_{\sigma,i} + U \sum_{\sigma,j} n_{\sigma,i} n_{\sigma,j} + \sum_\sigma (d_\sigma^\dagger \sum_{\mathbf{k}} V_{\sigma,i,\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger V_{\sigma,i,\mathbf{k}}^* d_\sigma) + H_{bain}. \quad (\text{B.9})$$

Le terme H_{bain} commute avec les opérateurs fermioniques de site du réseau, donc ne contribue pas aux calculs des commutateurs. Après le calcul de $[H, d_{a'_\sigma}]$ et ensuite de l'anti-commutateur avec $d_{a'_\sigma}^\dagger$, on peut comparer avec le terme d'ordre similaire obtenu dans l'expression B.4. On peut alors en extraire le moment d'ordre zéro de la self-énergie par comparaison. Il est à remarquer que l'énergie du site E_d ainsi que le potentiel chimique ne sont pas supposés apparaître dans ces moments. Pour le moment d'ordre zéro on s'attend à obtenir le résultat Hartree-Fock. Les deux moments généralement utiles sont :

$$\Sigma(i\omega_n) = U \langle n_{d,\bar{\sigma}} \rangle + \frac{U^2}{i\omega_n} \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle (1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(i\omega_n)^2}\right). \quad (\text{B.10})$$

Annexe C

Méthode de prolongement analytique d'une self-énergie bruitée

Les self-énergie en fréquences imaginaires obtenues par Monte-Carlo 2.4 sont souvent très bruitées à hautes fréquences. Le problème de signe ainsi que les erreurs statistiques compliquent l'obtention de résultats précis. Pour évaluer les hautes fréquences de Matsubara il faut évaluer de petits intervalles de temps imaginaires. Il faut beaucoup d'échantillons pour avoir une bonne statistique et alors y a plus de bruit. Dans le cas d'un autre solveur d'impureté, comme ce qui a été utilisé pour calculer les données utiles à la deuxième partie de cette maîtrise, l'IPT, ou théorie des perturbations itérées, les résultats se veulent assez précis pour qu'un prolongement analytique avec la méthode d'entropie maximale soit possible 4.1, ou même par méthode de Padé 4.2.1, tel qu'expliqué à la section IIA de cet article [2]. Éventuellement, dans le cas de self-énergies bruitées obtenues par Monte-Carlo, une stratégie possible est de passer par des fonctions de Green auxiliaires, n'ayant pas de sens physique, mais étant plus facile à prolonger analytiquement, puisque l'inversion des données complexes limitera le bruit. Dans le but d'obtenir un comportement bien défini à l'infini on ajoute aussi à la self-énergie sa partie Hartree-Fock $\Sigma(\infty)$. Il advient alors de

calculer les fonctions suivantes avec les données de départ :

$$G^{aux}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \Sigma(i\omega_n) + \Sigma(\infty)} \quad (\text{C.1})$$

En procédant au prolongement analytique des fonctions suivantes, on obtient $A^{aux}(\omega) = -2\text{Im}G^{aux}(\omega)$. Pour obtenir la partie réelle de la fonction de Green il est nécessaire d'utiliser les relations de Kramers-Krönig :

$$\text{Re } G(y) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G(x) dx}{y - x}. \quad (\text{C.2})$$

Pour l'implémentation numérique on doit d'abord se débarrasser de la partie divergente de C.1 en la soustrayant et en intégrant aux extrémités de l'intervalle d'intégration analytique. Le cas à $x = y$ doit être estimé en évaluant la dérivée de l'intégrant. La formule à implémenter est [9] :

$$\text{Re } G(y) = \frac{-1}{\pi} \int_a^b \left[\frac{\text{Im } G(x) - \text{Im } G(y)}{y - x} \right] dx + \frac{\text{Im } G(y)}{\pi} \log \left(\frac{b - y}{y - a} \right) \quad (\text{C.3})$$

Par la suite on doit seulement inverser de nouveau les nombres complexes obtenus pour obtenir la Self-énergie en fréquences réelles, et non pas ces fonctions de Green auxiliaires. Il se trouve que la partie imaginaire s'obtient facilement par inversion de nombres complexes uniquement. Par contre il faut utiliser une seconde fois l'équation ci-haut C.3 pour obtenir la partie réelle à partir de la partie imaginaire venant d'être calculée. En effet, il se trouve que cette dernière est très instable aux petites variations numériques et que l'inversion de nombre complexes a tendance à diverger.

