

Rapport du cours d'initiation à la recherche PHQ662

Francis Laliberté†

†Département de physique, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1

L'un des grands défis de la physique du XXI^e siècle est très certainement l'explication du phénomène de la supraconductivité à haute température découvert il y a un peu plus de vingt ans. Tandis que les équipes d'expérimentateurs multiplient les mesures sur des échantillons dont la pureté atteint des sommets inégalés, la recherche théorique s'affaire à trouver le modèle qui saura décrire les fortes interactions entre les électrons de ces matériaux. Un point de départ prometteur dans ce sens est le modèle de Hubbard pour l'étude des isolants de Mott. Dans le cadre d'un cours d'initiation à la recherche théorique, le présent document a pour but d'introduire les concepts importants à ce travail de recherche et de faire un pas de plus vers l'obtention du diagramme de phase du modèle de Hubbard à demi-remplissage par la théorie de champ moyen dynamique cellulaire. En particulier, on s'intéresse ici à la double occupation à $t'/t = 0.35$ et $t'/t = 0.75$, à l'absence d'hystérésis, au diagramme de phase et à la fonction de poids spectral.

I. INTRODUCTION ET MOTIVATIONS

Les succès des modèles théoriques de la physique de l'état solide sont notables et nombreux¹. Il suffit de penser aux réseaux de Bravais, aux phonons, au gaz de Fermi, aux semi-conducteurs, aux supraconducteurs, etc. pour s'en convaincre. Toutefois, ces modèles négligent le plus souvent les interactions entre les électrons². Il devient important de considérer ces interactions pour expliquer de nouveaux phénomènes tels que les supraconductivité à haute température et les transitions de Mott. La physique de la matière condensée tente donc de mettre au point de nouveaux outils théoriques afin d'explorer et comprendre ces systèmes d'électrons fortement corrélés.

Peu de temps après la découverte des supraconducteurs à haute température en 1986, les isolants de Mott ont été identifiés pour expliquer les origines de ce nouveau phénomène impliquant de fortes interactions entre les électrons. Plus de vingt ans plus tard, le rôle joué par les isolants de Mott ne fait toujours pas l'unanimité; par exemple, Comanac *et al.*⁸ le remettaient en question récemment. Dans ce contexte, il est donc pertinent d'étudier les isolants de Mott avec les paramètres correspondant à la supraconductivité et d'obtenir un diagramme de phase généralisé afin d'illustrer la compétition entre les différents états de la matière.

Dans le cadre d'une formation en physique, les cours de travaux pratiques sont de très bon moyens de s'initier aux expériences qui font toute la richesse de cette science des lois et des phénomènes de la Nature. Personnellement, j'ai eu la chance de réaliser mes stages du régime coopératif au département de physique en recherche expérimentale. Toutefois, avant de débiter une maîtrise, il m'apparaissait important d'avoir une idée de ce en quoi consiste la recherche théorique en physique. C'est donc dans ce but que je me suis initié à la seconde quantification et au modèle de Hubbard par l'entremise de ce cours.

Ce rapport a pour but de résumer les connaissances acquises au cours du projet, d'en décrire les objectifs et la méthodologie, pour finalement dégager les principaux résultats obtenus.

II. CONNAISSANCES ACQUISES

Les premières semaines de cours ont été consacré à la lecture de documents³⁻⁵ expliquant le langage de la deuxième quantification ainsi que les concepts mis en jeu par le modèle de Hubbard, les transitions de phase, les fonctions de Green, etc. En voici un bref résumé.

A. Deuxième quantification

En mécanique quantique, le premier postulat⁶ énonce que l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un ket $|\psi\rangle$ appartenant à l'espace des états \mathcal{E} . Ce ket dépend des coordonnées attribuées aux particules (e.g. des électrons) considérées par le système. Pour un système de N particules, N pouvant être de l'ordre de 10^{23} , il est peu pratique de travailler avec un tel ket. On préfère augmenter l'espace de Hilbert de manière à considérer tous les nombres N possibles⁴. Cela s'écrit

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \oplus \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 \oplus \mathcal{E}_3 \oplus \dots \quad (1)$$

et on définit par la suite les opérateurs de création et d'annihilation permettant le passage entre les différents espaces de Hilbert.

