

# L'approche auto-cohérente à deux particules : cuprates dopés en électrons et améliorations de la méthode

par

Chloé Gauvin-Ndiaye

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

FACULTÉ des SCIENCES  
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 8 novembre 2023

Le 8 novembre 2023

*le jury a accepté la thèse de Madame Chloé-Aminata Gauvin-Ndiaye dans sa version finale.*

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay  
Directeur de recherche  
Département de physique

Professeur Patrick Fournier  
Membre interne  
Département de physique

Professeur David Sénéchal  
Président rapporteur  
Département de physique

Professeur Fakher Assaad  
Membre externe  
Universität Würzburg

# Sommaire

Dans les métaux conventionnels comme le cuivre et l'or, le comportement des électrons est bien décrit par les méthodes traditionnelles de la physique du solide, comme la théorie des bandes. Ce n'est pas le cas de certains matériaux, dits *fortement corrélés*, dans lesquels les interactions entre les électrons sont importantes. Ces interactions fortes peuvent mener à plusieurs phénomènes émergents, dont le magnétisme et la supraconductivité.

Le modèle de Hubbard est l'un des modèles les plus utilisés pour l'étude des électrons fortement corrélés. Sa formulation est d'apparence simple : ce hamiltonien est composé d'un terme d'énergie cinétique et d'un terme d'interaction, où seules les interactions entre deux électrons se trouvant sur un même site sont considérées. Malgré le fait qu'il s'agisse de l'une des façons les plus simples d'inclure l'effet des interactions électroniques, le modèle de Hubbard ne possède de solution exacte qu'en une dimension et en dimension infinie.

Cette thèse traite de l'approche auto-cohérente à deux particules (TPSC), une méthode semi-analytique développée pour le modèle de Hubbard en dimension supérieure à 1.

La première partie de cette thèse présente l'application de la TPSC pour l'étude des cuprates dopés en électrons. Ces matériaux sont des supraconducteurs non-conventionnels dans lesquels les interactions électroniques ne peuvent être négligées, d'où l'intérêt d'étudier leurs propriétés théoriquement avec le modèle de Hubbard. Nous discutons d'abord de l'effet du désordre dans les cuprates dopés en électrons. Ensuite, nous appliquons la TPSC à l'étude de la résilience des quasiparticules du liquide de Fermi et de la force des corrélations électroniques près d'un point critique quantique antiferromagnétique.

Dans la seconde partie de cette thèse, nous présentons trois extensions de la TPSC. La première extension consiste en l'étude du modèle d'Emery, un hamiltonien de Hubbard à trois bandes où seul l'un des trois sites est corrélé. Il s'agit d'une première étape ouvrant la voie à l'application de la TPSC au cas multibande non-dégénéré. Les deux autres extensions de la TPSC discutées dans cette thèse sont la TPSC+ et la TPSC+SFM. Ces versions améliorées de la TPSC permettent entre autres d'étendre son régime de validité à basse température pour le modèle de Hubbard bidimensionnel.

# Remerciements

Au cours de mon doctorat, j'ai eu la chance d'être entourée de plusieurs personnes sans qui le travail présenté dans cette thèse n'aurait pas pu être réalisé. Je remercie d'abord les membres de mon comité de suivi, André-Marie Tremblay, David Sénéchal et Patrick Fournier, qui m'ont accompagnée tout au long de ma maîtrise et de mon doctorat. Je vous suis reconnaissante pour toutes les discussions enrichissantes que nous avons eues lors de nos rencontres. Je vous remercie également pour votre lecture de mon mémoire de maîtrise, et maintenant de cette thèse. Je tiens également à remercier le professeur Fakher Assaad d'avoir accepté de lire ma thèse en tant que membre externe du jury.

J'aimerais prendre le temps de remercier davantage mon superviseur André-Marie Tremblay, qui est sans aucun doute l'une des personnes ayant eu l'influence la plus positive dans ma vie d'adulte. Si j'ai pris la décision de faire une maîtrise et un doctorat en physique, c'est parce que je savais qu'en travaillant avec vous, je serais soutenue à 100%. Vous m'avez appris énormément, tant sur le plan humain qu'au niveau de la recherche. Je vous remercie d'avoir cru en moi et de m'avoir fait confiance pendant toutes ces années.

Les projets de recherche que j'ai pu mener à terme au cours de mon passage au doctorat ont été réalisés en collaboration avec plusieurs personnes. J'aimerais ainsi remercier les personnes avec qui j'ai eu la chance de travailler lors de leur stage et/ou de leur maîtrise dans le groupe : Marguerite Setrakian, Pierre-Antoine Graham, Jean-Baptiste Bertrand, Jérôme Leblanc, Sandrine Marin, Nicolas Martin, Camille Lahaie, Marc-Antoine Gauthier et Benjamin Groleau-Paré. Vous m'avez tous et toutes appris énormément de choses grâce à vos questions pertinentes, votre motivation et votre travail méticuleux. Un merci particulier à Nicolas Martin et à Camille Lahaie, avec qui j'ai pu collaborer pendant plus longtemps. Je remercie également les autres membres du groupe Tremblay avec qui j'ai eu l'occasion d'échanger au cours des dernières années : Pierre-Olivier Downey, Nicolas Kowalski, Olivier Gingras, Charles-David Hébert, Shaheen Acheche, Reza Nourafkan, Peter Rosenberg, Abhishek Kumar et Benjamin Bacq-Labreuil.

Mon passage au doctorat n'aurait pas été le même sans la présence de Marie-Eve Boulanger. Je te remercie pour ton soutien, tes réponses à mes questions, ton aide pour la préparation de tellement

de présentations et de courriels. Tu m'inspires énormément et je peux dire sans l'ombre d'un doute que tu as fait de moi une meilleure scientifique. J'espère que nous pourrons collaborer à nouveau dans un futur proche. Dans tous les cas, je suis très heureuse de pouvoir te compter parmi mes amies. J'en profite pour remercier les autres membres du groupe Taillefer qui m'ont accueillis dans leurs bureaux à plusieurs reprises maintenant : Étienne Lefrançois, Lu Chen, Amirreza Ataei, Ashvini Vallipuram et Manel Mezidi.

Je remercie les membres du Comité Diversité en Physique de l'Université de Sherbrooke, et tout particulièrement Sophie Rochette et Sara Turcotte. Je suis fière du travail que nous avons accompli au fil des années et des nombreuses activités que nous avons organisées, même en temps de pandémie. Je vous remercie pour tous les efforts que vous avez faits pour le maintien de ce comité dont la mission est très importante pour moi. Je remercie aussi toutes les personnes qui se sont impliquées de près ou de loin dans l'organisation du concours de vulgarisation scientifique du DiPhUS en 2021 et en 2022. Enfin, j'aimerais remercier Karl Thibault de l'Institut quantique pour son support dans l'organisation des séminaires Horizon du comité Diversité.

À l'automne 2022, j'ai eu l'occasion de faire un stage de quelques mois au Flatiron Institute à New York. Je remercie mes superviseurs Antoine Georges et Olivier Parcollet de m'avoir offert cette opportunité unique grâce à laquelle j'ai pu apprendre énormément, tant du point de vue de la physique que de la programmation. Je remercie également mes collègues du CCQ et du CCA, et tout particulièrement mes colocataires et voisins, qui ont rendu mon expérience new-yorkaise inoubliable.

Merci à Dominik Lessnich, un autre membre de la famille TPSC élargie, à qui je dois beaucoup tant au niveau scientifique qu'au niveau personnel. Je te remercie pour tellement de choses : ton soutien au cours de la dernière année, ta patience infinie, ton aide avec les règles de somme, tes blagues parfois drôles, et bien plus.

Enfin, je n'aurais probablement pas réussi à affronter les hauts et les bas (surtout les bas) de ce doctorat sans le support de ma famille : ma mère Nancy, Ghislain et Lylou. Je vous remercie d'avoir toujours été là pour moi, et même de vous intéresser à ma recherche parfois obscure.

Je remercie en outre les organismes qui ont financé ma recherche doctorale, soit le FRQNT et le CRSNG et le programme de bourses d'études supérieures du Canada Vanier.

# Table des matières

|                                                                               |            |
|-------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Sommaire</b>                                                               | <b>ii</b>  |
| <b>Remerciements</b>                                                          | <b>iii</b> |
| <b>Publications</b>                                                           | <b>xii</b> |
| <b>Introduction</b>                                                           | <b>1</b>   |
| <b>I Modèle de Hubbard et approche auto-cohérente à deux particules</b>       | <b>6</b>   |
| <b>1 Modèle de Hubbard et fonctions de Green</b>                              | <b>7</b>   |
| 1.1 Modèle de Hubbard à une bande . . . . .                                   | 8          |
| 1.2 Fonctions de Green, notation et définitions . . . . .                     | 8          |
| 1.2.1 Fonctions de Green . . . . .                                            | 9          |
| 1.2.2 Représentations de la fonction de Green et poids spectral . . . . .     | 9          |
| 1.2.3 Self-énergie . . . . .                                                  | 11         |
| 1.2.4 Calculs en temps imaginaire et en fréquences de Matsubara . . . . .     | 13         |
| 1.3 Notation . . . . .                                                        | 15         |
| 1.4 Self-énergie dans le modèle de Hubbard . . . . .                          | 16         |
| 1.5 Vertex irréductibles de spin et de charge . . . . .                       | 17         |
| 1.5.1 Règles de somme pour les susceptibilités de charge et de spin . . . . . | 20         |
| 1.6 Conclusion . . . . .                                                      | 21         |
| <b>2 TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande</b>                           | <b>22</b>  |
| 2.1 Introduction à l'approche TPSC . . . . .                                  | 22         |
| 2.2 Description détaillée de la méthode . . . . .                             | 24         |
| 2.2.1 Ansatz et premier niveau d'approximation . . . . .                      | 24         |
| 2.2.2 Règles de somme et auto-cohérence . . . . .                             | 25         |
| 2.2.3 Symétrie particule-trou et ansatz . . . . .                             | 27         |
| 2.2.4 Second niveau d'approximation pour la self-énergie . . . . .            | 32         |

|            |                                                                                                                                    |           |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.3        | Conclusion . . . . .                                                                                                               | 35        |
| <b>II</b>  | <b>TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande et cuprates dopés en électrons</b>                                                   | <b>36</b> |
| <b>3</b>   | <b>Cuprates dopés en électrons</b>                                                                                                 | <b>37</b> |
| 3.1        | Diagramme de phases des cuprates dopés en électrons . . . . .                                                                      | 39        |
| 3.2        | Pseudogap antiferromagnétique . . . . .                                                                                            | 40        |
| 3.2.1      | Signatures expérimentales . . . . .                                                                                                | 40        |
| 3.2.2      | Lien avec le modèle de Hubbard : critère de Vilk . . . . .                                                                         | 41        |
| <b>4</b>   | <b>Effet du désordre dans les cuprates dopés en électrons</b>                                                                      | <b>43</b> |
| 4.1        | Motivation expérimentale : pseudogap antiferromagnétique dans les cuprates dopés en électrons . . . . .                            | 43        |
| 4.2        | Méthodologie : étude du désordre dans le modèle de Hubbard avec la TPSC . . . . .                                                  | 45        |
| 4.3        | Effet du désordre sur $T^*$ et sur le point critique quantique . . . . .                                                           | 49        |
| 4.3.1      | Poids spectral aux points chauds . . . . .                                                                                         | 49        |
| 4.3.2      | Chaleur spécifique . . . . .                                                                                                       | 53        |
| 4.3.3      | Longueur de corrélation . . . . .                                                                                                  | 54        |
| 4.4        | Critère pour $T^*$ en présence de désordre . . . . .                                                                               | 56        |
| 4.5        | Approche phénoménologique pour la fonction de Lindhard avec désordre . . . . .                                                     | 62        |
| 4.6        | Conclusion . . . . .                                                                                                               | 64        |
| <b>5</b>   | <b>Quasiparticules résilientes et forces des corrélations électroniques près d'un point critique quantique antiferromagnétique</b> | <b>65</b> |
| 5.1        | Motivation expérimentale : Mesures d'ARPES dans les cuprates dopés en électrons . . . . .                                          | 65        |
| 5.2        | Modèle et paramètres . . . . .                                                                                                     | 66        |
| 5.3        | Résilience des quasiparticules du liquide de Fermi . . . . .                                                                       | 67        |
| 5.3.1      | Dépendance en angle des propriétés des quasiparticules du liquide de Fermi . . . . .                                               | 67        |
| 5.3.2      | Renormalisation de la masse des quasiparticules . . . . .                                                                          | 73        |
| 5.3.3      | Loi d'échelle pour la dépendance en température de la self-énergie . . . . .                                                       | 75        |
| 5.4        | Force des corrélations électroniques . . . . .                                                                                     | 77        |
| 5.4.1      | Fréquence de coupure . . . . .                                                                                                     | 78        |
| 5.4.2      | Ratio de Kadowaki-Woods spectroscopique . . . . .                                                                                  | 79        |
| 5.5        | Conclusion . . . . .                                                                                                               | 86        |
| <b>III</b> | <b>Extensions de la TPSC</b>                                                                                                       | <b>87</b> |
| <b>6</b>   | <b>Amélioration de l'approche auto-cohérente à deux particules : TPSC+ et TPSC+SFM</b>                                             | <b>88</b> |
| 6.1        | Introduction . . . . .                                                                                                             | 88        |

|          |                                                                                                            |            |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 6.2      | Formulation des méthodes . . . . .                                                                         | 89         |
| 6.2.1    | Formulation de l'approche TPSC+ . . . . .                                                                  | 89         |
| 6.2.2    | Formulation de l'approche TPSC+SFM . . . . .                                                               | 90         |
| 6.2.3    | Justification phénoménologique . . . . .                                                                   | 91         |
| 6.3      | Théorème de Mermin-Wagner . . . . .                                                                        | 92         |
| 6.4      | Validité dans le régime classique renormalisé . . . . .                                                    | 94         |
| 6.4.1    | Régime classique renormalisé . . . . .                                                                     | 94         |
| 6.4.2    | Vertex de spin et double occupation dans le régime classique renormalisé :<br>cas $t' = t'' = 0$ . . . . . | 96         |
| 6.4.3    | Critère de Stoner renormalisé . . . . .                                                                    | 101        |
| 6.5      | Cohérence entre quantités à une et deux particules . . . . .                                               | 104        |
| 6.6      | Pseudogap dans le modèle de Hubbard . . . . .                                                              | 105        |
| 6.7      | Règle de somme $f$ . . . . .                                                                               | 108        |
| 6.8      | Lois de conservation . . . . .                                                                             | 114        |
| 6.9      | Comparaison à la théorie des perturbations au second ordre . . . . .                                       | 117        |
| 6.10     | Conclusion . . . . .                                                                                       | 119        |
| <b>7</b> | <b>Étude du modèle d'Emery par l'approche TPSC+DMFT</b> . . . . .                                          | <b>120</b> |
| 7.1      | Motivation : Modèle d'Emery et application aux cuprates . . . . .                                          | 121        |
| 7.1.1    | Hamiltonien . . . . .                                                                                      | 121        |
| 7.1.2    | Application aux cuprates et motivation . . . . .                                                           | 122        |
| 7.2      | Approche des dérivées fonctionnelles pour un modèle de Hubbard multi-orbital simple . . . . .              | 123        |
| 7.2.1    | Équations du mouvement des opérateurs de création et d'annihilation . . . . .                              | 124        |
| 7.2.2    | Équations du mouvement pour la fonction de Green . . . . .                                                 | 125        |
| 7.2.3    | Susceptibilités et vertex . . . . .                                                                        | 127        |
| 7.2.4    | Application au modèle d'Emery . . . . .                                                                    | 128        |
| 7.2.5    | Modèle à une bande effectif . . . . .                                                                      | 129        |
| 7.3      | TPSC pour le modèle d'Emery . . . . .                                                                      | 130        |
| 7.3.1    | Premier niveau d'approximation pour la self-énergie . . . . .                                              | 130        |
| 7.3.2    | Problématiques : potentiel chimique et densités . . . . .                                                  | 133        |
| 7.3.3    | Approche TPSC+DMFT . . . . .                                                                               | 135        |
| 7.4      | Résultats . . . . .                                                                                        | 136        |
| 7.4.1    | Densités avec et sans interactions . . . . .                                                               | 137        |
| 7.4.2    | Double occupation et vertex de spin . . . . .                                                              | 137        |
| 7.4.3    | Self-Énergie . . . . .                                                                                     | 139        |
| 7.5      | Conclusion . . . . .                                                                                       | 146        |
|          | <b>Conclusion</b> . . . . .                                                                                | <b>146</b> |



*Table des matières*

viii

**Bibliographie**

**148**

# Liste des tableaux

|     |                                                                                     |     |
|-----|-------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 5.1 | Correction à la masse effective . . . . .                                           | 74  |
| 5.2 | Exposant de la dépendance en température de la partie imaginaire de la self-énergie | 78  |
| 7.1 | Paramètres du hamiltonien sans interaction du modèle d'Emery. . . . .               | 121 |
| 7.2 | Types de calculs TPSC pour le modèle d'Emery. . . . .                               | 139 |