Annexe D

Preuve de la formule utile pour le calcul de la densité électronique

L'expression pour calculer la densité électronique analytiquement le plus souvent rencontrée dans la littérature conventionnelle est :

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-ik_n 0^-}}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (\text{D.1})$$

et dans sa version avec interaction en représentation spectrale, est incalculable numériquement. En effet, le facteur dit de convergence ($e^{-ik_n 0^-}$), utile lors d'un calcul analytique standard avec le théorème des résidus, est justement cause de problèmes numériques liés à une précision. Il se doit de trouver une autre expression plus près d'une implémentation numérique. Une expression se trouve dans le livre de D. Mahan[5] *Many-body physics* à l'équation 3.1.2 page 124, mais, n'est pas démontrée. On y trouve l'équation ci-dessous. *Il est à remarquer que cette expression est mathématiquement divergente lorsqu'écrite*

comme tel.

$$\frac{1}{e^{\epsilon_{\mathbf{k}}\beta} + 1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)i\pi/\beta - \epsilon_{\mathbf{k}}} \quad (\text{D.2})$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (\text{D.3})$$

Cependant, il est à remarquer que numériquement on ne somme pas jusqu'à l'infini, et donc qu'un résultat cohérent est généralement obtenu lorsque n est de l'ordre de quelques milliers. Par contre, on doit faire attention aux bornes de sommation, de façon à ce que le nombre de termes à $n < 0$ et à $n > 0$ soit similaire :

$$\frac{1}{e^{\epsilon_{\mathbf{k}}\beta} + 1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} 2 \operatorname{Re} [\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)]. \quad (\text{D.4})$$

Pour démontrer la relation D.2, considérons tout d'abord la somme suivante, qu'on appellera $g(z)$ mise sous une forme symétrisée : Le facteur β sera oublié dans la démonstration, et $\epsilon_{\mathbf{k}}$ désigné par $z \in \mathbb{C}$ pour souligner davantage qu'on est passé à une représentation avec des variables complexes. Les grandes lignes de cette preuve mathématique se trouvent à cette adresse [12]. En commençant avec une décomposition sur les indices positifs et négatifs comme suit :

$$g(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2n+1)i\pi - z} \quad (\text{D.5})$$

$$= \sum_{\substack{k>0 \\ \text{impair}}} \frac{1}{ki\pi - z} - \frac{1}{ki\pi + z} \quad (\text{D.6})$$

$$= - \sum_{\substack{k>0 \\ \text{impair}}} \frac{2z}{z^2 + k^2\pi^2}. \quad (\text{D.7})$$

Définissons $f(z) = 1/(e^z + 1)$. On vérifie que $f(z)$ et $g(z)$ ont les mêmes pôles, soient en $z = (2n+1)i\pi$ et ainsi que les mêmes résidus, qui sont des résidus d'ordre un puisqu'on a

affaire à des pôles simples :

$$\text{Res}_{z=(2k+1)i\pi} \left(\frac{1}{e^z + 1} \right) = -1 \quad (\text{D.8})$$

$$\text{Res}_{z=(2k+1)i\pi} \left(\frac{-2z}{z^2 + k^2\pi^2} \right) = -1. \quad (\text{D.9})$$

$$(\text{D.10})$$

Ceci entraîne que le résultat de $f(z) - g(z)$ est une fonction entière, soit une fonction analytique sur tout le plan complexe. En effet, pour une valeur fixe de z , supposant un développement en série de Laurent de $f(z)$ et de $g(z)$, les termes divergents en $1/z$ s'annulent. Il reste alors à calculer cette différence que l'on sait finie, et d'abord à vérifier si ces deux dernières fonctions sont bornées loin de leurs pôles. Remarquons que $f(z)$ et $g(z)$ sont $2\pi i$ -périodiques, et donc on peut s'intéresser seulement à leur comportement lorsque $\text{Re}(z) \rightarrow \pm\infty$. $f(z)$ est nécessairement bornée loin de ses pôles puisque $\lim_{z \rightarrow \infty} f(z) = 1$ ou zéro lorsque $\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \text{Re}(z) = \pm\infty$. Décomposant la sommation en deux parties de la façon suivante :