L'opérateur d'annihilation, représenté par la lettre c , permet d'annihiler un électron sur un site donné. Par exemple, pour un état à un site, on a $c|1\rangle = |0\rangle$. L'opérateur de création est bien sûr donné par son conjugué hermitique c^\dagger et a pour effet de créer un électron sur un site vide, par exemple $c^\dagger|0\rangle = |1\rangle$. On note que l'anticommutateur des opérateurs de création et d'annihilation est égale à un et que le nombre d'électrons est $n = c^\dagger c$.

Dans un système de N sites ioniques, pouvant contenir $2N$ électrons en raison du principe d'exclusion de Pauli, on définit l'opérateur de création c_i^\dagger tel que $|i\rangle = c_i^\dagger|0\rangle$; un électron est créé au site i . L'état à deux électrons $|i, j\rangle$, un au site i et un autre au site j , doit être antisymétrique, encore une fois d'après le principe d'exclusion de Pauli. De là découle une propriété fondamentale

de ces opérateurs : ils doivent anticommutter s'ils s'appliquent sur des sites différents.

$$\{c_i, c_j\} = 0 \quad \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 \quad \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2)$$

L'introduction du spin se fait tout simplement en ajoutant un indice $\sigma = \uparrow, \downarrow$ aux opérateurs c_i et c_i^\dagger . Le nombre d'électrons de spin σ au site i est donc donné par l'opérateur $n_{i\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$.

B. Modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard est un modèle physique largement utilisé et très simple, permettant de représenter la structure de bande d'électrons dans les solides ainsi que la répulsion électrostatique. Il fait appel aux opérateurs de création et d'annihilation définis précédemment et son hamiltonien s'écrit

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (3)$$

où $t > 0$ est l'amplitude de saut et $U > 0$ est l'énergie de répulsion électrostatique. Le premier terme représente l'énergie cinétique ; il permet à un électron de passer du site i au site j , ces deux sites étant voisins. L'amplitude de saut est en fait l'amplitude de probabilité pour que le saut se produise. Le second terme représente l'énergie potentielle ; il tient compte du nombre de sites où il y a deux électrons, chacun contribuant de U à l'énergie totale. Bien sûr, il est possible d'adapter le modèle pour tenir compte de sauts entre seconds voisins ou de la répulsion entre électrons situés sur des sites différents.

Le problème consiste à diagonaliser simultanément les termes d'énergie cinétique et potentielle afin de connaître les énergies propres et les états propres du système étudié. Par ailleurs, le modèle de Hubbard permet de décrire les transitions de phase métal/isolant. En effet, la combinaison du mouvement des électrons (sauts) et de leur répulsion coulombienne détermine l'état d'un matériau.

C. Transitions de phase

Il existe deux grandes classes de transitions de phase : les transitions *discontinues* ou de premier ordre et les transitions *continues* ou du second ordre³. La première implique l'existence d'une chaleur latente, i.e. une énergie libérée (ou absorbée) lors de la transition du premier ordre par une quantité macroscopique de la substance dans le nouvel état.

La transition du second ordre est quant à elle caractérisée par l'existence d'un point critique dans le diagramme de phase. Ce point critique correspond au point où la transition cesse d'être discontinue. Il est donc possible de contourner ce point en passant d'une phase à l'autre et ce de manière continue.

D. Fonctions de Green

Les fonctions de Green $G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$, aussi appelées propagateurs, sont des outils essentiels en théorie quantique des champs depuis qu'elle ont été popularisée par Feynman en 1948 dans sa formulation de l'électrodynamique quantique⁷. Leur introduction mathématique dépasse malheureusement le cadre de ce rapport. On se contentera de souligner que la partie imaginaire de la fonction de Green donne le poids spectral $A(\mathbf{k}, \omega)$ qui contient l'information sur l'occupation d'un état de vecteur d'onde \mathbf{k} et d'énergie $\hbar\omega$. En intégrant sur toutes les fréquences ω , on obtient la distribution de quantité de mouvement et en sommant sur tout les vecteurs d'onde \mathbf{k} , on obtient la densité d'états.