# Table des figures

|     |                                                                                                              |    |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.1 | Ansatz TPSC et symétrie particule-trou . . . . .                                                             | 29 |
| 2.2 | Ansatz TPSC et valeur maximale de la susceptibilité de spin . . . . .                                        | 30 |
| 2.3 | Ansatz TPSC et self-énergie locale . . . . .                                                                 | 31 |
| 3.1 | Structures cristallines de cuprates dopés en trous . . . . .                                                 | 38 |
| 3.2 | Structure cristalline d'un cuprate dopé en électrons . . . . .                                               | 39 |
| 3.3 | Schéma du diagramme de phases d'un cuprate dopé en électrons . . . . .                                       | 40 |
| 3.4 | Schéma des points chauds sur la surface de Fermi . . . . .                                                   | 41 |
| 3.5 | Schéma du diagramme de phase pour le modèle de Hubbard en 2D . . . . .                                       | 42 |
| 4.1 | Poids spectral pour un modèle représentant le cuprate dopé en électrons NCCO . . .                           | 51 |
| 4.2 | Température du pseudogap antiferromagnétique avec et sans désordre . . . . .                                 | 52 |
| 4.3 | Longueur de corrélation de spins en fonction du niveau de désordre et du dopage .                            | 52 |
| 4.4 | Effet du désordre sur les fluctuations de spins . . . . .                                                    | 56 |
| 4.5 | Ratio de la longueur de corrélation de spin et de la longueur d'onde thermique de<br>de Broglie . . . . .    | 57 |
| 4.6 | Valeur du critère de Vilk modifié par le désordre . . . . .                                                  | 61 |
| 5.1 | Poids spectral au niveau de Fermi en fonction du dopage . . . . .                                            | 67 |
| 5.2 | Lissages de type liquide de Fermi pour la partie réelle de la self-énergie . . . . .                         | 69 |
| 5.3 | Lissages de type liquide de Fermi de la partie imaginaire de la self-énergie . . . . .                       | 70 |
| 5.4 | Paramètres du liquide de Fermi en fonction de l'angle sur la surface de Fermi . . . .                        | 72 |
| 5.5 | Correction à la masse effective . . . . .                                                                    | 74 |
| 5.6 | Lissages pour l'obtention de la dépendance en température de la self-énergie . . . .                         | 76 |
| 5.7 | Fréquence de coupure pour le liquide de Fermi . . . . .                                                      | 79 |
| 5.8 | Ratio de Kadowaki-Woods spectroscopique . . . . .                                                            | 80 |
| 5.9 | Ratio pour la force des interactions reliant la fréquence de coupure au poids de<br>quasiparticule . . . . . | 86 |
| 6.1 | Fonction de Lindhard et susceptibilité partiellement habillée . . . . .                                      | 98 |

|      |                                                                                                            |     |
|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.2  | Vertex de spin irréductible obtenu par TPSC, TPSC+ et TPSC+SFM . . . . .                                   | 102 |
| 6.3  | Double occupation obtenue par TPSC, TPSC+ et TPSC+SFM . . . . .                                            | 102 |
| 6.4  | Traces du produit de la self-énergie et de la fonction de Green pour l'approche<br>TPSC+SFM . . . . .      | 105 |
| 6.5  | Self-énergie et pseudogap par TPSC, TPSC+ et TPSC+SFM . . . . .                                            | 107 |
| 6.6  | Dérivée de la susceptibilité de spin par rapport au temps imaginaire. . . . .                              | 112 |
| 6.7  | Violation de la règle de somme f par TPSC, TPSC+ et TPSC+SFM . . . . .                                     | 113 |
| 6.8  | Violation de la règle de somme f par TPSC+ au vecteur d'onde antiferromagnétique                           | 114 |
| 6.9  | Violation des lois de conservation par TPSC+ . . . . .                                                     | 117 |
| 6.10 | Comparaison de la self-énergie obtenue par théorie des perturbations et TPSC. . . .                        | 118 |
| 6.11 | Comparaison de la self-énergie obtenue par théorie des perturbations et DiagMC. .                          | 119 |
| 7.1  | Modèle d'Emery . . . . .                                                                                   | 122 |
| 7.2  | Densités orbitales par DMFT sur un site pour le modèle d'Emery . . . . .                                   | 138 |
| 7.3  | Double occupation et vertex de spin pour le modèle d'Emery . . . . .                                       | 140 |
| 7.4  | Self-énergie à l'antinoeud pour le modèle d'Emery . . . . .                                                | 141 |
| 7.5  | Anisotropie de la self-énergie au noeud et à l'antinoeud pour le modèle d'Emery . .                        | 142 |
| 7.6  | Déviaton entre la self-énergie au noeud et à l'antinoeud par rapport à la self-énergie<br>locale . . . . . | 143 |
| 7.7  | Partie locale de la self-énergie et substitution DMFT . . . . .                                            | 145 |

# Publications

Les travaux réalisés au cours de mon doctorat ont mené aux publications suivantes :

## Articles faisant l'objet de chapitres dans cette thèse

1. **C. Gauvin-Ndiaye**, M. Setrakian et A.-M. S. Tremblay. *Resilient Fermi liquid and strength of correlations near an antiferromagnetic quantum critical point*. Phys. Rev. Lett. 128, 087001 (2022). [1]

Le projet ayant mené à cet article est présenté en détail au chapitre 5 de cette thèse. J'ai débuté ce projet en collaboration avec Marguerite Setrakian, qui était alors stagiaire dans le groupe. J'ai supervisé son stage, puis j'ai complété les calculs et l'analyse des résultats. J'ai rédigé l'article avec André-Marie Tremblay, avec les commentaires de Marguerite Setrakian.

2. **C. Gauvin-Ndiaye**, P.-A. Graham et A.-M. S. Tremblay. *Disorder effects on hot spots in electron-doped cuprates*. Phys. Rev. B 105, 235133 (2022). [2]

Le projet ayant mené à cet article est présenté en détail au chapitre 4 de cette thèse. J'ai débuté ce projet en collaboration avec Pierre-Antoine Graham, qui était alors stagiaire dans le groupe. J'ai supervisé son stage, j'ai rédigé les programmes, j'ai développé la méthode théorique, puis j'ai complété les calculs et l'analyse des résultats. J'ai rédigé l'article avec André-Marie Tremblay, avec les commentaires de Pierre-Antoine Graham.

3. **C. Gauvin-Ndiaye**, C. Lahaie, Y. Vilk et A.-M. S. Tremblay. *An improved two-particle self-consistent approach*. Phys. Rev. B 108, 075144 (2023). [3]

Le projet ayant mené à cet article est présenté en détail au chapitre 6 de cette thèse. Ce projet a été fait en collaboration avec Camille Lahaie, qui a d'abord été stagiaire dans le groupe puis étudiante à la maîtrise. L'idée de base de ce projet provient de Yury Vilk. J'ai réalisé la partie analytique du projet, tandis que Camille Lahaie a réalisé l'étalonnage de l'approche. J'ai supervisé le stage de Camille Lahaie. Nous avons toutes les deux contribué à l'analyse des résultats. L'article a été rédigé

par Camille Lahaie, André-Marie Tremblay et moi, avec les commentaires et suggestions de Yury Vilk.

4. **C. Gauvin-Ndiaye**, J. Leblanc, S. Marin, N. Martin et A.-M. S. Tremblay. *The TPSC approach for multiorbital models : application to the Emery model*. arXiv :2308.14091 (2023). [4]

Le projet ayant mené à cet article est présenté en détail au chapitre 7 de cette thèse. J'ai débuté ce projet avec Jérôme Leblanc lors de son premier stage dans le groupe. Le projet a ensuite été poursuivi par Sandrine Marin, elle aussi stagiaire dans le groupe. Jérôme Leblanc a débuté le projet (partie TPSC) et a identifié des problématiques avec les hypothèses de départ. Sandrine Marin s'est penchée sur la partie DMFT du projet avec l'aide de Nicolas Martin. J'ai supervisé les stages, j'ai développé la méthode théorique et la version finale du code, et j'ai obtenu les résultats présentés dans l'article. L'article en préparation est rédigé par Jérôme Leblanc, Nicolas Martin, André-Marie Tremblay et moi.

## Autres articles

5. N. Martin, **C. Gauvin-Ndiaye** et A.-M. S. Tremblay. *Nonlocal corrections to dynamical mean-field theory from the two-particle self-consistent method*. Phys. Rev. B 107, 075158 (2023). [5]

Le projet ayant mené à cet article a été réalisé par Nicolas Martin, d'abord lors d'un stage dans le groupe puis pendant sa maîtrise. Nicolas Martin a développé la méthode, a rédigé les programmes, et a obtenu les résultats présentés dans l'article. J'ai supervisé son stage et j'ai participé à l'analyse des résultats. L'article a été rédigé en majeure partie par Nicolas Martin et André-Marie Tremblay. J'ai rédigé l'introduction et j'ai offert des suggestions pour les autres sections.

6. S.-O. Kaba, B. Groleau-Paré, M.-A. Gauthier, A.-M. S. Tremblay, S. Verret et **C. Gauvin-Ndiaye**. *Prediction of large magnetic moment materials with graph neural networks and random forests*. Phys. Rev. Materials 7, 044407 (2023). [6]

Le projet ayant mené à cet article est le fruit d'une longue collaboration. Les résultats présentés dans l'article ont été obtenus par Sékou-Oumar Kaba, Benjamin Groleau-Paré et Marc-Antoine Gauthier. Simon Verret a offert de la supervision pour Sékou-Oumar Kaba. André-Marie Tremblay et moi avons supervisé les stages de Benjamin Groleau-Paré et de Marc-Antoine Gauthier. Avec l'aide d'André-Marie Tremblay, j'ai rédigé la demande de financement ayant permis de réaliser ce projet. Tous les auteurs ont contribué à la rédaction de l'article.

7. **C. Gauvin-Ndiaye**, J. Tindall, J. Robledo Moreno et Antoine Georges. *Mott Transition and Volume Law Entanglement with Neural Quantum States*. En préparation. [7]

Le projet ayant mené à la rédaction de cet article a été réalisé au cours de mon stage au Flatiron

Institute sous la supervision d'Antoine Georges. Joseph Tindall et moi avons obtenu les résultats présentés dans cet article. J'ai réalisé un programme basé sur le travail de Javier Robledo Moreno. Tous les auteurs participent à la préparation de l'article.

# Introduction

## Le modèle de Hubbard pour les électrons fortement corrélés

---

Le modèle de Hubbard a été proposé en 1963 simultanément par Kanamori [8], Gutzwiller [9] et Hubbard [10–12]. Il s’agit de l’un des plus simples modèles permettant la description de fermions en interaction. Dans ce modèle, les fermions peuvent se déplacer d’un site à l’autre dans un réseau avec une amplitude de saut qui dépend de la distance entre les sites concernés. Les interactions entre les électrons sont locales : deux électrons de spins opposés se trouvant sur un même site se repoussent, mais n’interagissent pas s’ils se trouvent sur deux sites différents. Le modèle de Hubbard est une simplification drastique de la réalité physique, puisque l’on ne considère qu’une seule orbitale et des interactions purement locales. Malgré sa simplicité apparente, le modèle de Hubbard est devenu central à l’étude des électrons fortement corrélés, tel que revu dans les références [13–17].

La découverte de la supraconductivité à haute température critique dans les cuprates s’est produite une vingtaine d’années après l’introduction du modèle de Hubbard [18]. Rapidement, le modèle de Hubbard a été considéré comme le modèle minimal permettant la description théorique de ces matériaux aux propriétés non-conventionnelles [19]. Plus précisément, il est très courant de modéliser les cuprates avec le modèle de Hubbard en deux dimensions sur un réseau carré. Cette réalisation particulière du modèle de Hubbard a fait l’objet d’études extensives. Entre autres, l’existence du pseudogap dans les régimes d’interaction faible [20–22] et forte [14, 20, 23–31] a été montrée par une vaste gamme de méthodes numériques. L’une des définitions du pseudogap est la perte de poids spectral à certains endroits sur la surface de Fermi. L’un des plus récents débats entourant le modèle de Hubbard sur le réseau carré concerne la présence ou non de la supraconductivité dans son diagramme de phase. L’utilisation combinée de plusieurs méthodes numériques à l’état de l’art a permis de conclure que, bien que le modèle de Hubbard "pur" ne contenant que des sauts aux premiers voisins ne présente pas de phase supraconductrice à l’état fondamental [32], la supraconductivité est bel et bien présente dans le modèle admettant des sauts aux seconds voisins [33].



L'applicabilité du modèle de Hubbard à l'étude de matériaux quantiques ne se limite pas aux seuls cuprates. Ce modèle permet entre autres de décrire la transition de Mott, une transition entre un état métallique et un état isolant due aux interactions entre les électrons. La description traditionnelle du comportement des électrons dans les solides est celle de la théorie des bandes, qui différencie de façon simple un métal d'un isolant. Suivant cette théorie, nous considérons deux bandes près du niveau de Fermi, soit la bande de valence et la bande de conduction. Dans un isolant, les états de la bande de valence sont complètement occupés, et ceux de la bande de conduction sont vacants. Les deux bandes sont séparées par une zone d'énergie interdite appelée le gap. Dans un métal, les états de la bande de valence ne sont pas entièrement occupés. Plusieurs matériaux, dont de nombreux oxydes de métaux de transition, sont prédits comme étant des métaux par la théorie des bandes alors que les observations expérimentales confirment qu'ils sont plutôt des isolants [34]. La théorie des isolants de Mott a permis de comprendre que les interactions électroniques mènent à cet état isolant [35–38]. La transition de Mott est un phénomène qu'il est possible d'étudier grâce au modèle de Hubbard : en augmentant graduellement la force de l'interaction locale entre les électrons, le système passe d'un état métallique à un état isolant sans que le nombre d'électrons dans le système où la relation de dispersion ne doivent être modifiés [39].

Le modèle de Hubbard a été utilisé pour modéliser l'effet des corrélations dans d'autres types de réseaux, comme le réseau triangulaire [40–44]. Le réseau triangulaire est considéré comme le modèle minimal pour l'étude des supraconducteurs organiques de la famille des BEDT. Comme pour les cuprates, la transition de Mott, la supraconductivité non-conventionnelle et le magnétisme sont des concepts clés dans l'étude des supraconducteurs organiques, nécessitant d'inclure les interactions électroniques dans la modélisation théorique. Les réseaux en nid d'abeille associé au graphène [45–52], et Kagomé [40, 53–55], le réseau commun à plusieurs candidats à la phase liquide de spins, ont également été étudiés avec le modèle de Hubbard. Ces travaux mettent en lumière, entre autres, l'effet réciproque des interactions électroniques, de la frustration magnétique et des propriétés topologiques.

Le riche diagramme de phase du modèle de Hubbard et son lien avec plusieurs matériaux réels ont motivé son étude par de nombreux groupes théoriques, mais ces travaux sont limités par un défi intrinsèque au modèle. Malgré son apparente simplicité, le modèle de Hubbard est très difficile à résoudre. Une solution analytique a été fournie pour le modèle de Hubbard en une dimension en 1968 [56], soit seulement quelques années après son introduction. En dimensions supérieures, une telle solution n'existe pas, et il est alors nécessaire de se tourner vers des méthodes numériques pour la résolution du modèle. Une première façon de résoudre le modèle de Hubbard est de simplement diagonaliser le hamiltonien afin d'obtenir ses états et énergies propres. Cette technique est toutefois limitée par la taille de l'espace de Hilbert. En effet, chaque site du réseau admet quatre états distincts : l'état sans particule  $|0\rangle$ , les états avec une particule de spin *up*  $|\uparrow\rangle$  ou *down*  $|\downarrow\rangle$ , et l'état doublement occupé  $|\uparrow\downarrow\rangle$ . Si  $N$  est le nombre de sites dans un réseau, l'espace de Hilbert associé au modèle de

Hubbard comporte donc  $4^N$  états de base. Cet espace devient rapidement trop grand pour admettre la résolution du modèle de Hubbard sur un grand réseau par diagonalisation du hamiltonien. C'est dans ce contexte que sont nées plusieurs méthodes approximatives visant la résolution du modèle de Hubbard.

La théorie du champ moyen dynamique (DMFT, de l'anglais *dynamical mean-field theory*) a été développée au début des années 1990 [57–60]. L'approximation principale de la DMFT est que la self-énergie, un objet mathématique qui distingue un système avec interaction de sa réciproque sans interaction, est purement locale : elle est une quantité dynamique qui dépend de la fréquence ou du temps, mais elle ne dépend pas de la quantité de mouvement. Cette approximation est valide en dimensions élevées, et offre même une solution exacte dans la limite de dimension infinie [57]. Or, l'approximation locale n'est pas toujours appropriée pour l'étude du modèle de Hubbard en deux dimensions, surtout dans le régime d'interaction faible où les fluctuations magnétiques à grande longueur d'onde sont importantes. De nouvelles méthodes basées sur la DMFT ont été introduites afin de remédier à cette limitation de l'approche : les extensions sur amas [23,61–63] et les extensions diagrammatiques [64]. Ces extensions permettent de retrouver une certaine dépendance en quantité de mouvement dans les observables comme le poids spectral, ce qui est nécessaire pour observer, entre autres, le pseudogap.

Un autre paradigme numérique englobe les méthodes de Monte Carlo quantique [65–69]. Dans ces méthodes, la fonction de partition est calculée par une intégration stochastique. Les résultats obtenus par les approches Monte Carlo peuvent être considérés comme étant exacts dans la limite de la précision statistique. Ces approches sont toutefois limitées par le problème de signe dans le cas des calculs fermioniques, ce qui limite le nombre de modèles et de régimes de paramètres pour lesquels les calculs peuvent être réalisés de façon efficace [70].

En plus de la DMFT, un très grand nombre d'approches numériques approximatives pour le modèle de Hubbard ont été développées au cours des années. L'une d'elles est l'approche auto-cohérente à deux particules [71–74] (TPSC, de l'anglais *two-particle self-consistent approach*), que nous aborderons extensivement dans cette thèse. L'un des progrès des dernières années a été de comparer les résultats obtenus par plusieurs approches approximatives, incluant la DMFT et ses extensions, aux résultats obtenus par des méthodes de Monte Carlo quantique dans des projets d'étalonnage de grande envergure [22,75]. Ces travaux ont permis d'arriver à des consensus concernant le modèle de Hubbard en deux dimensions, par exemple par rapport au rôle des fluctuations de spin dans le régime d'interaction faible du modèle [22]. Enfin, ils permettent d'évaluer le degré de validité des différentes approximations, et facilitent également le développement de nouvelles approches.

L'étude du modèle de Hubbard ne se limite pas aux calculs numériques. Depuis le début des années 2000, le modèle de Hubbard est également simulé expérimentalement sur des gaz de Fermi dans des réseaux optiques (atomes froids) [76–78]. Différents aspects du diagramme de phase

ont été observés, notamment les fluctuations antiferromagnétiques [79, 80], l'antiferroaimant à longue portée [81], et l'isolant de Mott [82, 83]. De plus, la résistivité a été mesurée dans un système d'atomes froids modélisant le modèle de Hubbard sur un réseau carré [84]. Ces mesures ont observé le comportement de mauvais métal à haute température, où la résistivité est linéaire en température plutôt que de saturer à une valeur constante.

Malgré la pertinence du modèle de Hubbard pour l'étude de plusieurs matériaux, une description plus réaliste de nombreux systèmes est faite par des hamiltoniens multi-orbitaux. C'est le cas des cuprates, entre autres, dont la physique est mieux représentée par le modèle d'Emery [85, 86]. Le modèle de Hubbard-Kanamori, qui comporte des interactions multi-orbitales comme le couplage de Hund, est plus adapté à la description de systèmes comme le ruthénate de strontium et les iridates que le modèle de Hubbard [8, 87, 88]. D'autres supraconducteurs non-conventionnels, comme les nickelates [89] et les supraconducteurs à base de fer [90, 91] sont également mieux décrits par des modèles multi-orbitaux que par un modèle à une seule bande. Si le modèle de Hubbard représente un défi numérique, le cas des modèles multi-orbitaux peut rapidement devenir encore plus complexe à aborder en raison de leur nombre de degrés de liberté important.

## Plan de la thèse

---

La quantité et la variété d'études portant sur le modèle de Hubbard ne signifie pas que tous les problèmes l'entourant sont déjà résolus. Dans cette thèse, nous nous intéressons ainsi à la résolution du modèle de Hubbard par l'approche auto-cohérente à deux particules (TPSC). La TPSC, que nous décrirons plus en détail dans un chapitre suivant, est une approche numériquement efficace et sans paramètre ajustable. Le régime de validité de l'approche est bien délimité, ce qui nous permet tant de l'utiliser afin d'étudier des phénomènes physiques particuliers que de nous fixer des buts clairs par rapport à son amélioration. Le travail réalisé dans cette thèse couvre ces deux volets, comme nous le décrivons au paragraphe suivant.

Cette thèse est divisée en trois parties. Dans la première partie, nous introduisons d'abord le modèle de Hubbard de façon plus rigoureuse et présentons certaines notions méthodologiques du problème à N-corps au chapitre 1. Au chapitre 2, nous présentons le formalisme de la TPSC. La seconde partie concerne l'application de la TPSC à l'étude des cuprates dopés en électrons. Nous présentons au chapitre 3 certains aspects expérimentaux des cuprates dopés en électrons afin de mettre en contexte les projets présentés par la suite. Au chapitres 4 et 5, nous présentons les résultats de deux projets distincts. Le premier projet concerne l'étude de l'effet du désordre dans le modèle de Hubbard et son application aux cuprates dopés en électrons. Le second projet se centre autour de l'étude de la résilience des quasiparticules du liquide de Fermi dans certaines régions de la surface de Fermi et sur la mesure de la force des corrélations électroniques. La troisième et dernière partie

de la thèse porte sur des extensions de l'approche TPSC. Nous discutons des nouvelles approches TPSC+ et TPSC+SFM au chapitre 6. Enfin, au chapitre 7, nous nous intéressons à la formulation de la TPSC pour le modèle d'Emery, un hamiltonien multi-orbital développé spécifiquement pour l'étude des cuprates.