$$g(z) = \sum_{\substack{0 < k < 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} + \sum_{\substack{k \geq 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} \frac{-2z}{z^2 + k^2\pi^2} = S_1(z) + S_2(z) \quad (\text{D.11})$$

$$S_1(z) = \left| \frac{-2}{z} \sum_{\substack{0 < k < 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} \frac{1}{1 + k^2\pi^2/z^2} \right| \leq \frac{2}{|z|} \frac{2|z|}{\pi} = 4. \quad (\text{D.12})$$

Il est à remarquer que pour la deuxième sommation, l'inégalité du triangle est d'abord utilisée pour passer de la première ligne à la deuxième. Ensuite, le passage à l'intégration

provient du *théorème de comparaison*, ou aussi appelé *critère integral de Cauchy*. On a,

$$\begin{aligned}
 S_2(z) &= \sum_{\substack{k \geq 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} \frac{-2z}{z^2 + k^2\pi} \\
 &\leq 2|z| \sum_{\substack{k \geq 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} \frac{1}{|\pi^2 k^2 + z^2|} \\
 &\leq \sum_{\substack{k \geq 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} \frac{1}{\|\pi^2 k^2 - |z|^2\|} \\
 &\leq \sum_{\substack{k \geq 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} \frac{1}{|\pi^2 k^2 - |z|^2|}, \tag{D.13}
 \end{aligned}$$

où pour le passage de la troisième ligne à la quatrième il est possible de vérifier que $|\pi^2 k^2 - |z|^2| > 0$. Ensuite, il faut remarquer que $|\pi^2 k^2 - |z|^2| \geq 3\pi^2 k^2/4$, en raison de la condition de sommation, et donc que :

$$\begin{aligned}
 S_2(z) &\leq \frac{8}{3}|z| \sum_{\substack{k \geq 2|z|/\pi \\ \text{impair}}} \frac{1}{\pi^2 k^2} \\
 S_2(z) &\leq \frac{8}{3}|z| \int_{-1+2|z|/\pi}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 s^2} ds \\
 S_2(z) &\leq \frac{8}{3\pi^2} \frac{|z|}{-1 + 2|z|/\pi} \leq C, \tag{D.14}
 \end{aligned}$$

pour $C > 0$, *une constante*. De ce fait, $f(z) - g(z)$ est une fonction entière et bornée. Le théorème de Liouville en analyse complexe s'applique et le résultat de cette soustraction doit être une constante. On constate premièrement que :

$$f(0) - g(0) = \frac{1}{2} - 0 = \frac{1}{2}. \tag{D.15}$$

Selon les arguments précédents, on déduit que :

$$f(z) - g(z) = \frac{1}{2} \quad \forall z. \tag{D.16}$$

C'est la seule possibilité. Les autres termes pouvant apparaître dans la soustraction des deux, (pensons à leur développement de Taylor), ne seraient pas constants, et cela ne serait pas en accord avec le théorème de Liouville. On en déduit donc que l'expression est aussi valable dans le cas avec interactions, la même démonstration pouvant être faite avec la fonction de Green en représentation spectrale :

$$\langle n_{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \text{Re} [G(\mathbf{k}, i\omega_n)]. \quad (\text{D.17})$$

Ou bien il est possible de considérer l'expression suivante en sachant que l'on somme les termes pour $n < 0$ et $n > 0$, en alternance.

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n=-\infty}^{\infty} G_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \quad (\text{D.18})$$