III. MÉTHODE ET OBJECTIFS

La méthode utilisée pour ce projet est le calcul du diagramme de phase du modèle de Hubbard demi-rempli sur un réseau carré à l'aide d'un programme écrit par Bumsoo Kyung. Ce programme, lancé sur une grappe de Mammoth série, fait appel à la théorie de champ moyen dynamique cellulaire (CDMFT), une théorie visant à simplifier la résolution de l'hamiltonien du modèle de Hubbard en introduisant un champ moyen décrivant les interactions entre les électrons². Aussi, cette théorie fait intervenir une amplitude de saut t' vers le second voisin. Le réseau infini sur lequel les calculs sont effectués est divisé en amas identiques composés d'un certain nombre de sites. Le programme considère un seul amas tandis que tous les autres sont représentés par un bain d'électrons sans interaction. La donnée de paramètres initiaux, tels que l'énergie potentielle U , l'amplitude de saut t' , le potentiel chimique μ ainsi que les paramètres du bain, permet au programme de calculer les propriétés de l'état correspondant, entre autres le remplissage et la double occupation $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$. On obtient également le poids spectral $A(\mathbf{k}, \omega)$.

Dans le cadre limité de ce projet, il m'a été demandé de poursuivre les travaux amorcés par Marc Chamberland lors d'un stage, soit de calculer certains points dans le diagramme de phase pour le modèle de Hubbard bi-dimensionnel à demi-remplissage dans l'état normal. Concrètement, il me fallait déterminer le potentiel chimique μ , pour des valeurs de U/t et de t'/t données, tel que le remplissage soit égal à 1. Dans la phase métallique, la relation entre le potentiel chimique et le remplissage est linéaire. Il suffit donc de balayer une plage de valeurs pour μ et d'intrapoler la valeur correspondant au demi-remplissage. Il est possible de trouver le potentiel chimique de sorte que le remplissage soit 1 à trois ou quatre chiffres significatifs près. Dans la phase isolante, le remplissage suit un plateau autour de 0.98 lorsque μ augmente, puis soudainement, il passe à une valeur bien au-dessus de 1, soit 1.02 ou plus. Dans cette situation, le potentiel chimique est pris au milieu du plateau.

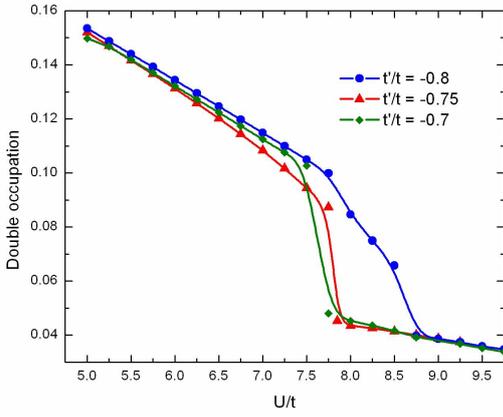


FIG. 1: Double occupation en fonction de U/t pour différentes valeurs de t'/t .

IV. RÉSULTATS ET DISCUSSION

Il s'est avéré, au cours des premières semaines consacrées aux calculs, que la détermination du potentiel chimique tel que le remplissage vaut 1 est une activité très exigeante en temps. La première des tâches accomplies a été d'obtenir les valeurs de μ pour $t'/t = 0.75$ et pour des valeurs de U/t variant de 5 à 10 par intervalle de 0.25. Cette région du diagramme de phase, à la lumière du travail effectué par Marc Chamberland, semblait présenter une transition de phase métallique/isolante particulière. En effet, la transition du premier ordre, très abrupte à $t'/t = 0.7$ devient passablement plus douce à $t'/t = 0.8$. La figure 1 présente la double occupation à demi-remplissage en fonction de U/t pour $t'/t = \{0.7, 0.75, 0.8\}$. Afin de bien définir la transition, un point supplémentaire a été calculé pour $t'/t = 0.75$, soit à $U/t = 7.85$. La transition de métal à isolant est donc située à $U_c = (7.8 \pm 0.05)t$. La comparaison avec la transition à $t'/t = 0.8$ laisse penser qu'il y a une phase différente à cet endroit dans le diagramme de phase.

D'après certaines références¹⁰, la transition de phase pourrait présenter une hystérésis de l'ordre de $0.5t$ sur la valeur de U dépendamment des paramètres initiaux du bain, soit qu'ils proviennent de la phase métallique ou de la phase isolante. Afin de vérifier cette assertion, les potentiels chimiques ont été calculés à nouveau en utilisant une solution initiale isolante, les premiers calculs ayant été faits pour une solution initiale métallique. Compte tenu de la précision numérique des valeurs obtenues pour la double occupation, i.e. en tenant compte de cinq chiffres après le point, les transitions ne présentent aucune hystérésis à $t'/t = 0.75$. Un point supplémentaire a été évalué dans la transition pour confirmer l'absence d'hystérésis à $U/t = 7.85$ et encore une fois, les valeurs trouvées pour la double occupation sont égales au cinquième chiffre significatif. Cette recherche d'hystérésis a été étendue à $t'/t = 0.5$. Cette fois encore et toujours en tenant compte de cinq chiffres après la décimale,