## **Première partie**

# **Modèle de Hubbard et approche auto-cohérente à deux particules**

## Chapitre 1

# Modèle de Hubbard et fonctions de Green

Les résultats de cette thèse présentés aux chapitres 4, 5 et 6 sont obtenus pour le modèle de Hubbard à une bande [8–12], que nous avons déjà introduit au chapitre précédent. Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux aspects plus méthodologiques du modèle de Hubbard. Nous introduisons le hamiltonien à la section 1.1. Ensuite, à la section 1.2, nous présentons les concepts de fonction de Green, de poids spectral et de self-énergie. Nous résumons des éléments de notation à la section 1.3. Finalement, aux sections 1.4 et 1.5, nous utilisons le formalisme des dérivées fonctionnelles pour obtenir des équations exactes pour la self-énergie et les vertex irréductibles dans le modèle de Hubbard.

Nous considérons également dans cette thèse le modèle d’Emery, aussi appelé "modèle de Hubbard à trois bandes" [85, 86]. Les détails de ce modèle, comme son hamiltonien et son lien avec les cuprates, ne seront présentés qu’au chapitre 7.

Tout au long de cette thèse, nous travaillons dans des unités où les constantes de Boltzmann et de Planck sont égales à l’unité :  $\hbar = k_B = 1$ .

## 1.1 Modèle de Hubbard à une bande

---

Dans cette thèse, nous étudions le modèle de Hubbard en dimension égale ou supérieure à 2 ( $d \geq 2$ ). Le hamiltonien d'intérêt est

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1.1)$$

où  $c_{\mathbf{k}\sigma}^{(\dagger)}$  annihile (crée) un électron de spin  $\sigma$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ ,  $n_{i\sigma}$  compte le nombre d'électrons de spin  $\sigma$  au site  $i$ ,  $U$  est la valeur de l'interaction répulsive sur un site, et  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  est la relation de dispersion du modèle sans interaction pour un vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ . La relation de dispersion  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  est alors définie par

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}, \quad (1.2)$$

où  $t_{ij}$  est l'amplitude de saut entre les sites  $i$  et  $j$ .

Dans le cas du modèle de Hubbard en deux dimensions sur le réseau carré, nous utilisons la convention suivante pour les paramètres de saut :  $t$  est l'amplitude de saut aux premiers voisins,  $t'$  aux seconds voisins, et  $t''$  aux troisièmes voisins. La relation de dispersion pour ce modèle est

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a) - 2t''(\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)), \quad (1.3)$$

où  $a$  est le pas du réseau. De façon générale, nous poserons le pas du réseau égal à l'unité :  $a = 1$ .

## 1.2 Fonctions de Green, notation et définitions

---

Tel que mentionné dans l'introduction de cette thèse, le modèle de Hubbard n'admet de solution exacte qu'en une dimension et en dimension infinie. Nous avons recours à une approche approximative pour la résolution du modèle. Cette approche est basée sur le formalisme des fonctions de Green plutôt que de la fonction d'onde. La fonction de Green permet de calculer des observables en l'absence ou en présence d'interaction et nécessite moins de mémoire pour être entreposée numériquement que la fonction d'onde. Dans cette section, nous définissons d'abord la fonction de Green et la self-énergie. Nous discutons ensuite du formalisme de Matsubara pour les calculs à température finie. Les références [92–95] offrent des revues plus détaillées de la fonction de Green et de son utilisation dans le cadre du problème à plusieurs corps.

### 1.2.1 Fonctions de Green

Nous nous intéressons dans cette thèse à la fonction de Green à une particule en présence d'interactions. Cette fonction de Green est définie, dans l'espace réel et en fonction du temps, par

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \left\langle \{c_{\mathbf{r}\sigma}(t), c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger}(t')\} \right\rangle \theta(t - t'), \quad (1.4)$$

où  $t$  et  $t'$  sont des indices de temps, et  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$  d'espace. Le symbole  $\langle . \rangle$  correspond à une moyenne thermodynamique, et le symbole  $\{A, B\}$  représente l'anticommutateur des opérateurs  $A$  et  $B$ . L'exposant  $R$  est utilisé afin de spécifier qu'il s'agit de la fonction de Green retardée, ou causale. Enfin, la fonction  $\theta(t - t')$  est la fonction de Heaviside.

Dans la représentation de Heisenberg, la dépendance temporelle des opérateurs est

$$c_{\mathbf{r}\sigma}(t) = e^{iHt} c_{\mathbf{r}\sigma} e^{-iHt}, \quad (1.5)$$

et

$$c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger}(t) = e^{iHt} c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} e^{-iHt}. \quad (1.6)$$

Nous nous intéressons à des cas invariants sous translation dans le temps. Par conséquent, seule la différence de temps  $t - t'$  importe. Nous considérons ainsi la fonction de Green sous la forme

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -i \left\langle \{c_{\mathbf{r}\sigma}(t), c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger}(0)\} \right\rangle \theta(t). \quad (1.7)$$

### 1.2.2 Représentations de la fonction de Green et poids spectral

Dans cette section, nous nous intéressons à des représentations particulières de la fonction de Green qui nous permettront de définir le poids spectral. Nous débutons avec la définition d'une base qui diagonalise le hamiltonien et dont les états sont notés  $|m\rangle$

$$(H - \mu N)|m\rangle \equiv E_m|m\rangle, \quad (1.8)$$

$$e^{-i(H-\mu N)t}|m\rangle = e^{-iE_m t}. \quad (1.9)$$

Dans ce qui précède,  $\mu$  est le potentiel chimique et  $N = \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}$  l'opérateur qui compte le nombre total de particules dans le système. Nous explicitons maintenant la moyenne dans l'ensemble grand canonique en écrivant la trace sur les états propres du hamiltonien, avec  $\beta = 1/T$  la température inverse

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -\frac{i}{Z} \sum_m e^{-\beta E_m} \langle m | \{c_{\mathbf{r}\sigma}(t), c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger}(0)\} | m \rangle \theta(t). \quad (1.10)$$



Cette équation est évaluée en développant l'anticommutateur. Nous évaluons également les opérateurs d'évolution dans le temps en insérant la relation de fermeture entre les opérateurs de création et d'annihilation

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -\frac{i}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} \left[ e^{i(E_m - E_{m'})t} \langle m | c_{\mathbf{r}\sigma} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m \rangle + e^{i(E_{m'} - E_m)t} \langle m | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}\sigma} | m \rangle \right] \theta(t). \quad (1.11)$$

Finalement, la dernière étape de ce développement est de faire la transformée de Fourier afin d'obtenir la fonction de Green en fonction de la fréquence  $\omega$ . Nous obtenons

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{i}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} \left[ \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega + i\eta)t} e^{i(E_m - E_{m'})t} \langle m | c_{\mathbf{r}\sigma} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m \rangle + \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega + i\eta)t} e^{i(E_{m'} - E_m)t} \langle m | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}\sigma} | m \rangle \right], \quad (1.12)$$

$$\Rightarrow G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} \left[ \frac{\langle m | c_{\mathbf{r}\sigma} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m \rangle}{\omega + i\eta + E_m - E_{m'}} + \frac{\langle m | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}\sigma} | m \rangle}{\omega + i\eta - E_m + E_{m'}} \right]. \quad (1.13)$$

L'équation obtenue ci-haut est appelée la représentation de Lehmann de la fonction de Green. Sous cette représentation, nous pouvons voir que la fonction de Green contient des informations sur les états excités d'un système. Dans la transformée de Fourier, l'exponentielle  $e^{-\eta t}$  est introduite afin de préserver la causalité de la fonction de Green

Afin de définir le poids spectral, nous réécrivons la fonction de Green dans la représentation de Lehmann en y insérant une intégrale sur une fréquence  $\omega'$  et des deltas de Dirac, grâce à l'identité :  $f(\omega) = \int d\omega' f(\omega') \delta(\omega' - \omega)$ .

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} \frac{1}{\omega + i\eta - \omega'} \left[ \langle m | c_{\mathbf{r}\sigma} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m \rangle 2\pi \delta(\omega' + E_m - E_{m'}) + \langle m | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}\sigma} | m \rangle 2\pi \delta(\omega' + E_{m'} - E_m) \right]. \quad (1.14)$$

L'équation obtenue ci-haut nous mène à la définition du poids spectral  $A_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$

$$A_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \equiv \frac{1}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} \left[ \langle m | c_{\mathbf{r}\sigma} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m \rangle 2\pi \delta(\omega' + E_m - E_{m'}) + \langle m | c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger} | m' \rangle \langle m' | c_{\mathbf{r}\sigma} | m \rangle 2\pi \delta(\omega' + E_{m'} - E_m) \right]. \quad (1.15)$$

Nous retournons maintenant à l'équation 1.14. La définition du poids spectral, jumelée à l'équation 1.14, nous mène à l'obtention d'une seconde représentation de la fonction de Green, soit la

représentation spectrale

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega')}{\omega + i\eta - \omega'}. \quad (1.16)$$

L'équation précédente peut nous donner une seconde définition plus succincte du poids spectral. Pour y arriver, nous utilisons l'équation de Sokhatsky-Weierstrass

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega + i\eta} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{\omega} \right) - i\pi\delta(\omega). \quad (1.17)$$

En substituant l'équation de Sokhatsky-Weierstrass dans la représentation spectrale de la fonction de Green, nous obtenons une équation qui relie directement le poids spectral à la partie imaginaire de la fonction de Green

$$A_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -2\text{Im}G_{\sigma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega). \quad (1.18)$$

Le poids spectral est un objet physique particulièrement intéressant : il peut être mesuré expérimentalement par la photoémission résolue en angle (ARPES, de l'anglais *angle-resolved photoemission spectroscopy*). En ARPES, la quantité mesurée est plus spécifiquement le produit du poids spectral et de la distribution de Fermi-Dirac :  $f(\omega)A(\mathbf{k}, \omega)$ .

### 1.2.3 Self-énergie

Considérons la limite non-interagissante du modèle de Hubbard. Le hamiltonien est alors diagonal dans la base des quantités de mouvement

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (1.19)$$

La fonction de Green est elle aussi diagonale dans cette base. En effet, la dépendance en temps de l'opérateur d'annihilation est

$$-i \frac{\partial c_{\mathbf{k}\sigma}(t)}{\partial t} = [H - \mu N, c_{\mathbf{k}\sigma}] = -(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}(t) \quad (1.20)$$

$$\Rightarrow c_{\mathbf{k}\sigma}(t) = e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)t} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (1.21)$$

À partir de cette dernière équation, nous calculons la fonction de Green dans l'espace des quantités de mouvement

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}^{R,0}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t) &= -i \left\langle \{c_{\mathbf{k}\sigma}(t), c_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger}(0)\} \right\rangle \theta(t), \\
 &= -ie^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)t} \left\langle \{c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger}\} \right\rangle \theta(t), \\
 &= -ie^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)t} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \theta(t).
 \end{aligned} \tag{1.22}$$

L'exposant 0 est utilisé afin de préciser que cette fonction de Green est calculée pour le hamiltonien sans interaction. Nous calculons maintenant sa transformée de Fourier pour obtenir la fonction de Green qui dépend de la fréquence

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}^{R,0}(\mathbf{k}, \omega) &= -i \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega + i\eta)t} e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)t}, \\
 &= \frac{1}{\omega + i\eta - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu}.
 \end{aligned} \tag{1.23}$$

Nous pouvons alors calculer le poids spectral directement par l'équation 1.18 et la relation de Sokhatsky-Weierstrass (équation 1.17)

$$A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu). \tag{1.24}$$

Dans le cas avec des interactions, nous ne pouvons pas obtenir de solution si simplement puisque nous ne connaissons pas la base des états qui diagonalisent le hamiltonien. Nous introduisons ainsi la self-énergie, notée  $\Sigma_{\sigma}$ . Cet objet mathématique relie la fonction de Green sans interaction  $G^{R,0}$  à la fonction de Green avec interaction  $G^R$  par le biais de l'équation de Dyson

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{k}, \omega)^{-1} = G_{\sigma}^{R,0}(\mathbf{k}, \omega)^{-1} - \Sigma_{\sigma}^R(\mathbf{k}, \omega). \tag{1.25}$$

En pratique, différentes méthodes de résolution du modèle de Hubbard nous permettent d'obtenir la self-énergie, et donc la fonction de Green avec interactions, à différents niveaux d'approximation. Il est entre autres possible de calculer cette self-énergie en théorie des perturbations. Tel que mentionné plus tôt, la théorie du champ moyen dynamique (DMFT) est une autre façon d'obtenir la self-énergie, cette fois en faisant l'approximation qu'elle est purement locale [57–60].

Nous considérons maintenant une image intuitive de la self-énergie [93]. Comme nous l'avons vu à l'équation 1.24, le poids spectral en l'absence d'interaction est un delta de Dirac centré à l'énergie propre  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  (par rapport au potentiel chimique  $\mu$ ). Une particule dans un état de quantité de mouvement  $\mathbf{k}$  demeure dans cet état; autrement dit, son temps de vie est infini. En présence d'interactions, nous pouvons nous attendre à un élargissement du pic qui est associé à un temps de

vie fini. Supposons que la self-énergie est une constante de la forme

$$\Sigma_{\sigma}^R(\mathbf{k}, \omega) = \Delta\epsilon_{\mathbf{k}} - i\Gamma_{\mathbf{k}}. \quad (1.26)$$

Dans ce cas, par l'équation de Dyson, la fonction de Green avec interaction et le poids spectral sont

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + i\eta - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Delta\epsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_{\mathbf{k}}}, \quad (1.27)$$

$$A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Delta\epsilon_{\mathbf{k}} + \mu)^2 + \Gamma_{\mathbf{k}}^2}. \quad (1.28)$$

Avec cette approximation simple de la self-énergie, le poids spectral prend la forme d'une lorentzienne centrée autour de l'énergie  $\epsilon_{\mathbf{k}} + \Delta\epsilon_{\mathbf{k}}$  par rapport au potentiel chimique, avec une largeur liée à la partie imaginaire de la self-énergie  $\Gamma_{\mathbf{k}}$ . Ainsi, la partie imaginaire de la self-énergie peut être associée à un temps de vie, tandis que sa partie réelle correspond à un déplacement du pic.

#### 1.2.4 Calculs en temps imaginaire et en fréquences de Matsubara

Jusqu'à présent, nous avons introduit des fonctions de Green existant dans l'espace des positions, des quantités de mouvement, du temps et des fréquences. Les résultats présentés dans cette thèse sont toutefois obtenus dans le formalisme des fréquences de Matsubara et du temps imaginaire. L'intérêt de travailler dans le formalisme de Matsubara est qu'il permet l'obtention de la fonction de Green à température finie de façon plus simple, numériquement, que si nous voulions l'obtenir directement en fréquences réelles. Le temps imaginaire est défini par

$$\tau \equiv it. \quad (1.29)$$

La définition de la fonction de Green en temps imaginaire est

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) \equiv -\langle T_{\tau} c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger}(0) \rangle. \quad (1.30)$$

Dans ce qui précède, l'opérateur  $T_{\tau}$  est l'opérateur d'ordre chronologique. Son action est d'ordonner les opérateurs qui suivent en ordre chronologique, tout en incluant un signe négatif lorsque deux opérateurs fermioniques sont interchangés. Mathématiquement, l'action de l'opérateur dans la fonction de Green est

$$\langle T_{\tau} c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger}(0) \rangle = \langle c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \theta(\tau) - \langle c_{\mathbf{r}'\sigma}^{\dagger}(0) c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau) \rangle \theta(-\tau). \quad (1.31)$$

L'évolution des opérateurs en temps imaginaire est

$$c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau) = e^{(H-\mu N)\tau} c_{\mathbf{r}\sigma} e^{-(H-\mu N)\tau}, \quad (1.32)$$

$$c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger(\tau) = e^{(H-\mu N)\tau} c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger e^{-(H-\mu N)\tau}. \quad (1.33)$$

La fonction de Green en temps imaginaire est antipériodique dans l'intervalle  $[-\beta, \beta]$ , où  $\beta = 1/T$  est l'inverse de la température  $T$ . Nous pouvons montrer cette propriété en développant la moyenne thermodynamique et en utilisant la propriété cyclique de la trace. Commençons par le cas où le temps imaginaire est positif ( $0 < \tau < \beta$ )

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau > 0) &= -\langle c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{r}'\sigma}^\dagger(0) \rangle, \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)} c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{r}'\sigma}^\dagger(0)], \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)} e^{(H-\mu N)\tau} c_{\mathbf{r}\sigma} e^{-(H-\mu N)\tau} c_{\mathbf{r}'\sigma}^\dagger], \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr}[c_{\mathbf{r}'\sigma}^\dagger e^{-\beta(H-\mu N)} e^{(H-\mu N)\tau} c_{\mathbf{r}\sigma} e^{-(H-\mu N)\tau} e^{\beta(H-\mu N)} e^{-\beta(H-\mu N)}], \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta(H-\mu N)} c_{\mathbf{r}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma}(\tau - \beta)], \\ &\equiv -\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau - \beta < 0). \end{aligned} \quad (1.34)$$

Nous pouvons faire un développement similaire dans le cas où le temps imaginaire est négatif ( $-\beta < \tau < 0$ ), pour lequel nous obtenons

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau < 0) = -\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta - \tau > 0). \quad (1.35)$$

La fonction de Green en temps imaginaire peut être représentée par une transformée de Fourier particulière qui maintient son antipériodicité. Nous introduisons pour ce faire les fréquences de Matsubara fermioniques

$$k_n = (2n + 1)\pi T, \quad (1.36)$$

où  $n$  est un entier positif ou négatif. Le lien entre la fonction de Green en temps imaginaire et la fonction de Green de Matsubara est

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ik_n\tau} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', ik_n), \quad (1.37)$$

et la transformation inverse est

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', ik_n) = \int_0^\beta d\tau e^{ik_n\tau} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau). \quad (1.38)$$

Évidemment, les observables physiques qui dépendent de la fréquence sont mesurées expérimentalement en fréquences réelles plutôt qu'imaginaires. Le passage des fréquences imaginaires vers les fréquences réelles est appelé le prolongement analytique. La formule du prolongement analytique relie la fonction de Green de Matsubara au poids spectral défini par l'équation 1.15

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', ik_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)}{ik_n - \omega}. \quad (1.39)$$

Dans cette thèse, nous nous intéresserons également à des fonctions de corrélation qui incluent des opérateurs bosoniques. Par exemple, la fonction de corrélation densité-densité est définie par

$$\chi_{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \langle T_{\tau} n_{\mathbf{r}}(\tau) n_{\mathbf{r}'} \rangle - \langle n_{\mathbf{r}} \rangle \langle n_{\mathbf{r}'} \rangle. \quad (1.40)$$

Les fonctions de corrélation bosoniques en temps imaginaire sont périodiques dans l'intervalle  $\tau \in [-\beta, \beta]$ . Par conséquent, leur transformée de Fourier est définie avec des fréquences de Matsubara distinctes de celles associées au cas fermioniques. Les fréquences de Matsubara bosoniques sont

$$q_n = 2n\pi T, \quad (1.41)$$

où  $n$  est un entier positif ou négatif.