Bibliographie

- [1] L.-F. Arseneault, « Nouvelles approches en théorie du champ moyen dynamique : le cas du pouvoir thermoélectrique et celui de l'effet orbital d'un champ magnétique, » Thèse de doctorat, Département de physique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada, février 2013. Disponible à http://www.physique.usherbrooke.ca/pages/sites/default/files/These_Arsenault_fev2013.pdf
- [2] L.-F. Arseneault, B. S. Shastry, P. Sémon, et A.-M.S.Tremblay, « Entropy, frustration, and large thermopower of doped Mott insulators on the fcc lattice. » *Physical review B*, vol. 87, pp. 3–15, 2013.
- [3] G. Baym et N. Mermin, « Analytical continuation unique in principle, » *Journal Math. Phys.*, vol. 2, p. 232, 1961.
- [4] D. Bergeron et A. Tremblay, « Algorithms for optimized maximum entropy and diagnostic tools for analytic continuation, » *Non publié*, pp. 1–25, 2015. Disponible à <http://arxiv.org/pdf/1507.01012v1.pdf>
- [5] G. D.Mahan, *Many-body physics*. Plenum : Physics of solids and liquids, 1981.
- [6] M. Ferrero, O. Percolet, A. Georges, et G. Kotliar, « Interplane charge dynamics in a valence-bond dynamical mean-field theory of cuprate superconductors, » *Physical review B*, vol. 82, pp. 5–1, 2010.

- [7] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, et M. Rozenberg, « Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, » *Reviews of modern physics*, vol. 68, pp. 1–113, 1996.
- [8] E. Gull, A. J. Millis, M. Troyer, et P. Werner, « Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. » *Reviews of modern physics*, vol. 83, pp. 349–404, 2011.
- [9] K. Haule, « Rutgers Computational physics courses notes - basic numerical algorithms, » accédé le 22/10/2015. Disponible à <https://www.physics.rutgers.edu/grad/509/integr.pdf>
- [10] N. J. Higham, *Accuracy and stability of numerical algorithms*. Manchester, UK : SIAM Society of industrial and applied mathematics, 2002.
- [11] A. Levchenko, « Transport theory of superconductors with singular interaction corrections, » *Physical review B*, vol. 81, pp. 1–4, 2009.
- [12] « Mathematics StackExchange forum - How do I find the series expansion of the meromorphic function, » accédé le 22/10/2015. Disponible à <http://math.stackexchange.com/questions/395878/how-do-i-find-the-series-expansion-of-the-meromorphic-function-frac1ez1>
- [13] G. Mahan et J. Sofo, « The best thermoelectric, » *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 93, pp. 7439–7439, 1996.
- [14] I. Paul et G. Kotliar, « Thermal transport for many-body tight-binding models, » *Physical review B*, vol. 67, pp. 349–404, 2003.
- [15] A. Reymbaut, « Universalité du crossover de Mott à demi-remplissage et effets de la répulsion coulombienne aux premiers voisins sur la dynamique supraconductrice des isolants de Mott dopés aux trous, » Thèse de doctorat, Département de physique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec,

BIBLIOGRAPHIE

- Canada, avril 2016. Disponible à http://www.physique.usherbrooke.ca/pages/sites/default/files/Reymbaut_A_these.pdf
- [16] B. S. Shastry, « Electrothermal transport coefficients at finite frequencies, » *Reports on progress in physics*, vol. 72, pp. 1–24, 2009.
- [17] D. J. Singh et W. E. Pickett, « Skutterudite antimonides : Quasilinear bands and unusual transport, » *Physical Review B*, vol. 50, pp. 11 235–11 238, 1994.
- [18] D. Spitzer, « Lattice thermal conductivity : a chemical bond approach, » *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 40, pp. 19–40, 1970.
- [19] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule, et A. Tremblay, « C-axis resistivity, pseudo-gap, superconductivity, and Widow line in doped Mott insulators, » *Physical review B*, vol. 87, pp. 4–15, 2013.
- [20] D. Sénéchal, « An introduction to quantum cluster methods (Lectures given at the CIFAR-PITP International Summer School on Numerical Methods for correlated systems in condensed matter), » pp. 1–26, 2008. Disponible à <http://arxiv.org/pdf/0806.2690v2.pdf>
- [21] A.-M. Tremblay, *Note de cours PHQ 892 : Problèmes à N-corps*. Sherbrooke, Québec, Canada : Département de physique, Université de Sherbrooke, Hiver 2014. Disponible à <http://www.physique.usherbrooke.ca/tremblay/cours/phy-892/N-corps.pdf>
- [22] P. Werner, « Juin 2014 - Orford (Sherbrooke) : Lectures notes for the international summer school on numerical methods for correlated systems in condensed matter, » notes privées.