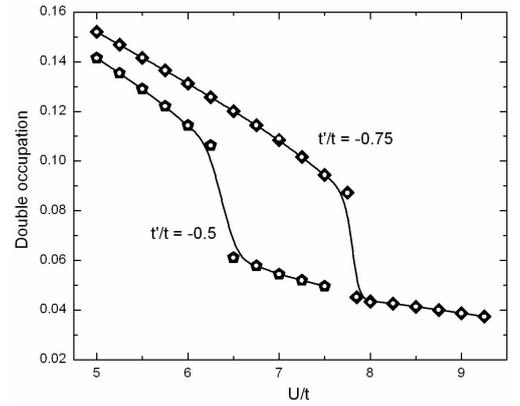


FIG. 2: Double occupation en fonction de U/t pour $t'/t = 0.75$ et $t'/t = 0.5$. Les données calculées pour des solutions initiales métallique et isolante sont superposées.

la transition ne montre pas d'hystérésis. Les résultats sont regroupés dans un même graphique à la figure 2 et permettent de constater ce qui a été énoncé. Selon ces résultats, il n'y a pas d'hystérésis supérieure à $0.1t$ pour la transition de premier ordre métal/isolant dans l'état normal à demi-remplissage.

Enfin, les potentiels chimiques ont été calculés à $t'/t = 0.35$, un point du diagramme de phase qui correspond plus ou moins au passage d'une transition de deuxième ordre ($t'/t = 0.3$) à une transition de premier ordre ($t'/t = 0.4$). La double occupation extraite a été tracée, en fonction de U/t , sur la figure 3 pour $t'/t = \{0.3, 0.35, 0.4\}$. On constate que la transition pour $t'/t = 0.35$ est significativement plus abrupte que celle pour $t'/t = 0.3$. Cela porte à croire que le point critique qui correspond au passage de la transition du premier ordre à celle du deuxième ordre est situé entre ces deux valeurs. Il est à noter que les points dans la phase isolante se chevauchent presque parfaitement. Cela est en bon accord avec le calcul de la double occupation en théorie des perturbations qui prévoit une dépendance en t'^2 multiplié par l'interaction des spins des seconds voisins, soit $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, un terme qui tend à s'annuler globalement. Pour de faibles valeurs de t' dans la phase isolante, la double occupation doit donc être la même, ce qui est bien observé ici.

À la lumière des résultats obtenus et en utilisant également les données de Marc Chamberland, on est en mesure de tracer le diagramme de phase contenant la transition métal/isolant (figure 4). Les points étoilés sont issus des calculs effectués à $t'/t = \{0.35, 0.5, 0.75\}$. Ils sont tous les trois en bon accord avec les points trouvés par Marc Chamberland. Un lissage de degré 2 a été fait dans le but de délimiter la transition de phase. On remarque que tous les points rejoignent la courbe de lissage compte tenu de leur incertitude. Les données recueillies ne permettent pas de placer des points à $t'/t = 0$ et $t'/t = 0.1$, car la transition est continue au point où il devient impossible de distinguer un début et une fin. Un moyen de déterminer la position de ces points,

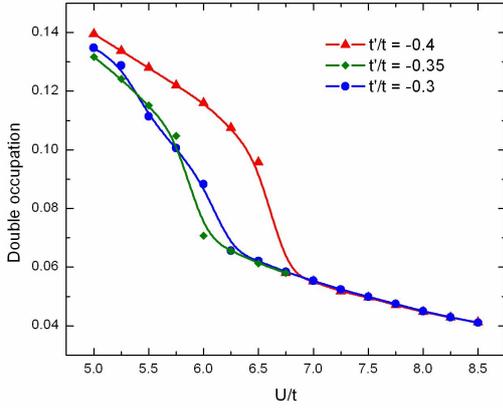


FIG. 3: Double occupation en fonction de U/t pour différentes valeurs de t'/t .