### 1.3 Notation

---

Dans la suite de cette thèse, nous utilisons plusieurs allègements de la notation qui sont énumérés dans cette section.

**Bosons vs fermions** : Lorsque nous considérons des quantités fermioniques, nous noterons leur quantité de mouvement par  $\mathbf{k}$  et leurs fréquences de Matsubara par  $ik_n$ . Pour les quantités bosoniques, les quantités de mouvement seront notées  $\mathbf{q}$  et leurs fréquences de Matsubara par  $iq_n$ .

**Espace réel et temps imaginaire** : Plusieurs quantités seront écrites en temps imaginaire et en espace réel. Plutôt que d'écrire, au long,  $A(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2, \dots)$ , nous utilisons la notation simplifiée  $A(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) \equiv A(1, 2)$ .

**Espace réciproque et fréquences de Matsubara** : Comme pour la simplification précédente, nous utilisons la notation  $A(\mathbf{q}, iq_n) \equiv A(q)$  pour les quantités bosoniques, et  $A(\mathbf{k}, ik_n) \equiv A(k)$  pour les quantités fermioniques.

**Sommes et intégrales** : Nous utilisons le symbole  $\bar{1}$  pour signifier une somme sur tous les indices représentés par "1" :  $A(\bar{1}) = \sum_{\mathbf{r}_1} \int d\tau_1 A(\mathbf{r}_1, \tau_1)$ . Généralement, cette somme n'inclut pas le

spin ou les indices d'orbitales. Les sommes sur ces indices spécifiques seront également notées par des symboles surmontés d'une barre :  $A_{\bar{\sigma}} = \sum_{\sigma} A_{\sigma}$ .

**Différences de temps imaginaire infinitésimales :** Dans ce qui suit, nous nous intéressons souvent à des quantités évaluées à temps et à position égaux. Or, en raison de la présence de l'opérateur d'ordre chronologique dans les fonctions de corrélations, il est souvent nécessaire de spécifier une différence de temps infinitésimale afin de pouvoir ordonner les opérateurs correctement. Nous utilisons la notation  $(1^{\pm})$  pour noter une différence de temps imaginaire infinitésimale :  $A(1^{+}, 1) = A(\mathbf{r}_1, \tau_1 + 0^{+}; \mathbf{r}_1, \tau_1)$ ,  $A(1^{-}, 1) = A(\mathbf{r}_1, \tau_1 - 0^{+}; \mathbf{r}_1, \tau_1)$ .

## 1.4 Self-énergie dans le modèle de Hubbard

Dans cette section, nous utilisons l'approche des dérivées fonctionnelles en champ source afin d'obtenir une expression pour la self-énergie dans le modèle de Hubbard [96, 97]. Nous définissons d'abord une fonction de partition  $Z$  en présence d'un champ source  $\phi$  défini dans le canal longitudinal, tel que  $\phi$  est une matrice diagonale dans l'espace des spins.

$$Z[\phi] = \langle T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) c_{\sigma}(\bar{2}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2})} \rangle. \quad (1.42)$$

Cette fonction de partition peut être utilisée afin de définir la fonction de Green en présence d'un champ source

$$\mathcal{G}_{\sigma}(1, 2)_{\phi} = -\frac{\delta \ln Z[\phi]}{\delta \phi_{\sigma}(2, 1)}, \quad (1.43)$$

$$= -\langle T_{\tau} c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \rangle_{\phi}, \quad (1.44)$$

où le symbole  $\delta$  représente une dérivée fonctionnelle. De plus, nous définissons la moyenne thermodynamique d'un opérateur  $O$  en présence d'un champ source  $\phi$  par

$$\langle O \rangle_{\phi} \equiv \frac{\langle T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) c_{\sigma}(\bar{2}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2})} O \rangle}{Z[\phi]}. \quad (1.45)$$

La fonction de Green d'intérêt est obtenue en posant le champ source à zéro dans l'équation 1.43, soit

$$\mathcal{G}_{\sigma}(1, 2) = \mathcal{G}_{\sigma}(1, 2)_{\phi=0}. \quad (1.46)$$

Pour obtenir une expression pour la self-énergie dans le modèle de Hubbard, nous calculons les équations du mouvement pour la fonction de Green  $\mathcal{G}_{\sigma}(1, 2)_{\phi}$ . Cette approche nous permet d'obtenir

l'équation suivante pour la fonction de Green

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{G}_\sigma(1,2)_\phi}{\partial \tau_1} = & -t_{j1} \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{r}_{\bar{j}}, \tau_1; 2)_\phi + \mu \mathcal{G}_\sigma(1,2)_\phi - \phi(1, \bar{2}) \mathcal{G}_\sigma(\bar{2}, 2)_\phi - \delta(1-2) \\ & - U \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(2) c_{-\sigma}^\dagger(1^+) c_{-\sigma}(1) c_\sigma(1) \rangle_\phi. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Nous reviendrons à cette approche au chapitre 7, où nous fournirons davantage de détails de calcul.

À partir de l'équation du mouvement pour la fonction de Green 1.47, nous définissons la fonction de Green non-interagissante

$$\mathcal{G}_\sigma^{(0)}(1, \bar{2})^{-1} = - \left[ \frac{\partial}{\partial \tau_1} \delta_{\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_2} + t_{\mathbf{r}_1 \bar{\mathbf{r}}_2} - \mu \delta_{\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_2} \right] \delta(\bar{\tau}_2 - \tau_1). \quad (1.48)$$

Nous substituons cette expression pour  $G^{(0)}$  dans l'équation du mouvement 1.47 et obtenons

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\sigma^{(0)}(1, \bar{2})^{-1} \mathcal{G}_\sigma(\bar{2}, 2) = & \delta(1-2) + \phi(1, \bar{2}) \mathcal{G}_\sigma(\bar{2}, 2)_\phi \\ & + U \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(2) c_{-\sigma}^\dagger(1^+) c_{-\sigma}(1) c_\sigma(1) \rangle_\phi. \end{aligned} \quad (1.49)$$

À partir de l'équation 1.49 et de l'équation de Schwinger-Dyson

$$\mathcal{G}_\sigma(1,2)_\phi^{-1} = \mathcal{G}_\sigma^{(0)}(1,2)^{-1} - \phi(1,2) - \Sigma_\sigma(1,2)_\phi, \quad (1.50)$$

nous obtenons une définition implicite de la self-énergie dans le modèle de Hubbard à une bande

$$\Sigma_\sigma(1, \bar{2})_\phi \mathcal{G}_\sigma(\bar{2}, 2)_\phi = U \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(2) c_{-\sigma}^\dagger(1^+) c_{-\sigma}(1) c_\sigma(1) \rangle_\phi. \quad (1.51)$$

## 1.5 Vertex irréductibles de spin et de charge

Dans cette section, nous nous intéressons aux susceptibilités de spin et de charge dans le modèle de Hubbard. Cette étude nous mènera à la définition des vertex irréductibles de spin et de charge pour ce modèle.

Nous définissons d'abord les opérateurs de densité et de spin. L'opérateur mesurant le nombre d'électrons de spin  $\sigma$  à la position  $\mathbf{r}_1$  est noté

$$n_\sigma(\mathbf{r}_1) = c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}_1) c_\sigma(\mathbf{r}_1). \quad (1.52)$$



Lorsque nous considérons l'opérateur dépendant du temps, nous le notons plutôt

$$\begin{aligned} n_\sigma(\mathbf{r}_1, \tau_1) &= c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}_1, \tau_1) c_\sigma(\mathbf{r}_1, \tau_1), \\ &\equiv n_\sigma(1), \end{aligned} \quad (1.53)$$

suivant la notation définie à la section 1.3. Par conséquent, les opérateurs de densité et de spin sont définis par

$$n(1) \equiv n_\uparrow(1) + n_\downarrow(1), \quad (1.54)$$

$$S^z(1) \equiv n_\uparrow(1) - n_\downarrow(1). \quad (1.55)$$

Dans cette thèse, nous n'incluons pas de facteur 1/2 dans la définition de l'opérateur de spin.

Les susceptibilités de spin et de charge sont calculées à partir de fonctions de corrélations des opérateurs définis ci-haut. Plus précisément, la susceptibilité de charge  $\chi_{ch}$  est

$$\chi_{ch}(1,2) \equiv \langle T_\tau n(1)n(2) \rangle - \langle T_\tau n(1) \rangle \langle T_\tau n(2) \rangle, \quad (1.56)$$

et la susceptibilité de spin  $\chi_{sp}$  est

$$\chi_{sp}(1,2) \equiv \langle T_\tau S^z(1)S^z(2) \rangle - \langle T_\tau S^z(1) \rangle \langle T_\tau S^z(2) \rangle. \quad (1.57)$$

Nous pouvons maintenant faire un lien entre le formalisme des fonctions de Green en champ source détaillé à la section 1.4 et les susceptibilités de spin et de charge. Nous devons d'abord définir des susceptibilités généralisées à partir d'opérateurs rappelant l'opérateur densité défini par l'équation 1.53, mais où nous évaluons les opérateurs de création et d'annihilation à deux temps et positions pouvant être différents

$$n_\sigma(1,2) \equiv c_\sigma^\dagger(2) c_\sigma(1), \quad (1.58)$$

$$n(1,2) \equiv n_\uparrow(1,2) + n_\downarrow(1,2), \quad (1.59)$$

$$S^z(1,2) \equiv n_\uparrow(1,2) - n_\downarrow(1,2). \quad (1.60)$$

Nous introduisons maintenant les susceptibilités généralisées, qui sont notées  $\chi^+$  et  $\chi^-$ , à l'aide des trois définitions précédentes

$$\begin{aligned} \chi^+(1,2,3,4) &\equiv \langle T_\tau n(1,2)n(3,4) \rangle - \langle T_\tau n(1,2) \rangle \langle T_\tau n(3,4) \rangle, \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \left[ \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(2) c_\sigma(1) c_{\sigma'}^\dagger(4) c_{\sigma'}(3) \rangle - \mathcal{G}_\sigma(1,2) \mathcal{G}_{\sigma'}(3,4) \right], \end{aligned} \quad (1.61)$$

$$\chi^-(1,2,3,4) \equiv \langle T_\tau S^z(1,2) S^z(3,4) \rangle - \langle T_\tau S^z(1,2) \rangle \langle T_\tau S^z(3,4) \rangle, \quad (1.62)$$

$$= \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \left[ \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(2) c_\sigma(1) c_{\sigma'}^\dagger(4) c_{\sigma'}(3) \rangle - \mathcal{G}_\sigma(1,2) \mathcal{G}_{\sigma'}(3,4) \right]. \quad (1.63)$$

Dans l'équation précédente, l'index de spin  $\sigma$  est égal à  $\pm 1$  lorsqu'il est utilisé en tant que variable dans la somme. La relation entre les susceptibilités généralisées  $\chi^\pm$  et les susceptibilités de spin et de charge  $\chi_{sp,ch}$  est

$$\chi_{ch,sp}(1,2) = \chi_{ch,sp}(1,1^+;2,2^+). \quad (1.64)$$

Les susceptibilités généralisées sont liées à des dérivées fonctionnelles de la fonction de Green en champ source. En effet, nous pouvons calculer

$$-\frac{\delta \mathcal{G}_\sigma(1,2)_\phi}{\delta \phi_{\sigma'}(4,3)} = \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(2) c_\sigma(1) c_{\sigma'}^\dagger(4) c_{\sigma'}(3) \rangle_\phi - \mathcal{G}_\sigma(1,2)_\phi \mathcal{G}_{\sigma'}(3,4)_\phi. \quad (1.65)$$

Le membre de droite de cette dernière équation est identique au terme entre crochet dans les équations 1.61 et 1.63, lorsque le champ source s'annule. Les susceptibilités généralisées peuvent ainsi être réécrites en fonction de ces dérivées

$$\chi_{ch}(1,2;3,4) = -\lim_{\phi \rightarrow 0} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{\delta \mathcal{G}_\sigma(1,2)_\phi}{\delta \phi_{\sigma'}(4,3)}, \quad (1.66)$$

$$\chi_{sp}(1,2;3,4) = -\lim_{\phi \rightarrow 0} \sum_{\sigma,\sigma'} \sigma\sigma' \frac{\delta \mathcal{G}_\sigma(1,2)_\phi}{\delta \phi_{\sigma'}(4,3)}, \quad (1.67)$$

Les équations 1.66 et 1.67 peuvent être simplifiées en raison de la symétrie d'invariance sous rotation. Nous obtenons

$$\chi_{ch}(1,2;3,4) = \lim_{\phi \rightarrow 0} -2 \left[ \frac{\delta \mathcal{G}_\uparrow(1,2)_\phi}{\delta \phi_\uparrow(4,3)} + \frac{\delta \mathcal{G}_\downarrow(1,2)_\phi}{\delta \phi_\downarrow(4,3)} \right], \quad (1.68)$$

$$\chi_{sp}(1,2;3,4) = \lim_{\phi \rightarrow 0} -2 \left[ \frac{\delta \mathcal{G}_\uparrow(1,2)_\phi}{\delta \phi_\uparrow(4,3)} - \frac{\delta \mathcal{G}_\downarrow(1,2)_\phi}{\delta \phi_\downarrow(4,3)} \right]. \quad (1.69)$$

Nous développons maintenant les équations précédentes en utilisant la relation suivante pour le produit d'une fonction de Green et de son inverse

$$\mathcal{G}_\sigma(1,\bar{3})_\phi \mathcal{G}_\sigma^{-1}(\bar{3},2)_\phi = \delta(1-2). \quad (1.70)$$

Il est ainsi possible de calculer la dérivée fonctionnelle de la fonction de Green en champ source à partir de son inverse

$$\frac{\delta \mathcal{G}_\sigma(1,1^+)_\phi}{\delta \phi_{\sigma'}(2^+,2)} = -\mathcal{G}_\sigma(1,\bar{3})_\phi \frac{\delta \mathcal{G}_\sigma^{-1}(\bar{3},\bar{4})_\phi}{\delta \phi_{\sigma'}(2^+,2)} \mathcal{G}_\sigma(\bar{4},1^+)_\phi. \quad (1.71)$$

Cette manoeuvre nous permet de substituer l'équation de Dyson 1.50 dans l'équation précédente pour l'inverse de la fonction de Green. Nous obtenons

$$\frac{\delta \mathcal{G}_\sigma(1, 1^+)_\phi}{\delta \phi_{\sigma'}(2^+, 2)} = \mathcal{G}_\sigma(1, 2)_\phi \mathcal{G}_\sigma(2, 1)_\phi + \mathcal{G}_\sigma(1, \bar{3})_\phi \frac{\delta \Sigma_\sigma(\bar{3}, \bar{4})_\phi}{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}(\bar{5}, \bar{6})_\phi} \frac{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}(\bar{5}, \bar{6})_\phi}{\delta \phi_{\sigma'}(2^+, 2)} \mathcal{G}_\sigma(\bar{4}, 1)_\phi \quad (1.72)$$

En insérant l'équation 1.72 dans les équations 1.68 et 1.69, les équations pour les susceptibilités de charge et de spin peuvent être formulées selon

$$\chi_{ch}(1, 2) = -2\mathcal{G}_\sigma(1, 2)\mathcal{G}_\sigma(2, 1) + \mathcal{G}_\sigma(1, \bar{3})U_{ch}(\bar{3}, \bar{4}; \bar{5}, \bar{6})\chi_{ch}(\bar{5}, \bar{6}; 2^+, 2)\mathcal{G}_\sigma(\bar{4}, 1^+), \quad (1.73)$$

$$\chi_{sp}(1, 2) = -2\mathcal{G}_\sigma(1, 2)\mathcal{G}_\sigma(2, 1) - \mathcal{G}_\sigma(1, \bar{3})U_{sp}(\bar{3}, \bar{4}; \bar{5}, \bar{6})\chi_{sp}(\bar{5}, \bar{6}; 2^+, 2)\mathcal{G}_\sigma(\bar{4}, 1^+). \quad (1.74)$$

Dans les équations précédentes, les fonctions  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  sont les vertex irréductibles de spin et de charge, respectivement. Ces vertex sont définis comme

$$U_{sp}(\bar{3}, \bar{4}; \bar{5}, \bar{6}) = \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \mathcal{G}_\downarrow(\bar{5}, \bar{6})} - \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \mathcal{G}_\uparrow(\bar{5}, \bar{6})}, \quad (1.75)$$

$$U_{ch}(\bar{3}, \bar{4}; \bar{5}, \bar{6}) = \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \mathcal{G}_\uparrow(\bar{5}, \bar{6})} + \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \mathcal{G}_\downarrow(\bar{5}, \bar{6})}. \quad (1.76)$$

Ces expressions pour les vertex  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  sont exactes. En général, les vertex peuvent dépendre du temps (des fréquences), ainsi que de la position (des vecteurs d'onde).

### 1.5.1 Règles de somme pour les susceptibilités de charge et de spin

Les susceptibilités de spin et de charge respectent des règles de somme. Considérons d'abord la susceptibilité de spin à temps nul et à positions égales, en définissant la densité électronique moyenne  $n = \langle n \rangle = \langle n_\uparrow + n_\downarrow \rangle$

$$\begin{aligned} \chi_{sp}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0) &= \langle (n_\uparrow - n_\downarrow)^2 \rangle, \\ &= \langle n_\uparrow + n_\downarrow - 2n_\uparrow n_\downarrow \rangle, \\ &= n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle. \end{aligned} \quad (1.77)$$

Ce résultat exact est obtenu en imposant le principe de Pauli pour les fermions par le biais de l'égalité :  $n_\sigma^2 = n_\sigma$ . La règle de somme pour la susceptibilité de spin locale est obtenue en écrivant l'équation précédente sous la forme de sa transformée de Fourier, soit

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle. \quad (1.78)$$

Des considérations similaires s'appliquent à la susceptibilité de charge. La susceptibilité de charge locale est, en imposant une fois de plus le principe de Pauli,

$$\begin{aligned}\chi_{ch}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0) &= \langle (n_{\uparrow} + n_{\downarrow})^2 \rangle - \langle n \rangle^2, \\ &= \langle n_{\uparrow} + n_{\downarrow} + 2n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - n^2, \\ &= n + 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - n^2.\end{aligned}\tag{1.79}$$

Nous obtenons la règle de somme pour la susceptibilité de charge en réécrivant l'équation précédente par sa transformée de Fourier

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = n + 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - n^2.\tag{1.80}$$

## 1.6 Conclusion

---

Dans ce chapitre, nous avons introduit le modèle de Hubbard à une bande. Nous avons obtenu plusieurs résultats exacts pour ce modèle, notamment pour la self-énergie, les vertex irréductibles ainsi que les susceptibilités de spin et de charge. Nous n'avons toutefois pas résolu le problème en son entièreté : bien que nous ayons des équations pour les quantités physiques d'intérêt, nous n'avons pour l'instant pas de façon de les résoudre en deux dimensions. Nous revenons ainsi au problème mentionné au début de ce chapitre, soit la nécessité d'utiliser une méthode approximative pour résoudre le modèle de Hubbard.

Les méthodes approximatives pour le modèle de Hubbard peuvent respecter ou non les règles de somme introduites dans la dernière section aux équations 1.78 et 1.80. Une méthode qui satisfait ces règles de somme garantit par le fait même que le principe de Pauli est respecté. C'est le cas de l'approche auto-cohérente à deux particules, la méthode pour le modèle de Hubbard dont il est question dans cette thèse. Cette approche sera discutée en détail dans la section suivante.

## Chapitre 2

# TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande

Dans ce chapitre, nous introduisons l'approche auto-cohérente à deux particules, ou TPSC. Il s'agit d'une méthode pour le modèle de Hubbard qui est centrale à cette thèse. Avant de passer à la description détaillée du formalisme à la section 2.2, nous débutons ce chapitre par une courte introduction à la méthode, ses applications, ses propriétés, ses limitations et ses extensions. Des revues détaillées de la méthode sont disponibles dans les références [74, 98, 99].

## 2.1 Introduction à l'approche TPSC

---

La TPSC est une méthode qui a d'abord été formulée pour le modèle de Hubbard à une bande [71–74]. Dans cette méthode, les susceptibilités de spin et de charge prennent une forme similaire à celles de l'approche RPA, mais incluent des vertex de spin  $U_{sp}$  et de charge  $U_{ch}$  renormalisés :  $U_{sp} \neq U_{ch} \neq U$

$$\chi_{sp,ch}^{RPA} = \frac{\chi_0}{1 \mp \frac{U}{2}\chi_0}, \quad (2.1)$$

$$\chi_{sp,ch}^{TPSC} = \frac{\chi_0}{1 \mp \frac{U_{sp,ch}}{2}\chi_0} \quad (2.2)$$

Les susceptibilités de spin et de charge contribuent à la self-énergie en TPSC, qui dépend alors de la quantité de mouvement ainsi que de la fréquence. La TPSC est une approche valide pour l'étude du régime d'interaction faible à intermédiaire du modèle de Hubbard. Dans ce régime, les fluctuations de spin à grande longueur d'onde jouent un rôle crucial. Leur effet est bien représenté par la TPSC.

Les résultats de la méthode ont d'ailleurs été comparés de façon systématique à des simulations Monte Carlo, ce qui a permis de bien délimiter son régime de validité [5, 22, 71–74, 99–101].

La TPSC présente plusieurs propriétés intéressantes (pour une liste détaillée, voir la revue [99]). D'abord, cette approche non-perturbative satisfait le principe de Pauli et les règles de somme pour les susceptibilités de spin et de charge introduites au chapitre précédent. Elle respecte également le théorème de Mermin-Wagner (selon lequel les transitions de phase brisant une symétrie continue sont interdites en dimensions plus petites ou égales à 2) et les lois de conservation du spin et de la charge. La TPSC présente une cohérence entre des quantités à une et à deux particules, soit la self-énergie, la fonction de Green et la double occupation. Notons de plus que la TPSC est la première méthode ayant permis la description quantitative du pseudogap antiferromagnétique du modèle de Hubbard en deux dimensions par le biais du critère de Vilk [21, 22, 74]. Grâce à cette méthode, il a été prédit que le pseudogap antiferromagnétique présent dans le diagramme de phase des cuprates dopés en électrons peut lui aussi être décrit par le critère de Vilk [21]. Cette prédiction a été vérifiée expérimentalement pour le cuprate dopé en électron  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  [102]. Nous discuterons davantage des cuprates dopés en électrons au chapitre 3.

L'approche TPSC a été appliquée à l'étude de plusieurs aspects du modèle de Hubbard. Tel que revu dans l'introduction de la référence [5], la méthode a été utilisée pour étudier la supraconductivité non-conventionnelle [103–107], les propriétés magnétiques du modèle de Hubbard à deux et trois dimensions [108–111], le modèle de Hubbard attractif ( $U < 0$ ) [101, 112], la conductivité optique [113], et les atomes froids [114]. Deux applications de la TPSC font l'objet de chapitres dans cette thèse : l'étude de l'effet du désordre dans le modèle de Hubbard par la TPSC est présentée au chapitre 4 [2], et l'étude de la persistance des quasiparticules du liquide de Fermi dans certaines zones de la surface de Fermi est présentée au chapitre 5 [1].

La TPSC présente évidemment certaines limitations. D'abord, elle ne permet pas de décrire la transition de Mott et n'est valide que dans les régimes d'interaction faible à intermédiaire du modèle de Hubbard. De plus, sa principale limitation est que son domaine de validité est limité en deux dimensions : la méthode n'est pas valide à très basse température dans le régime classique renormalisé. Nous discuterons du régime classique renormalisé et de cette limitation de la TPSC au chapitre 6.

Depuis sa première formulation, la TPSC a été étendue pour être appliquée au modèle de Hubbard étendu [115–117], à des modèles multi-orbitaux [105, 118–120] et multi-sites [106, 121–123]. L'approche a de plus été adaptée au problème hors-équilibre [124] et a été utilisée pour compléter des calculs réalistes par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT, pour *density functional theory* en anglais) [106, 119, 125].

Les extensions de la TPSC sont rendues possibles par différents facteurs. L'une de ces raisons est que le coût numérique d'un calcul TPSC est très faible : avec une implémentation optimisée, il

est possible de réaliser un calcul sur un réseau en deux dimensions de  $512 \times 512$  sites en quelques secondes à peine sur un ordinateur personnel. Nous avons fourni une implémentation efficace de la TPSC en ligne [126]. Un autre facteur facilitant l’extension de la TPSC est que le formalisme de la méthode peut être directement généralisé à différents hamiltoniens – bien qu’une telle généralisation ne soit pas toujours sans défi. Au chapitre 7, nous présentons notre propre généralisation de la TPSC au hamiltonien d’Emery (modèle de Hubbard à trois bandes). Nous y verrons que les étapes du formalisme de la TPSC, que nous présentons à la section 2.2 de ce chapitre, peuvent être transposées directement à ce hamiltonien différent.

Finalement, de récents travaux ont mené à des améliorations notables de la méthode dans certains régimes de paramètre. La première amélioration de la TPSC, appelée TPSC+DMFT, est une approche mixte qui inclut les fluctuations à grande longueur d’onde obtenues par la TPSC dans un calcul DMFT. Cette approche a été développée simultanément pour le modèle de Hubbard à une bande [5] et pour le modèle de Hubbard-Kanamori multi-orbital [127]. Elle a ensuite été étendue au problème hors-équilibre [128]. Il a été montré que, pour le modèle de Hubbard à une bande, la TPSC+DMFT permet de mieux reproduire les résultats obtenus par des simulations Monte Carlo à basse température. Nous reviendrons à cette approche au chapitre 7 dans le cadre de l’étude du modèle d’Emery. La seconde amélioration de la TPSC est la TPSC+, ainsi que sa variante la TPSC+SFM [3, 22]. Ces deux approches, détaillées au chapitre 6, étendent le domaine de validité de la TPSC dans le régime classique renormalisé du modèle de Hubbard en deux dimensions.

## 2.2 Description détaillée de la méthode

---

Dans cette section, nous détaillons le formalisme de la TPSC. Les sous-sections 2.2.1, 2.2.2 et 2.2.4 suivent le formalisme présenté, entre autres, aux références [98, 99]. La sous-section 2.2.3, où nous présentons une analyse détaillée de l’ansatz TPSC et des conséquences de la symétrie particule-trou, contient des résultats originaux.

### 2.2.1 Ansatz et premier niveau d’approximation

Le point de départ de l’approche TPSC est l’équation 1.51 définissant la self-énergie dans le modèle de Hubbard. L’approche TPSC se base sur une factorisation de type Hartree-Fock de l’équation 1.51, dans laquelle nous introduisons une fonctionnelle  $A_\phi$ . Ce premier niveau d’approximation sera dénoté par l’exposant (1). Nous obtenons ainsi

$$\Sigma_\sigma^{(1)}(1, \bar{2})_\phi \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\bar{2}, 2)_\phi = A_\phi \mathcal{G}_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+)_\phi \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(1, 2)_\phi, \quad (2.3)$$

L'équation 2.3 peut être utilisée afin de définir le vertex de spin irréductible en utilisant la définition de l'équation 1.75. Grâce à l'invariance par rotation qui annule les dérivées de la fonctionnelle  $A_\phi$  ( $\frac{\partial A_\phi}{\partial \mathcal{G}_\uparrow} = \frac{\partial A_\phi}{\partial \mathcal{G}_\downarrow}$ ), nous obtenons

$$U_{sp}(\bar{3}, \bar{4}, \bar{5}, \bar{6}) = A_{\phi=0} \delta(\bar{3} - \bar{5}) \delta(\bar{3} - \bar{6}) \delta(\bar{3} - \bar{4}). \quad (2.4)$$

Dans l'approche TPSC, nous imposons de plus que l'équation 1.51 soit satisfaite exactement à temps égaux et à positions égales, soit

$$\Sigma_\sigma(1, \bar{2})_\phi \mathcal{G}_\sigma(\bar{2}, 1^+)_\phi = U \langle n_\uparrow(1) n_\downarrow(1) \rangle_\phi. \quad (2.5)$$

Les équations 2.5 et 2.3 devant être satisfaites simultanément, nous obtenons une équation pour la fonctionnelle  $A_\phi$

$$A_\phi = U \frac{\langle n_\uparrow(1) n_\downarrow(1) \rangle_\phi}{\langle n_\uparrow(1) \rangle_\phi \langle n_\downarrow(1) \rangle_\phi}. \quad (2.6)$$

Par conséquent, le vertex de spin défini en posant le champ source à zéro  $U_{sp} \equiv A_{\phi=0}$  est

$$U_{sp} = U \frac{\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle}. \quad (2.7)$$

En TPSC, le vertex de spin est ainsi local en temps et en position. Il est d'usage de référer à l'équation 2.7 reliant  $U_{sp}$  à la double occupation en tant que "l'ansatz de la TPSC". Cet ansatz est inspiré des travaux de Singwi [129, 130], et a été trouvé indépendamment par M.R. Hedayati et G. Vignale [131].

Nous pouvons maintenant écrire une expression explicite pour la self-énergie au premier niveau d'approximation de la TPSC

$$\Sigma_\sigma^{(1)}(1, 2) = U_{sp} \mathcal{G}_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+) \delta(1 - 2). \quad (2.8)$$

À ce stade, l'approche TPSC est incomplète : tant le vertex de spin  $U_{sp}$  que la double occupation  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  sont des inconnues que nous ne pouvons pas déterminer à partir de l'unique équation 2.7. L'équation manquante pour résoudre le problème au premier niveau d'approximation est la règle de somme pour la susceptibilité de spin, dont nous discutons à la sous-section suivante.

## 2.2.2 Règles de somme et auto-cohérence

Nous nous intéressons maintenant à la susceptibilité de spin au premier niveau d'approximation de la TPSC. Nous avons obtenu une expression exacte pour la susceptibilité de spin à l'aide du



vertex de spin irréductible à l'équation 1.74 pour le modèle de Hubbard. Cette équation peut être évaluée au premier niveau d'approximation de la TPSC. Nous obtenons

$$\chi_{sp}(1,2) = -2\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(1,2)\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(2,1) - \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(1,\bar{3})U_{sp}\chi_{sp}(\bar{3},2)\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\bar{3},1^+). \quad (2.9)$$

En transformée de Fourier, dans l'espace des quantités de mouvement et des fréquences de Matsubara, cette équation devient

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)}. \quad (2.10)$$

Dans ce qui précède, nous avons défini la susceptibilité sans vertex  $\chi^{(1)}$  par

$$\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n) = -2\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n), \quad (2.11)$$

Nous rappelons que  $k_n = (2n+1)\pi T$  est une fréquence de Matsubara fermionique, alors que  $q_n = 2n\pi T$  est une fréquence de Matsubara bosonique. Le facteur 2 provient d'une somme sur les spins : dans l'état paramagnétique, la fonction de Green satisfait l'identité  $\mathcal{G}_\uparrow^{(0)} = \mathcal{G}_\downarrow^{(0)}$ .

L'approche TPSC résout le modèle par l'auto-cohérence de l'ansatz reliant le vertex de spin  $U_{sp}$  à la double occupation et de la règle de somme pour la susceptibilité de spin. En effet, en substituant la forme de la susceptibilité de spin en TPSC (équation 2.10) dans la règle de somme pour la susceptibilité de spin (équation 1.78), nous obtenons

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)} = n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle, \quad (2.12)$$

$$= n - 2\frac{U_{sp}}{U}\langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle, \quad (2.13)$$

où nous avons procédé à la substitution de la double occupation par l'ansatz TPSC dans la seconde ligne. En pratique, dans l'état paramagnétique, nous utilisons souvent l'égalité  $\langle n_\uparrow \rangle = \langle n_\downarrow \rangle = \frac{n}{2}$ .

Dans l'approche TPSC, nous posons que le vertex de charge est lui aussi local dans le temps et l'espace. Cette hypothèse nous permet d'obtenir une équation pour la susceptibilité de charge

$$\chi_{ch}(1,2) = -2\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(1,2)\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(2,1) + \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(1,\bar{3})U_{ch}\chi_{ch}(\bar{3},2)\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\bar{3},1^+). \quad (2.14)$$

Dans l'espace réciproque, cette susceptibilité est

$$\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)}. \quad (2.15)$$

Nous pouvons substituer l'équation 2.15 dans la règle de somme pour la susceptibilité de charge

(équation 1.80). Nous obtenons

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n)} = n + 2\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - n^2. \quad (2.16)$$

En pratique, dans un calcul TPSC, nous obtenons d'abord la valeur de  $U_{sp}$  en résolvant l'équation auto-cohérente 2.13. Nous utilisons ensuite la valeur résultante de la double occupation pour calculer le vertex de charge  $U_{ch}$  grâce à l'équation 2.16. Rappelons ici que les règles de somme menant aux équations 2.13 et 2.16 ont été obtenues en imposant le principe de Pauli via  $n_{\sigma}^2 = n_{\sigma}$ . La TPSC est ainsi une méthode qui satisfait le principe d'exclusion de Pauli.

Enfin, nous pouvons remarquer que les susceptibilités, vertex et fonctions de Green sont calculés jusqu'à présent dans le premier niveau d'approximation de la TPSC. La fonction de Green à ce niveau est, selon l'équation de Dyson

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(1, 2)^{-1} = \mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(1, 2)^{-1} - \Sigma^{(1)}(1, 2). \quad (2.17)$$

Or, la self-énergie au premier niveau d'approximation de la TPSC (équation 2.8) est une constante qui peut être absorbée dans la définition du potentiel chimique. Il est ainsi d'usage d'effectuer les calculs TPSC avec une fonction de Green non-interagissante  $\mathcal{G}^{(0)}$ . Il suffit alors de choisir le potentiel chimique de cette fonction de Green de façon à fixer la densité voulue grâce à

$$n = 2\mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(1, 1^+). \quad (2.18)$$

Dans ce qui précède, nous avons utilisé la propriété  $\mathcal{G}_{\uparrow}^{(0)} = \mathcal{G}_{\downarrow}^{(0)}$  de l'état paramagnétique. Nous calculons ensuite la fonction de Lindhard  $\chi^{(0)}$  à partir de la fonction de Green non-interagissante

$$\chi^{(0)}(1, 2) = -2\mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(1, 2)\mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(2, 1). \quad (2.19)$$

C'est cette susceptibilité sans vertex qui est utilisée pour le calcul des susceptibilités de spin et de charge et des règles de somme.

### 2.2.3 Symétrie particule-trou et ansatz

La symétrie particule-trou est présente dans le modèle de Hubbard en deux dimensions sur un réseau carré avec un terme de saut aux premiers voisins uniquement ( $t' = t'' = 0$ ). Cette symétrie implique que, pour un dopage  $p < 1$ , le vertex de spin obtenu pour une densité sous le demi-remplissage  $n_{h-d} = 1 - p$  doit être égal au vertex de spin obtenu pour la densité correspondante au-dessus du demi-remplissage  $n_{e-d} = 1 + p$ . Or, l'ansatz TPSC présenté à l'équation 2.7 ne respecte

pas la symétrie particule-trou. Cet ansatz est valide pour des densités égales ou plus petites que le demi-remplissage  $n \leq 1$ . Pour le cas dopé en électrons, où la densité est supérieure à 1, nous devons appliquer une transformation particule-trou sur l'ansatz :  $n_\sigma \rightarrow 1 - n_\sigma$  [74, 113].

Avant la transformation particule-trou, l'ansatz TPSC relie la double occupation au vertex irréductible de spin par

$$\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = \frac{U_{sp} n^2}{4U}. \quad (2.20)$$

Dans l'équation précédente, nous avons utilisé la propriété  $\langle n_\sigma \rangle = \frac{n}{2}$  de l'état paramagnétique.

Nous appliquons la transformation particule-trou sur l'ansatz, et nous obtenons

$$U_{sp} = U \frac{\langle (1 - n_\uparrow)(1 - n_\downarrow) \rangle}{\langle (1 - n_\uparrow) \rangle \langle (1 - n_\downarrow) \rangle}, \quad (2.21)$$

$$\Rightarrow \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = n - 1 + \frac{U_{sp}}{4U} (2 - n)^2. \quad (2.22)$$

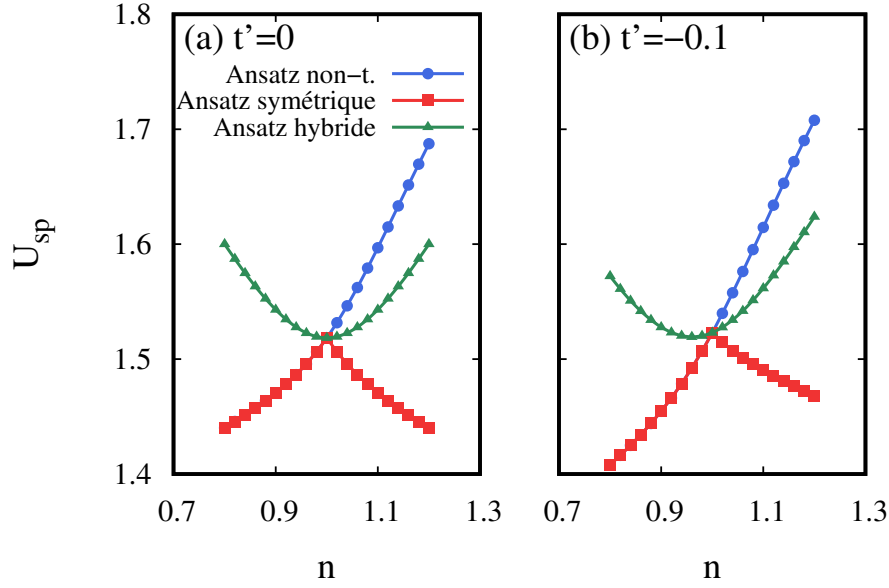
Dans ce qui suit, nous considérons quatre possibilités d'ansatz :

- Ansatz non-transformé : Utiliser l'ansatz décrit par l'équation 2.7 pour toutes les densités,
- Ansatz transformé : Utiliser l'ansatz transformé 2.21 pour toutes les densités,
- Ansatz symétrique : Utiliser l'ansatz non-transformé pour  $n < 1$  et l'ansatz transformé 2.21 pour  $n > 1$ ,
- Ansatz hybride : Utiliser la valeur moyenne de l'ansatz non-transformé et de l'ansatz transformé.

La quatrième option a été introduite à quelques reprises dans la littérature en tant que solution à la brisure de la symétrie particule-trou intrinsèque à l'ansatz non-transformé [119, 120].