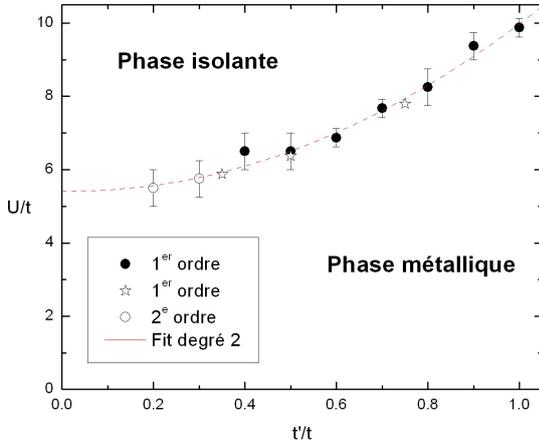


FIG. 4: Diagramme de phase de la transition métal/isolant. Les cercles sont issus des données de Marc Chamberland et les étoiles proviennent des figures 1, 2 et 3. Les valeurs de U_c/t qui déterminent la transition ont été prises au milieu de la transition et les incertitudes correspondent à la largeur de la transition. Il est noté que l'incertitude sur les points étoilés est plus petite que le point lui-même; elle n'apparaît donc pas.

qui n'a pas été employé au cours de cette session, serait d'étudier la fonction de poids spectral et d'identifier la valeur de U_c/t à laquelle le gap s'ouvre à l'énergie de Fermi. Toutefois, cette étude a été faite pour les valeurs $t'/t = \{0.3, 0.35, 0.75\}$. La première valeur correspond à une transition de deuxième ordre et les deux autres à des transitions du premier ordre. On voit sur la figure 5 ($t'/t = 0.3$) que la transition du deuxième ordre ouvre clairement le gap, avec toutefois une grande variation de U/t , soit 0.75. À l'inverse, la figure 6 ($t'/t = 0.35$) montre le gap ouvert par la transition du premier ordre pour une variation de U/t trois fois moindre. Le gap est par contre indirect et sa valeur est bien plus petite.

Enfin, la figure 7 présente le poids spectral pour $t'/t = 0.75$ et l'on voit que pour une variation infime de U/t (0.1), le gap est direct et clairement établi. On

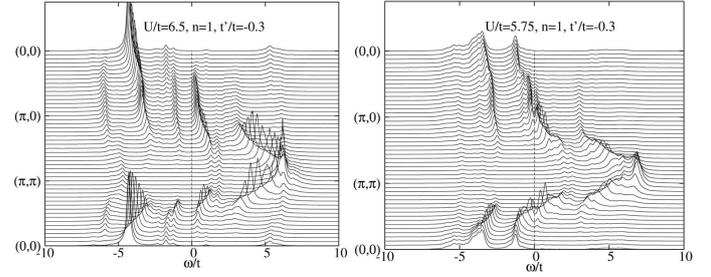


FIG. 5: Poids spectral $A(\mathbf{k}, \omega)$ suivant différentes directions dans la zone de Brillouin pour $U/t = 6.5$ et $U/t = 5.75$ à $t'/t = 0.3$ dans l'état normal à demi-remplissage.

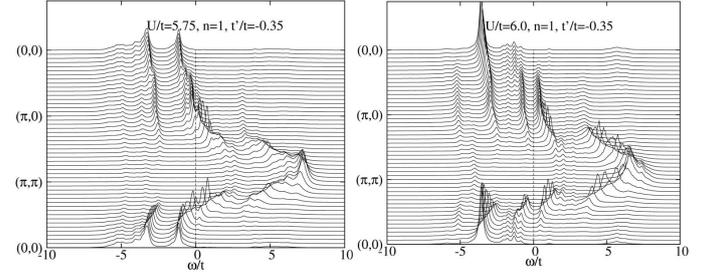


FIG. 6: Poids spectral $A(\mathbf{k}, \omega)$ suivant différentes directions dans la zone de Brillouin pour $U/t = 5.75$ et $U/t = 6.0$ à $t'/t = 0.35$ dans l'état normal à demi-remplissage.

constate également que l'étude du poids spectral est une méthode précise, bien que longue, de déterminer la valeur de U_c/t de la transition tout en éliminant l'incertitude liée à la largeur de la transition sur un graphique de la double occupation.

V. CONCLUSION

Pour terminer, il est souhaitable de comparer les données présentées à la section précédente avec celles obtenues par d'autres méthodes. Les valeurs de U_c/t obtenues par une méthode d'intégrale de chemin de Monte-

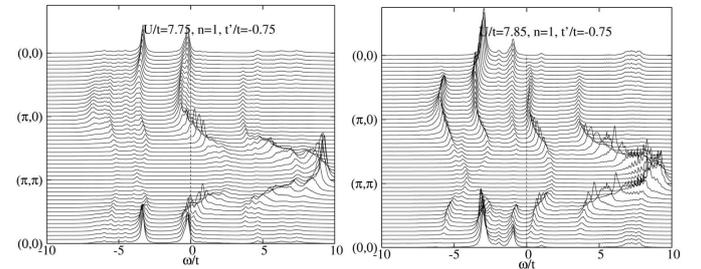


FIG. 7: Poids spectral $A(\mathbf{k}, \omega)$ suivant différentes directions dans la zone de Brillouin pour $U/t = 7.75$ et $U/t = 7.85$ à $t'/t = 0.75$ dans l'état normal à demi-remplissage.

Carlo¹¹ sont significativement plus faibles, soient $U_c/t = 3$ à $t'/t = 0.25$ et $U_c/t = 5$ à $t'/t = 0.8$. Par contre, celles obtenues par une méthode d'optimisation variationnelle de Monte-Carlo¹² s'en rapprochent davantage puisque dans ce cas $U_c/t \approx 7$ pour la région étudiée $t'/t < 0.5$. Enfin, l'extrapolation à $t' = 0$ donne $U_c/t \approx 5$, une valeur comparable à celle trouvée par une étude de Monte-Carlo quantique¹³, soit $U_c/t = 6$.

Par ailleurs, une approche d'amas variationnel (VCA)⁹ donne des valeurs de U_c/t inférieures à 5 pour toute la gamme $0 \leq t' \leq 1$. Tel qu'expliqué par Nevidomskyy *et al.*⁹, il est normal que les valeurs de U_c/t trouvées par VCA soient plus petites que celles trouvées par CDMFT, la méthode utilisée ici, puisque la VCA tend à surestimer l'effet des interactions. Ces résultats sont encourageants pour la suite des recherches sur le diagramme de phase contenant les fameux supraconducteurs.

Remerciements

J'aimerais remercier André-Marie Tremblay qui a généreusement accepté de me prendre en tant qu'étudiant pour ce cours d'initiation à la recherche et qui m'a consacré du temps lorsque cela était nécessaire. Je souhaite remercier également Bumsoo Kyung qui m'a patiemment expliqué le fonctionnement de son programme et qui m'a grandement aidé à interpréter les résultats que j'ai obtenus. Une mention également à Patrick Vachon qui m'a fait profiter de ces compétences informatiques lorsque l'ordinateur ne faisait pas ce que je voulais. J'ai beaucoup apprécié mon expérience dans le milieu de la recherche théorique. Cela m'a permis d'élargir mes horizons et d'approfondir ma connaissance de la recherche en physique de la matière condensée.

¹ C. Kittel, Physique de l'état solide, 8e édition, 2005.

² M. Chamberland, Rapport de stage, Département de physique, Université d'Ottawa, septembre 2006.

³ C. Bourbonnais, Physique statistique PHY-741 (notes de cours), Département de physique, Université de Sherbrooke, janvier 2005.

⁴ D. Sénéchal, Introduction à la deuxième quantification et au modèle de Hubbard, Département de physique, Université de Sherbrooke, janvier 1999.

⁵ A.-M.S. Tremblay, Problème à N-Corps PHY-892 (notes de cours), Département de physique, Université de Sherbrooke, septembre 2005.

⁶ C. Cohen-Tannoudji, Mécanique quantique I, Édition revue et corrigée, 1998.

⁷ <http://fr.wikipedia.org/>, Fonction de Green, consulté le 13 avril 2008.

⁸ A. Comanac, L. De Medici, M. Capone et A.J. Millis, Nature, Advanced online publication, 2008.

⁹ A. Nevidomskyy, C. Scheiber, D. Sénéchal et A. M. S. Tremblay, Phys. Rev. B **77**, 064427 (2008).

¹⁰ B. Kyung et A. M. S. Tremblay, Phys. Rev. L **97**, 046402 (2006).

¹¹ T. Mizusaki et M. Imada, Phys. Rev. B **74**, 014421 (2006).

¹² H. Yokoyama, M. Ogata et Y. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 114706 (2006).

¹³ M. Vekic et S.R. White, Phys. Rev. B **47**, 1160 (1993).