À la figure 2.1, nous montrons le vertex  $U_{sp}$  en fonction de la densité  $n$ . Les calculs ont été réalisés pour le modèle de Hubbard en deux dimensions, sur le réseau carré, avec un paramètre de saut aux premiers voisins  $t = 1$ , pour  $U = 2$  et pour la température  $T = 0.2$ . Le vertex de spin est comparé pour trois possibilités d'ansatz : l'ansatz non-transformé, l'ansatz symétrique et l'ansatz hybride. La figure (a) montre les résultats pour le modèle avec symétrie particule-trou (paramètre de saut aux seconds voisins nul,  $t' = 0$ ). Pour ce modèle, le vertex de spin doit respecter la symétrie particule-trou. Nous voyons que c'est bien le cas pour les ansatz symétrique et hybride. À la figure (b), nous montrons les résultats pour un modèle sans symétrie particule-trou ( $t' \neq 0$ ). Malgré le fait que ce modèle ne respecte pas la symétrie particule-trou, la ressemblance entre la dépendance en densité de  $U_{sp}$  pour ce modèle et le modèle avec  $t' = 0$  indique qu'il est également nécessaire d'utiliser l'ansatz symétrique ou hybride pour ce type de modèle.

La figure 2.1 illustre clairement que le choix de l'ansatz aura de profondes conséquences sur les résultats obtenus pour les observables d'intérêt. Nous observons que la valeur du vertex de

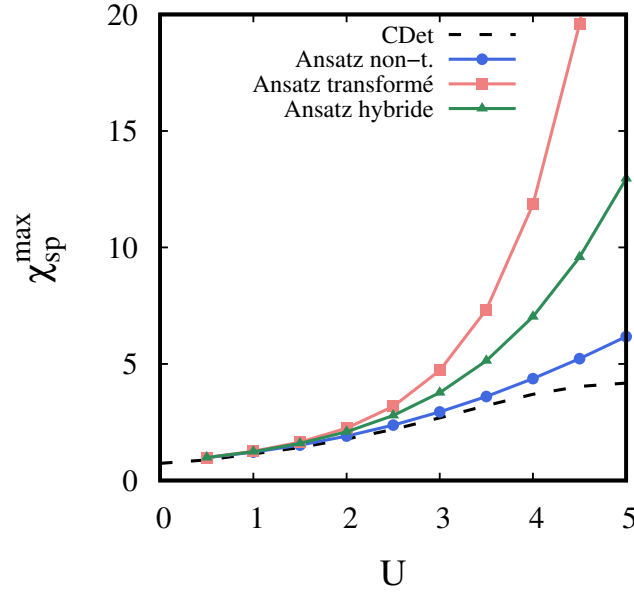


**FIGURE 2.1** Vertex de spin  $U_{sp}$  obtenu par trois options d'ansatz : l'ansatz non-transformé (cercles bleus), l'ansatz symétrique (carrés rouges) et l'ansatz hybride (triangles verts). Les calculs ont été réalisés pour le modèle de Hubbard sur un réseau carré, avec un paramètre de saut aux premiers voisins  $t = 1$ , pour  $U = 2$  et la température  $T = 0.2$ . En (a), le modèle possède la symétrie particule-trou ( $t' = 0$ ). En (b), le paramètre de saut aux seconds voisins est non-nul ( $t' = -0.1$ ).

spin obtenu pour les ansatz symétrique et hybride est très différente, et cette différence s'exacerbe lorsque la densité est loin du demi-remplissage. Pensons notamment à la susceptibilité de spin : puisqu'elle ne dépend que de la fonction de Lindhard et du vertex de spin, utiliser un ansatz plutôt qu'un autre peut changer drastiquement sa valeur, et par le fait même l'interprétation physique des résultats d'un calcul.

Nous illustrons cette question à la figure 2.2. Nous y montrons la valeur maximale de la susceptibilité de spin  $\chi_{sp}^{max}$  en fonction de  $U$  évaluée pour un modèle de Hubbard en deux dimensions sur un réseau carré, avec un paramètre de saut aux premiers voisins uniquement, à la température  $T = 0.25$  et au remplissage  $n = 0.875$ . Selon la formulation originale de la TPSC, ce cas doit être étudié par l'ansatz non-transformé puisque la densité est inférieure au demi-remplissage. Nous comparons dans cette figure les résultats pour trois ansatz différents : l'ansatz non-transformé, l'ansatz transformé, et l'ansatz hybride. Nous montrons également la valeur de  $\chi_{sp}^{max}$  obtenue par CDet, une méthode de simulation Monte Carlo diagrammatique dont les résultats sont exacts (dans la limite de l'erreur statistique provenant de l'échantillonnage).

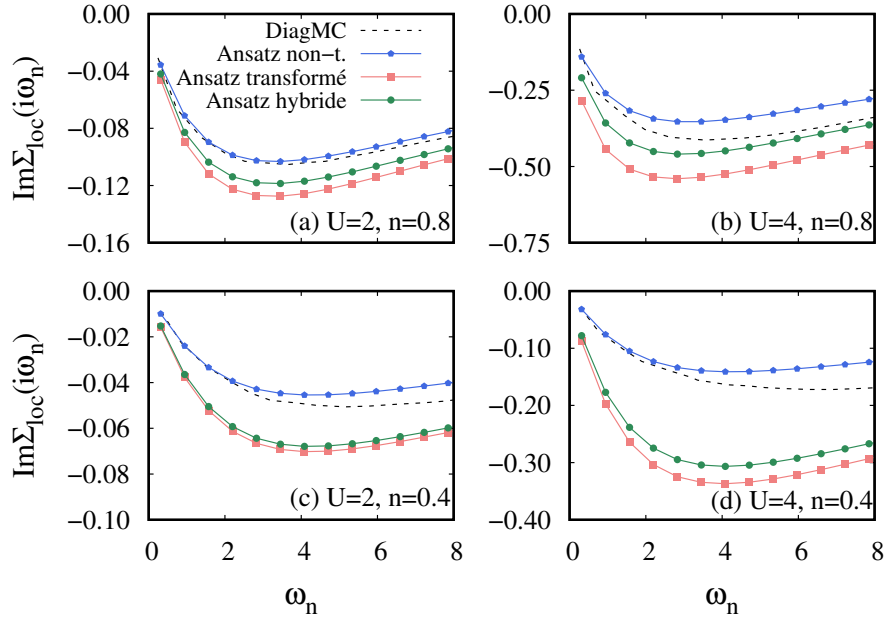
La comparaison des résultats à CDet illustre que l'ansatz non-transformé de la TPSC permet d'obtenir le meilleur résultat. À l'inverse, la valeur de  $\chi_{sp}^{max}$  obtenue par l'ansatz transformé s'éloigne davantage de la valeur de CDet lorsque l'interaction  $U$  augmente. L'ansatz hybride donne des résultats intermédiaires. Cet exemple nous montre que l'ansatz non-transformé est le plus précis



**FIGURE 2.2** Valeur maximale de la susceptibilité de spin  $\chi_{sp}^{max}$  en fonction de  $U$  obtenue par trois options d'ansatz : l'ansatz non-transformé (cercles bleus), l'ansatz transformé (carrés roses) et l'ansatz hybride (triangles verts). Les calculs ont été réalisés pour le modèle de Hubbard sur un réseau carré, avec un paramètre de saut aux premiers voisins  $t = 1$  uniquement, pour la densité  $n = 0.875$  et la température  $T = 0.25$ . Les résultats CDet ont été obtenus de la référence [132].

pour une densité inférieure au demi-remplissage. À l'inverse, l'ansatz transformé sera donc le plus précis pour des densités supérieures au demi-remplissage, puisque ce modèle respecte la symétrie particule-trou. Ceci nous mène à la conclusion que l'ansatz symétrique est le choix approprié en TPSC.

À la figure 2.3, nous illustrons la partie imaginaire de la self-énergie locale obtenue pour le modèle de Hubbard sur un réseau carré, avec un paramètre de saut aux premiers voisins seulement, à la température  $T = 0.1$ . Les calculs sont réalisés loin du demi-remplissage pour les densités  $n = 0.4$  et  $n = 0.8$ , pour les valeurs de l'interaction de Hubbard  $U = 2$  et  $U = 4$ . Nous comparons les résultats exacts obtenus par des calculs DiagMC (Monte Carlo diagrammatique) à ceux qui ont été obtenus par trois ansatz pour la TPSC : l'ansatz non-transformé, l'ansatz transformé et l'ansatz hybride. Nous arrivons à la même conclusion que pour la susceptibilité de spin, soit que l'ansatz non-transformé permet l'obtention des résultats les plus précis. Encore une fois, pour ce modèle qui respecte la symétrie particule-trou, cela implique que l'ansatz transformé donnera les meilleurs résultats pour les cas où la densité est supérieure au demi-remplissage.



**FIGURE 2.3** Partie imaginaire de la self-énergie locale en fonction des fréquences de Matsubara obtenue par trois options d'ansatz : l'ansatz non-transformé (pentagones bleus), l'ansatz transformé (carrés roses) et l'ansatz hybride (cercles verts). Les calculs ont été réalisés pour le modèle de Hubbard sur un réseau carré, avec un paramètre de saut aux premiers voisins  $t = 1$  uniquement, pour les densités  $n = 0.8$  et  $n = 0.4$ , la température  $T = 0.1$ , et l'interaction  $U = 2$  et  $U = 4$ . Les résultats DiagMC ont été obtenus de la référence [133].

Ces observations permettent de conclure que l'ansatz symétrique, soit

$$U_{sp} = \begin{cases} U \frac{\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle} & n \leq 1, \\ U \frac{\langle (1-n_{\uparrow})(1-n_{\downarrow}) \rangle}{\langle (1-n_{\uparrow}) \rangle \langle (1-n_{\downarrow}) \rangle} & n > 1, \end{cases} \quad (2.23)$$

est le meilleur choix d'ansatz pour la TPSC parmi les options mentionnées plus haut, puisque cet ansatz satisfait la symétrie particule-trou et permet de mieux reproduire les résultats d'étalonnage obtenus par Monte Carlo diagrammatique. Nous pouvons comprendre ce résultat en considérant le développement ayant mené à l'ansatz non-transformé. Pour obtenir cet ansatz, nous avons dû effectuer un découplage de type Hartree-Fock sur l'équation de la self-énergie. Ce genre de découplage devient valide dans la limite diluée, ce qui explique pourquoi l'ansatz non-transformé de la TPSC donne de meilleurs résultats à densité faible par rapport au demi-remplissage. À l'inverse, l'ansatz transformé est plus adéquat dans la limite de forte densité, loin du demi-remplissage.

### 2.2.4 Second niveau d'approximation pour la self-énergie

Nous avons fait allusion au "premier niveau d'approximation" dans les sections précédentes, notamment en utilisant l'exposant <sup>(1)</sup> lorsque nous faisons référence à la fonction de Green et à la self-énergie. La self-énergie obtenue au premier niveau d'approximation de la TPSC est une constante qui, au final, est absorbée dans la définition du potentiel chimique. Elle n'est évidemment pas une très bonne approximation de la véritable self-énergie. La démarche de la TPSC ressemble à celle de l'approximation GW pour le gaz d'électrons. Les modes collectifs (susceptibilités de spin et de charge) sont obtenus avec des fonction de Green sans interaction afin de satisfaire les lois de conservation qui sont importantes à ce niveau. Il est important d'inclure l'effet de ces modes collectifs dans la self-énergie des électrons. C'est ce que nous faisons au second niveau d'approximation de la TPSC.

Pour y arriver, nous nous concentrons d'abord sur le canal longitudinal et retournons à l'équation 1.51 pour la self-énergie. Nous réécrivons l'équation en multipliant par une fonction de Green inverse de chaque côté de l'égalité afin d'isoler la self-énergie

$$\Sigma_{\sigma}(1,2)_{\phi} = U \langle T_{\tau} c_{\sigma}^{\dagger}(\bar{3}) c_{\sigma}(1) c_{-\sigma}^{\dagger}(1^{+}) c_{-\sigma}(1) \rangle_{\phi} \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\bar{3},2)_{\phi}. \quad (2.24)$$

Nous substituons maintenant la fonction de corrélation à quatre points par une dérivée fonctionnelle de la fonction de Green,

$$\Sigma_{\sigma}^l(1,2)_{\phi} = U \left[ \mathcal{G}_{\sigma}(1,\bar{3})_{\phi} \mathcal{G}_{-\sigma}(1,1^{+})_{\phi} - \frac{\delta \mathcal{G}_{\sigma}(1,\bar{3})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^{+},1)} \right] \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\bar{3},2)_{\phi}. \quad (2.25)$$

L'exposant  $l$  précise que cette expression est valide dans le canal longitudinal. Nous utilisons à nouveau l'identité  $\mathcal{G}(1,\bar{2})\mathcal{G}^{-1}(\bar{2},3) = \delta(1-3)$  pour substituer la dérivée fonctionnelle de la fonction de Green par la dérivée de son inverse

$$\frac{\delta \mathcal{G}_{\sigma}(1,\bar{3})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^{+},1)} = -\mathcal{G}_{\sigma}(1,\bar{4})_{\phi} \frac{\delta \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\bar{4},\bar{5})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^{+},1)} \mathcal{G}_{\sigma}(\bar{5},\bar{3})_{\phi}. \quad (2.26)$$

Nous utilisons ensuite l'équation de Schwinger-Dyson afin de calculer la dérivée fonctionnelle de la fonction de Green inverse

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\bar{4},\bar{5})_{\phi} = \mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(\bar{4},\bar{5})_{\phi}^{-1} - \phi_{\sigma}(\bar{4},\bar{5}) - \Sigma_{\sigma}(\bar{4},\bar{5})_{\phi}. \quad (2.27)$$

$$\Rightarrow \frac{\delta \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\bar{4}, \bar{5})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)} = -\frac{\delta \Sigma_{\sigma}(\bar{4}, \bar{5})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)}, \quad (2.28)$$

$$= -\frac{\delta \Sigma_{\sigma}(\bar{4}, \bar{5})_{\phi}}{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}} \frac{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)}. \quad (2.29)$$

$$(2.30)$$

Nous obtenons donc l'équation suivante pour la self-énergie dans le canal longitudinal

$$\Sigma_{\sigma}^l(1, 2)_{\phi} = U \left[ \mathcal{G}_{\sigma}(1, \bar{3})_{\phi} \mathcal{G}_{-\sigma}(1, 1^+)_{\phi} - \mathcal{G}_{\sigma}(1, \bar{4})_{\phi} \frac{\delta \Sigma_{\sigma}(\bar{4}, \bar{5})_{\phi}}{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}} \frac{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)} \mathcal{G}_{\sigma}(\bar{5}, \bar{3})_{\phi} \right] \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\bar{3}, 2)_{\phi}. \quad (2.31)$$

Nous utilisons les relations suivantes pour simplifier l'équation 2.31

$$U_{ch}(\bar{4}, \bar{5}; \bar{6}, \bar{7}) - U_{sp}(\bar{4}, \bar{5}; \bar{6}, \bar{7}) = 2 \frac{\delta \Sigma_{\sigma}(\bar{4}, \bar{5})_{\phi}}{\delta \mathcal{G}_{\sigma}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}}, \quad (2.32)$$

$$U_{ch}(\bar{4}, \bar{5}; \bar{6}, \bar{7}) + U_{sp}(\bar{4}, \bar{5}; \bar{6}, \bar{7}) = 2 \frac{\delta \Sigma_{\sigma}(\bar{4}, \bar{5})_{\phi}}{\delta \mathcal{G}_{-\sigma}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}}, \quad (2.33)$$

$$\chi_{ch}(\bar{6}, \bar{7}, 1, 1^+) + \chi_{sp}(\bar{6}, \bar{7}, 1, 1^+) = -4 \frac{\delta \mathcal{G}_{-\sigma}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)}, \quad (2.34)$$

$$\chi_{ch}(\bar{6}, \bar{7}, 1, 1^+) - \chi_{sp}(\bar{6}, \bar{7}, 1, 1^+) = -4 \frac{\delta \mathcal{G}_{\sigma}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)}. \quad (2.35)$$

En TPSC, le deuxième niveau d'approximation pour la self-énergie est obtenu en substituant le premier niveau d'approximation dans le membre de droite de l'équation 2.31

$$\Sigma_{\sigma}^{(2),l}(1, 2)_{\phi} = U \left[ \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(1, \bar{3})_{\phi} \mathcal{G}_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+)_{\phi} - \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(1, \bar{4})_{\phi} \frac{\delta \Sigma_{\sigma}^{(1)}(\bar{4}, \bar{5})_{\phi}}{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}^{(1)}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}} \frac{\delta \mathcal{G}_{\bar{\sigma}''}^{(1)}(\bar{6}, \bar{7})_{\phi}}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)} \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(\bar{5}, \bar{3})_{\phi} \right] \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(\bar{3}, 2)_{\phi}^{-1}. \quad (2.36)$$

En utilisant les relations 2.32 à 2.35, nous obtenons

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}^{(2),l}(1, 2)_{\phi} &= U \mathcal{G}_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+)_{\phi} \delta(1 - 2) \\ &\quad + \frac{1}{4} \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(1, \bar{4})_{\phi} (U_{sp} \chi_{sp}(\bar{6}, \bar{7}, 1, 1^+) + U_{ch} \chi_{ch}(\bar{6}, \bar{7}, 1, 1^+)) \delta(\bar{4} - \bar{5}) \delta(\bar{4} - \bar{6}) \delta(\bar{4} - \bar{7}) \delta(\bar{5} - 2), \\ &= U \mathcal{G}_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+)_{\phi} \delta(1 - 2) + \frac{1}{4} \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(1, 2)_{\phi} (U_{sp} \chi_{sp}(2, 2^+, 1, 1^+) + U_{ch} \chi_{ch}(2, 2^+, 1, 1^+)) \end{aligned} \quad (2.37)$$

En transformée de Fourier, cette équation devient

$$\Sigma_{\sigma}^{(2),l}(\mathbf{k}, ik_n) = U \frac{n}{2} + \frac{U}{4} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} (U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)) \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (2.38)$$



Les fluctuations dans le canal transverse contribuent également à la self-énergie. Nous pouvons calculer la self-énergie dans le canal transverse en suivant une approche similaire à celle que nous avons décrite ci-haut, mais en introduisant un champ source qui n'est pas diagonal dans la base des spins

$$\phi_t = \begin{pmatrix} 0 & \phi_- \\ \phi_+ & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

La fonction de partition définie en présence de ce champ source est ainsi

$$Z[\phi_t] = \langle T_\tau e^{-c_\uparrow^\dagger(\bar{1})c_\downarrow(\bar{2})\phi_-(\bar{1},\bar{2}) - c_\downarrow^\dagger(\bar{1})c_\uparrow(\bar{2})\phi_+(\bar{1},\bar{2})} \rangle, \quad (2.40)$$

et la fonction de Green en présence du champ source est maintenant une matrice

$$\mathbf{G}_t(1,2)_{\phi_t} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{\uparrow\uparrow}(1,2)_{\phi_t} & \mathcal{G}_{\uparrow\downarrow}(1,2)_{\phi_t} \\ \mathcal{G}_{\downarrow\uparrow}(1,2)_{\phi_t} & \mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}(1,2)_{\phi_t} \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Des calculs analogues à ceux effectués dans le canal longitudinal peuvent être réalisés dans le canal transverse, tel que détaillé dans la référence [98]. Le résultat final est

$$\Sigma_\sigma^{(2),t}(\mathbf{k}, ik_n) = U \frac{n}{2} + \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (2.42)$$

Nous obtenons la forme finale de la self-énergie au second niveau d'approximation en TPSC en prenant la valeur moyenne des contributions provenant du canal transverse et du canal longitudinal

$$\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = U \frac{n}{2} + \frac{U}{8} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} (3U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (2.43)$$

L'équation 2.43 pour la self-énergie respecte la symétrie de croisement. De plus, comme nous le verrons plus en détail au chapitre 6, cette équation satisfait le résultat exact

$$\text{Tr} \Sigma^{(2)} \mathcal{G}^{(1)} = U \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle. \quad (2.44)$$

Finalement, la fonction de Green avec interaction de la TPSC est

$$\mathcal{G}_\sigma^{(2)}(k) = \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu^{(2)} - \Sigma_\sigma^{(2)}(k)}. \quad (2.45)$$

Le potentiel chimique au deuxième niveau d'approximation  $\mu^{(2)}$  peut prendre une valeur différente du potentiel chimique  $\mu^{(1)}$  au premier niveau d'approximation. En effet, en TPSC, nous mainte-

nous la densité  $n$  constante. Les potentiels chimiques calculés au premier et au deuxième niveaux d'approximation sont obtenus de façon à ce que les fonctions de Green maintiennent cette densité :  $2\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0^-) = 2\mathcal{G}_\sigma^{(2)}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0^-) = n$ .

## 2.3 Conclusion

---

Dans ce chapitre, nous avons introduit la TPSC sous ses aspects qualitatifs (section 2.1) et mathématiques (section 2.2). Nous avons énuméré plusieurs applications de la TPSC à des problèmes liés au modèle de Hubbard, ainsi que ses extensions et limitations. Nous avons obtenu une expression pour la self-énergie de la TPSC, l'équation 2.43, qui peut être utilisée pour le calcul des propriétés physiques du modèle de Hubbard. Enfin, fait important, nous avons mis en lumière les bénéfices d'utiliser l'ansatz TPSC symétrique. Cet ansatz a été retenu pour tous les calculs présentés dans cette thèse.

Nous référerons au contenu de ce chapitre tout au long de cette thèse puisque l'approche TPSC y est centrale. Les résultats présentés dans le cadre de cette thèse font partie d'une liste croissante de travaux récents portant sur l'application, l'extension et l'amélioration de la TPSC, montrant ainsi la résurgence de l'utilisation de cette approche pour le modèle de Hubbard au cours des dernières années. Dans les chapitres à venir, nous appliquons la TPSC à des problèmes spécifiques et nous visitons des extensions visant à élargir son domaine d'application.

## **Deuxième partie**

# **TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande et cuprates dopés en électrons**

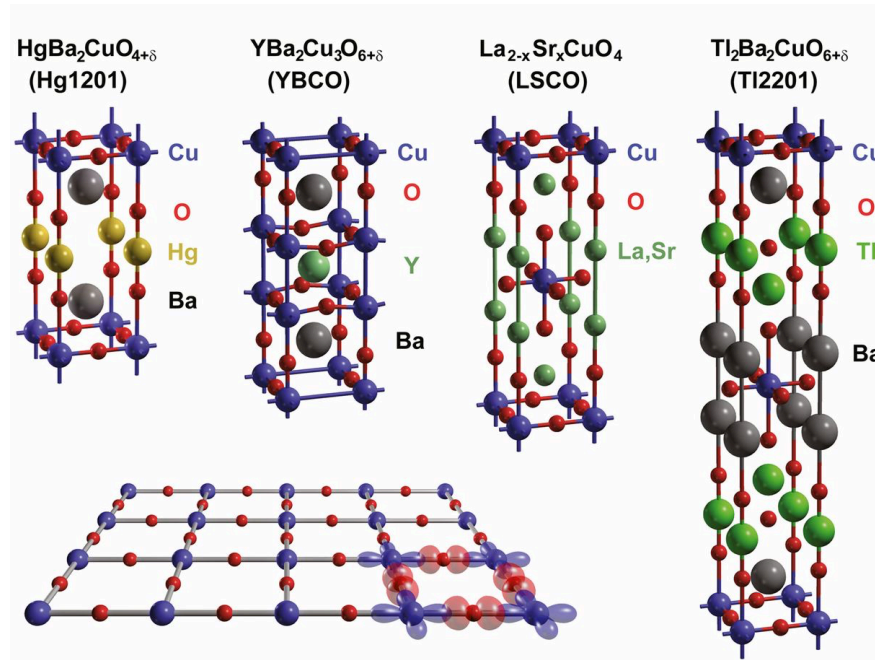
## Chapitre 3

# Cuprates dopés en électrons

En 1986, la découverte de la supraconductivité dans le composé  $\text{Ba}_x\text{La}_{5-x}\text{Cu}_5\text{O}_{5(3-y)}$  a ravivé un engouement exceptionnel pour la recherche en supraconductivité [18]. Les chercheurs Bednorz et Müller ont reçu le prix Nobel de physique l'année suivante, en 1987, pour leur découverte de la supraconductivité dans cette céramique. Cette même année, une session organisée à la dernière minute lors de la conférence du March Meeting de l'APS a accueilli une cinquantaine de présentations concernant la supraconductivité dans les cuprates. Cet événement est aujourd'hui connu sous le nom de "Woodstock de la physique". L'intérêt initial entourant les cuprates est dû à leur température critique élevée. Plusieurs de ces matériaux ont en effet une température critique supérieure à la température de liquéfaction de l'azote, ce qui facilite grandement leur étude expérimentale, et permet d'envisager une facilitation de leurs applications concrètes.

La famille des cuprates englobe une vaste gamme de matériaux ayant des structures différentes. La figure 3.1 illustre quatre de ces matériaux : les supraconducteurs  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ ,  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  et  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$ . Malgré leurs formules chimiques et structures variées, tous ces cuprates peuvent être décomposés en des éléments communs. Ils comportent tous des plans bi-dimensionnels de cuivre et d'oxygène, aussi illustrés à la figure 3.1. Les régions entre les plans de cuivre et d'oxygène sont appelées réservoirs de charges. De plus, à dopage nul, les composés parents sont des isolants de Mott en raison des corrélations électroniques fortes dans ces plans. Dans la figure 3.1, tous les matériaux représentés sont des cuprates dopés en trous. À dopage nul, il est possible de s'attendre à ce que le nombre d'électrons dans la dernière orbitale  $d$  du cuivre dans les plans de cuivre et d'oxygène soit  $n = 1$ . Le dopage en trou implique que cette densité décroît par une quantité généralement notée  $p$  :  $n = 1 - p < 1$ .

Les cuprates peuvent être séparés en deux familles distinctes : les cuprates dopés en trous abordés au paragraphe précédent, et les cuprates dopés en électrons. Nous présentons à la figure 3.2 un schéma de la structure d'un cuprate dopé en électrons ayant la formule chimique  $\text{Re}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ , où  $\text{Re}$  est un élément de la classe des terres rares : Nd, Pr, La. Le dopage dans ces matériaux est fait

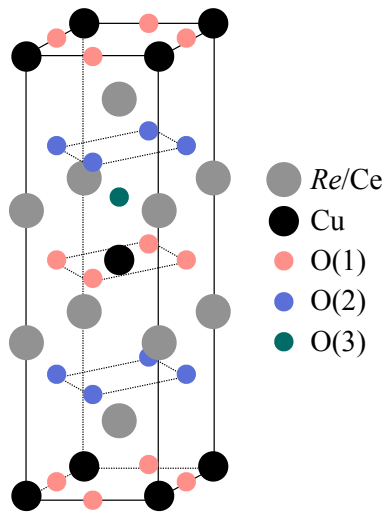


**FIGURE 3.1** Schémas représentant la structure cristalline de quelques cuprates dopés en trous. L'élément commun à ces cuprates et le plan de cuivre-oxygène, représenté en bas à gauche. La figure est tirée de la référence [134].

par la substitution d'une proportion des terres rares par du cérium. Dans les cuprates dopés en électrons, la structure propre inclut deux sites d'oxygène distincts, notés O(1) (oxygène dans le plan de cuivre et d'oxygène) et O(2) (oxygène dans les réservoirs de charge). Les échantillons observés expérimentalement contiennent généralement une certaine quantité d'impuretés d'oxygène aux sites O(3), soit directement au-dessus (ou en-dessous) des atomes de cuivre [135].

Le coeur de la physique des cuprates, qu'ils soient dopés en trous comme en électrons, est associé aux plans de cuivre et d'oxygène : c'est dans ces plans que la supraconductivité, et également d'autres ordres comme l'antiferromagnétisme et l'ordre de densité de charge (dans certains matériaux), sont observés. La surface de Fermi telle que vue en ARPES dans les échantillons dopés possède un caractère bidimensionnel [136,137]. Cet aspect bidimensionnel des cuprates explique pourquoi il est courant de les modéliser par le modèle de Hubbard en deux dimensions sur un réseau carré. Dans cette simplification du problème, on considère une orbitale par cellule unité. Le demi-remplissage, associé à la densité  $n = 1$  électron par site, correspond au cas non-dopé.

Dans ce court chapitre, nous abordons quelques propriétés expérimentales des cuprates dopés en électrons afin de mettre les chapitres suivants en contexte. Nous présentons d'abord leur diagramme de phase à la section 3.1. Ensuite, le sujet de la section 3.2 est le pseudogap antiferromagnétique, un concept clé qui sera au coeur des chapitres de résultats de cette thèse. Les références [136,138,139] offrent des revues complètes concernant les cuprates dopés en électrons.



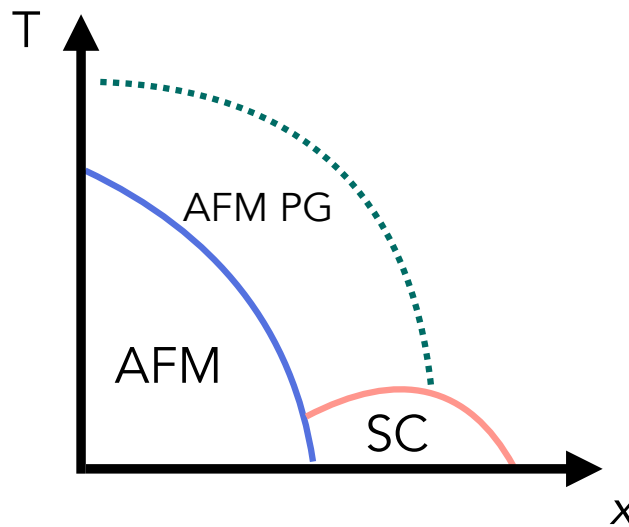
**FIGURE 3.2** Schéma représentant la structure cristalline d'un cuprate dopé en électrons ayant la formule chimique  $Re_{2-x}Ce_xCuO_4$ .

### 3.1 Diagramme de phases des cuprates dopés en électrons

La figure 3.3 illustre le diagramme de phase d'un cuprate dopé en électrons de façon schématique. Il peut être comparé au diagramme de phase du cuprate dopé en électrons  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$  (NCCO) construit à partir de plusieurs mesures expérimentales présenté dans la référence [102]. Les différentes phases présentes dans le matériau y sont illustrées en fonction de la température  $T$  et de la concentration en cérium  $x$ . Il est commun d'interpréter la concentration en cérium comme étant équivalente au dopage en électrons. Notons toutefois que les cuprates dopés en électrons subissent un processus de recuit afin de pouvoir devenir supraconducteurs et que cette étape de la croissance peut avoir un effet sur le dopage [140]. Le dopage peut être catégorisé en régions distinctes par rapport au dopage dit optimal, correspondant à l'endroit où la température critique de la supraconductivité est la plus élevée. Dans NCCO, le dopage optimal est  $x = 0.15$ . Un matériau est dit sous-dopé lorsque le dopage est inférieur au dopage optimal, et sur-dopé dans le cas contraire.

À dopage nul, le composé parent  $Nd_2CuO_4$  est un isolant de Mott antiferromagnétique, reflet de l'importance des interactions électroniques dans ce matériau. La phase antiferromagnétique s'étend jusqu'à des dopages élevés. Selon des mesures de diffusion inélastique de neutrons, dans NCCO, le point critique quantique antiferromagnétique est situé au dopage  $x \simeq 0.13$ , soit dans le régime sous-dopé. Notons toutefois que plusieurs mesures d'oscillations quantiques ont montré que la reconstruction de la surface de Fermi, signature de l'ordre antiferromagnétique, persiste dans le régime sur-dopé des cuprates dopés en électrons jusqu'à au moins  $x = 0.17$  [141–143].

Enfin, la phase supraconductrice de NCCO est caractérisée par son dopage optimal à  $x = 0.15$  et sa forme de dôme. Le début de la phase supraconductrice se situe autour de  $x = 0.13$  et s'étend



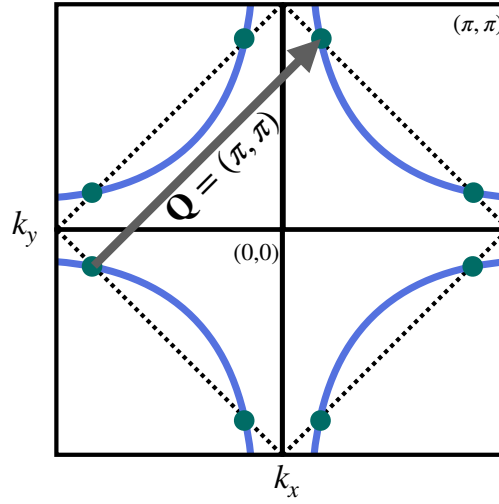
**FIGURE 3.3** Schéma du diagramme de phases d'un cuprate dopé en électrons en fonction de la température  $T$  et du dopage  $x$ . Les phases représentées sont l'antiferromagnétisme (ligne bleue, AFM) et la supraconductivité (ligne rose, SC). La ligne verte pointillée délimite le pseudogap antiferromagnétique..

jusqu'à la limite de solubilité du cérium dans le matériau,  $x \simeq 0.18$  [102]. La température critique maximale dans NCCO ne dépasse pas 30K.

## 3.2 Pseudogap antiferromagnétique

### 3.2.1 Signatures expérimentales

Les cuprates supraconducteurs sont très étudiés pour de nombreuses de leurs particularités allant au-delà de leur supraconductivité à haute température. L'une de leurs propriétés les plus intrigantes est le pseudogap : dans leur état normal (non-supraconducteur), une perte de poids spectral se produit à certains vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$  au niveau de Fermi [137]. Dans le cas des cuprates dopés en électrons, des mesures d'ARPES montrent une perte de poids spectral dans l'état normal à des vecteurs d'onde appelés les *points chauds*. Ces vecteurs d'onde correspondent aux endroits où la surface de Fermi croise la zone de Brillouin antiferromagnétique [144–148]. Nous illustrons les points chauds à la figure 3.4. Le pseudogap vu par les mesures d'ARPES est représenté par la figure 3 de la référence [144] et la figure 1 de la référence [146]. Nous appelons le pseudogap tel qu'il se produit dans les cuprates dopés en électrons, c'est-à-dire aux points chauds, le pseudogap antiferromagnétique (AFM). La perte de poids spectral a également été détectée par la conductivité optique [149,150], bien que cette technique ne puisse pas déterminer l'endroit précis sur la surface de Fermi où elle se produit. Le pseudogap antiferromagnétique a été relié à des fluctuations de densité d'onde de spin commensurables (au vecteur d'onde  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ ), que nous appelons fluctuations



**FIGURE 3.4** Schéma représentant les points chauds (points verts) sur la surface de Fermi (courbes bleues). Les points chauds se situent à l'endroit où la surface de Fermi croise la zone de Brillouin antiferromagnétique (lignes pointillées). Ils sont ainsi reliés par le vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  illustré par la flèche grise.

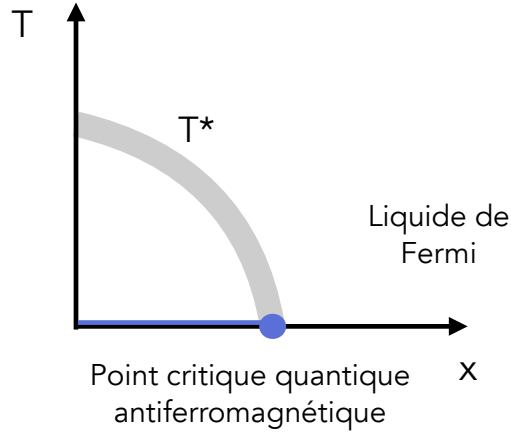
de spins antiferromagnétiques. Ce lien a été fait expérimentalement [102, 151] et théoriquement [21, 22, 74, 152]. Dans le diagramme de phase, la région où le pseudogap antiferromagnétique est observé est délimitée par une température de *crossover* appelée  $T^*$ . Enfin, dans le cuprate dopé en électrons  $\text{Pr}_{1.3-x}\text{La}_{0.7}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (PLCCO), il a été montré que la disparition du pseudogap antiferromagnétique par la méthode de recuit protégé (*protect annealing* en anglais) pourrait être due à l'atténuation des fluctuations antiferromagnétiques causée par cette méthode de recuit [147].

### 3.2.2 Lien avec le modèle de Hubbard : critère de Vilk

Tel que mentionné plus tôt, il est courant de modéliser les cuprates par le modèle de Hubbard sur un réseau carré. Nous montrons à la figure 3.5 un schéma du diagramme de phase obtenu dans le régime d'interaction faible du modèle, soit pour des valeurs de  $U$  faibles qui ne mènent pas à la transition de Mott.

Dans le modèle de Hubbard en deux dimensions, un pseudogap antiferromagnétique peut apparaître dans une vaste gamme de températures en tant que précurseur de l'état fondamental antiferromagnétique. L'état antiferromagnétique n'apparaît qu'à température nulle en deux dimensions, en raison du théorème de Mermin-Wagner qui empêche la formation d'un ordre à longue portée à température finie. Le pseudogap antiferromagnétique apparaît dans le régime d'interaction faible à intermédiaire lorsque le critère de Vilk est satisfait, soit lorsque la longueur de corrélation de spin  $\xi_{sp}$  devient plus grande que la longueur d'onde thermique de de Broglie  $\xi_{th} = \hbar v_F / \pi k_B T$ , où  $v_F$  est la vitesse de Fermi [22, 74, 152, 153]. Comme dans le cas des cuprates dopés en électrons, ce pseudogap





**FIGURE 3.5** Schéma du diagramme de phase obtenu pour le modèle de Hubbard en deux dimensions dans le régime d'interaction faible. À température nulle, une phase antiferromagnétique s'étend jusqu'à un point critique quantique antiferromagnétique. À température non-nulle, la température  $T^*$  délimite une région où les fluctuations de spins mènent à l'ouverture d'un pseudogap antiferromagnétique (sous la courbe grise). À fort dopage, le système est un liquide de Fermi.

apparaît aux points chauds sur la surface de Fermi. Nous reviendrons à la démonstration du critère plus tard dans cette thèse à la section 4.4 du chapitre 4. D'un point de vue phénoménologique, ce critère compare la taille du paquet d'onde électronique (la longueur d'onde thermique de de Broglie) à la taille caractéristique d'un ordre antiferromagnétique à courte portée (la longueur de corrélation antiferromagnétique). Lorsque le critère de Vilk est satisfait ( $\xi_{sp} > \xi_{th}$ ), les électrons évoluent dans un milieu qui, de façon effective, semble être un ordre antiferromagnétique à longue portée. Cela mène à l'apparition du pseudogap antiferromagnétique défini par une température de *crossover*  $T^*$  et à son association à un précurseur à température non-nulle de l'état fondamental antiferromagnétique.

Expérimentalement, il a été montré que la température du pseudogap  $T^*$  d'échantillons sous-dopés de NCCO satisfait également le critère de Vilk [102]. Plus précisément, pour ces échantillons,  $\xi_{sp}(T^*) \simeq 2.6\xi_{th}(T^*)$ . Toutefois, le critère de Vilk n'est pas satisfait dans les échantillons au dopage optimal [102] et surdopés [148] dans lesquels la longueur de corrélation antiferromagnétique est petite. Il est ainsi pertinent d'étudier comment des fluctuations de spins à courte portée peuvent mener à un pseudogap antiferromagnétique. Ce sujet sera abordé au chapitre suivant sous la loupe de l'effet réciproque du désordre et des fluctuations de spins.

## Chapitre 4

# Effet du désordre dans les cuprates dopés en électrons

Ce chapitre est, en majeure partie, une traduction de l'article [2]. Les annexes présentes dans l'article ont été intégrées au texte et certains développements mathématiques ont été étoffés dans un but pédagogique.

### 4.1 Motivation expérimentale : pseudogap antiferromagnétique dans les cuprates dopés en électrons

---

Au chapitre 3, nous avons abordé le concept du pseudogap antiferromagnétique dans les cuprates dopés en électrons. Nous avons vu que ce même type de pseudogap est présent dans le régime d'interaction faible du modèle de Hubbard en deux dimensions. Dans le modèle de Hubbard, le critère de Vilk est associé à l'ouverture du pseudogap :  $\xi_{sp} > \xi_{th}$ , où  $\xi_{sp}$  est la longueur de corrélation antiferromagnétique et  $\xi_{th} = \hbar v_F / \pi k_B T$  est la longueur thermique de de Broglie. Ce critère est également respecté dans le régime sous-dopé des cuprates dopés en électrons, mais n'est plus vérifié le long de la température du *crossover*  $T^*$  au-delà du dopage optimal. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à une possible explication pour ce désaccord entre l'expérience et la théorie.

L'un des mécanismes proposés initialement pour expliquer l'échec du critère de Vilk au dopage optimal dans NCCO est que le désordre pourrait introduire une nouvelle échelle de longueur pertinente à basse température dans les cuprates dopés en électrons [102]. Plusieurs facteurs influencent le niveau de désordre dans ces matériaux, notamment le dopage en cérium, qui introduit des impuretés, des déformations locales du réseau et une contraction de l'axe  $c$  dans  $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$  [154]. Dans sa forme idéale, la structure des cuprates dopés en électrons comme  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (PCCO)

et NCCO, appelée  $T'$ , ne contient que deux sites d'oxygène non-équivalents. La présence d'ions d'oxygène en position apicale dans une fraction de sites interstitiels qui devraient être vacants est une autre source de désordre [135]. Nous avons illustré ces oxygènes non-équivalents à la figure 3.2 du chapitre 3. De plus, les cuprates dopés en électrons ne sont pas supraconducteurs au terme du processus de croissance et nécessitent une étape supplémentaire de recuit (réduction en oxygène) [155]. Les conséquences du processus de recuit et ses effets sur le désordre demeurent débattus [135, 156–160]. Des expériences de diffraction de neutrons sur des monocristaux de  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$  montrent que des oxygènes apicaux sont retirés par le processus de recuit, avec un taux d'occupation passant de  $\sim 0.10$  dans les échantillons oxygénés à  $\sim 0.04$  dans les échantillons recuits [135, 156]. Des études de spectroscopie Raman et de transmission infrarouge ont toutefois montré que la réduction a un effet différent selon le niveau de dopage : les atomes d'oxygène dans les plans  $(\text{Pr}, \text{Nd})\text{O}_2$  sont retirés par le processus de recuit dans les échantillons sous-dopés, tandis que les atomes d'oxygène dans les plans  $\text{CuO}_2$  sont retirés dans les échantillons au dopage optimal [157–159]. Ces études suggèrent que le retrait d'oxygène dans les plans  $\text{CuO}_2$  des échantillons dopés atténue l'antiferromagnétisme et permet la supraconductivité. Comprendre l'effet du désordre sur les fluctuations antiferromagnétiques dans les cuprates dopés en électrons pourrait ainsi être pertinent pour la compréhension de l'effet du recuit dans ces matériaux. Plus récemment, la diffusion de phonons sur des défauts en présence de fluctuations de spins à courte portée a été proposée comme étant le mécanisme derrière le large effet Hall thermique des phonons observé dans les cuprates dopés en électrons [160]. Ce nouveau contexte amène un intérêt renouvelé pour l'étude de l'effet combiné du désordre et des fluctuations de spins dans ces matériaux.

D'un point de vue théorique, l'effet combiné du désordre, des fluctuations de spins et des points chauds a été étudié de façon phénoménologique [161]. Cette approche est une généralisation d'approches phénoménologiques pour le cas propre (sans désordre) [162–165] et ne permet pas d'obtenir un critère clair pour l'ouverture d'un pseudogap. Le désordre a été le sujet de plusieurs autres études, notamment celles mentionnées dans la revue [166]. Par exemple, l'effet du désordre dans le modèle de Hubbard a été étudié avec plusieurs méthodes [167–175], mais aucune d'elle ne s'est penchée sur la question spécifique de l'effet du désordre sur la température de *crossover*  $T^*$ , le point critique antiferromagnétique, ou le critère pour l'apparition du pseudogap antiferromagnétique.

Dans le projet de doctorat qui fait l'objet de l'article [2], nous nous penchons sur cette question en généralisant la TPSC au cas incluant le désordre. Pour ce faire, nous utilisons la technique de la moyenne sur les impuretés. Nous travaillons dans la limite propre et négligeons les effets de localisation faible [176, 177]. La limite propre correspond au cas où le désordre est faible, soit lorsque le libre parcours moyen associé au désordre est beaucoup plus grand que l'inverse de la norme du vecteur d'onde de Fermi. Puisque le pseudogap antiferromagnétique apparaît comme un précurseur de l'état antiferromagnétique en deux dimensions, le théorème de Mermin-Wagner doit être satisfait. Cette exigence est satisfaite par la TPSC, tel que mentionné au chapitre 2.

Dans ce chapitre, nous présentons d'abord la méthodologie pour l'étude du désordre dans le modèle de Hubbard avec la TPSC dans la section 4.2. Nous discutons ensuite de l'effet du désordre sur la température  $T^*$  et sur le point critique antiferromagnétique à la section 4.3, et de l'effet du désordre sur le critère de Vilk à la section 4.4. Enfin, à la section 4.5, nous présentons une approche phénoménologique pour la fonction de Lindhard en présence de désordre.

## 4.2 Méthodologie : étude du désordre dans le modèle de Hubbard avec la TPSC

---

Nous avons déjà introduit le modèle de Hubbard à une bande au chapitre 1 ainsi que la méthode TPSC au chapitre 2. Dans cette section, nous précisons les paramètres du modèle que nous étudions ici avant de décrire l'extension de la TPSC au cas désordonné.

La relation de dispersion que nous considérons est

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) - 4t' \cos(k_x) \cos(k_y) - 2t''(\cos(2k_x) + \cos(2k_y)), \quad (4.1)$$

où le pas du réseau est défini par l'unité  $a = 1$ . Nous posons le paramètre de saut aux premiers voisins  $t = 1$  comme unité d'énergie. Dans le but d'étudier un cas réaliste, nous choisissons les paramètres de saut aux deuxièmes et troisièmes voisins  $t' = -0.175$ ,  $t'' = 0.05$ , ainsi que l'interaction de Hubbard  $U = 5.75$ . Ces paramètres permettent d'obtenir un bon accord entre la théorie et l'expérience pour le spectre ARPES du cuprate dopé en électrons NCCO pour des remplissages supérieurs à  $n = 1.1$  [21]. Nous travaillons toujours dans un système d'unités où les constantes fondamentales sont égales à l'unité :  $\hbar = 1$  et  $k_B = 1$ .

Pour inclure les effets du désordre dans la TPSC, nous utilisons la technique de la moyenne sur les impuretés [178]. Cela résulte en l'addition d'une self-énergie due au désordre dans la fonction de Green non-interagissante

$$\mathcal{G}_0^{dis}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu_0^{dis} - \Sigma^{dis}(ik_n)}, \quad (4.2)$$

$$\Sigma^{dis}(ik_n) = -\frac{i}{2\pi\tau} \left( \arctan\left(\frac{\epsilon_{max}}{k_n}\right) - \arctan\left(\frac{\epsilon_{min}}{k_n}\right) \right), \quad (4.3)$$

où  $\epsilon_{min}$  est la valeur minimale de  $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0$ ,  $\epsilon_{max}$  est sa valeur maximale, et  $\mu_0^{dis}$  et  $\mu_0$  sont les potentiels chimiques qui permettent d'obtenir les bons remplissages calculés avec les fonctions de Green avec et sans désordre respectivement. Le paramètre qui détermine le niveau de désordre est le temps de vie  $\tau$ , qui est fini en présence de désordre et infini dans le cas sans désordre. Pour obtenir la self-énergie définie à l'équation 4.3, nous négligeons les corrections de vertex dans le diagramme pour

la diffusion sur les impuretés et ne considérons que les contributions près du niveau de Fermi [178]. Les approximations que nous faisons pour obtenir les équations 4.2 et 4.3 ne sont valides que dans la limite propre, soit lorsque  $k_F v_F \tau \gg 1$ . Le libre parcours moyen associé,  $l$ , est relié au temps de vie par  $l = v_F \tau$ . Dans notre modèle, la limite propre correspond approximativement à  $\tau > 1$ .

Nous montrons maintenant les étapes de calcul permettant d'obtenir les équations 4.2 et 4.3, en suivant la méthode de la moyenne sur les impuretés [178]. Le hamiltonien d'intérêt est

$$H = H_0 + V^{dis}, \quad (4.4)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (4.5)$$

$$V^{dis} = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j=1}^{N_i} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \quad (4.6)$$

Dans ce qui précède,  $i$  est un indice de site,  $N_s$  est le nombre de sites dans le réseau,  $\mathbf{r}_i$  est la position du site  $i$  dans le réseau,  $j$  est un indice dénotant une impureté,  $N_i$  est le nombre d'impuretés dans le réseau,  $\mathbf{R}_j$  est la position de l'impureté  $j$  dans le réseau, et  $v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$  est le potentiel au site  $i$  dû à l'impureté  $j$ . En transformée de Fourier, le hamiltonien des impuretés est

$$V^{dis} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma j} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}, \quad (4.7)$$

où  $v(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$  est la transformée de Fourier de  $v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ .

Dans la fonction de Green, le potentiel dû aux impuretés apparaît de la façon suivante

$$\mathcal{G}_0^{dis}(1, 2) = \mathcal{G}_0(1, 2) + \mathcal{G}_0(1, \bar{1}) V(\bar{1}) \mathcal{G}_0(\bar{1}, 2) + \mathcal{G}_0(1, \bar{1}) V(\bar{1}) \mathcal{G}_0(\bar{1}, \bar{2}) V(\bar{2}) \mathcal{G}_0(\bar{2}, 2) + \dots \quad (4.8)$$

La technique de la moyenne sur les impuretés nous mène à devoir calculer  $\langle V(\mathbf{r}) \rangle_{imp}$  et  $\langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \rangle_{imp}$ , où le symbole  $\langle \cdot \rangle_{imp}$  dénote une moyenne sur tous les sites d'impuretés. Par définition, le potentiel est

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{q}j} v(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j}. \quad (4.9)$$

La première valeur moyenne d'intérêt est alors

$$\begin{aligned}
\langle V(\mathbf{r}) \rangle_{imp} &= \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{q}} \sum_j v(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \langle e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j} \rangle_{imp}, \\
&= \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \sum_j \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j}, \\
&= \frac{N_i}{N_s} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{q},0}, \\
&= \frac{N_i}{N_s} v(\mathbf{q} = 0).
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Nous définissons la densité d'impuretés  $n_{imp} \equiv \frac{N_i}{N_s}$ . Nous posons également  $v(\mathbf{q} = 0) \equiv 0$  sans perte de généralité. Par conséquent,

$$\langle V(\mathbf{r}) \rangle_{imp} = 0. \tag{4.11}$$

Nous calculons maintenant la moyenne sur les impuretés du produit de deux potentiels d'impureté

$$\begin{aligned}
\langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \rangle_{imp} &= \frac{1}{N_s^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} \sum_{j j'} v(\mathbf{q}_1) v(\mathbf{q}_2) e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \langle e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{R}_{j'}} \rangle_{imp}, \\
&= \frac{1}{N_s^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} v(\mathbf{q}_1) v(\mathbf{q}_2) e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \left[ \sum_{j \neq j'} \langle e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{R}_j} \rangle_{imp} \langle e^{-i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{R}_{j'}} \rangle_{imp} + \sum_j \langle e^{-i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{R}_j} \rangle_{imp} \right].
\end{aligned}$$

Ayant posé  $v(\mathbf{q} = 0) \equiv 0$ , le premier terme dans les crochets est nul. Nous obtenons donc

$$\begin{aligned}
\langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \rangle_{imp} &= \frac{1}{N_s^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} v(\mathbf{q}_1) v(\mathbf{q}_2) e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \sum_j \langle e^{-i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{R}_j} \rangle_{imp}, \\
&= \frac{N_i}{N_s^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} v(\mathbf{q}_1) v(\mathbf{q}_2) e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \delta_{\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2}, \\
&= \frac{n_{imp}}{N_s} \sum_{\mathbf{q}} |v(\mathbf{q})|^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}.
\end{aligned}$$

Nous faisons ensuite l'approximation que le potentiel est une constante près du niveau de Fermi :  $|v(\mathbf{q})|^2 \simeq |v|^2$ . Nous obtenons donc

$$\begin{aligned}
\langle V(\mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_2) \rangle_{imp} &= \frac{n_{imp}}{N_s} |v|^2 \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}, \\
&= n_{imp} |v|^2 \delta_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2}.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Nous substituons les moyennes sur le potentiel dans la fonction de Green donnée par l'équation 4.8. Nous ne conservons que les moyennes sur le produit de deux potentiels, qui sont les termes

dominants dans la limite propre. Nous obtenons

$$\mathcal{G}_0^{dis}(1, 2) = \mathcal{G}_0(1, 2) + \mathcal{G}_0(1, \bar{1})\Sigma^{dis}(\bar{1}, \bar{2})\mathcal{G}_0^{dis}(\bar{1}, 2), \quad (4.13)$$

où la self-énergie due au désordre est

$$\begin{aligned} \Sigma^{dis}(1, 2) &= \langle V(1)V(2) \rangle \mathcal{G}_0(1, 2), \\ &= n_{imp}|v|^2 \delta_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} \mathcal{G}_0(1, 2). \end{aligned} \quad (4.14)$$

En transformée de Fourier, nous obtenons

$$\begin{aligned} \Sigma^{dis}(\mathbf{k}, ik_n) &= n_{imp}|v|^2 \sum_{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \delta_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, ik_n), \\ &= n_{imp}|v|^2 \mathcal{G}_0(\mathbf{r} = 0, ik_n), \\ &= n_{imp}|v|^2 \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}', ik_n). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Nous pouvons faire le calcul approximatif de la self-énergie en transformant la somme sur les vecteurs d'onde en une intégrale, en utilisant la notation  $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0 \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}$  et en définissant  $\rho(\epsilon)$  la densité d'états,

$$\begin{aligned} \Sigma^{dis}(\mathbf{k}, ik_n) &= n_{imp}|v|^2 \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}'}} , \\ &= n_{imp}|v|^2 \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{ik_n - \epsilon}, \\ &= -in_{imp}|v|^2 \int_{\epsilon_{min}}^{\epsilon_{max}} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{k_n}{k_n^2 + \epsilon^2}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Nous sortons maintenant la densité d'états au niveau de Fermi de l'intégrale, et nous obtenons finalement

$$\Sigma^{dis}(\mathbf{k}, ik_n) = -in_{imp}|v|^2 \rho(0) \left[ \arctan\left(\frac{\epsilon_{max}}{k_n}\right) - \arctan\left(\frac{\epsilon_{min}}{k_n}\right) \right]. \quad (4.17)$$

Cette équation est équivalente à la définition donnée précédemment à l'équation 4.3, où nous posons de plus la définition suivante pour le temps de vie  $\tau$

$$\tau \equiv \frac{1}{2\pi n_{imp}} |v|^2 \rho(0). \quad (4.18)$$

En pratique, nous ajoutons le désordre dans nos calculs TPSC en remplaçant la fonction de Green non-interagissante par la fonction de Green avec désordre  $\mathcal{G}_0^{dis}$  (équation 4.2). Nous calculons

ensuite la fonction de Lindhard non-interagissante par le produit de deux fonctions de Green

$$\chi_0^{dis}(\mathbf{r}, \tau) = -2\mathcal{G}_0^{dis}(\mathbf{r}, \tau)\mathcal{G}_0^{dis}(-\mathbf{r}, -\tau). \quad (4.19)$$

Nous négligeons les corrections de vertex dues au désordre lors du calcul de  $\chi_0^{dis}$ . Nous avons vérifié que ces corrections de vertex, nécessaires pour obtenir le pole de diffusion près du vecteur d'onde  $\mathbf{q} = 0$ , deviennent moins importantes près du vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  qui nous est d'intérêt ici [161].

Le reste du calcul TPSC s'effectue tel que décrit au chapitre 2, soit par le calcul des susceptibilités de spin et de charge, l'obtention des vertex irréductibles de spin et de charge par l'auto-cohérence des règles de somme et de l'ansatz TPSC, puis le calcul de la self-énergie au second niveau d'approximation. On inclut cette self-énergie dans le calcul de la fonction de Green avec interaction, ainsi que la self-énergie due au désordre (équation 4.3). Des corrections de vertex dues au désordre pourraient également être présentes dans l'expression de la self-énergie, mais nous les négligeons pour maintenir la cohérence avec le calcul des susceptibilités. L'ansatz TPSC (équation 2.23) demeure inchangé, mais la double occupation devrait maintenant être vue comme étant moyennée sur le désordre.

## 4.3 Effet du désordre sur $T^*$ et sur le point critique quantique

### 4.3.1 Poids spectral aux points chauds

Ayant introduit l'extension de la TPSC au cas désordonné, nous étudions maintenant l'effet du désordre sur le diagramme de phase du modèle. Pour ce faire, nous faisons des calculs à température fixe pour plusieurs valeurs de la densité  $n$  et obtenons le poids spectral aux points chauds  $A(\mathbf{k}_F, \omega)$ . Nous obtenons le spectre en fréquences réelles par le prolongement analytique Padé. Pour le prolongement analytique de Padé, nous utilisons l'implémentation en libre accès PyPade [179] basée sur l'algorithme présenté dans la référence [180]. Nous définissons la frontière du pseudogap antiferromagnétique,  $T^*$ , par la densité minimale à laquelle nous voyons une perte de poids spectral au niveau de Fermi aux points chauds. Nous illustrons ce processus à la figure 4.1. Nous contraignons nos calculs aux densités supérieures à  $n = 1.1$  en raison de nos choix de paramètres de saut et de l'interaction  $U$ .

Pour inclure le désordre, nous utilisons des valeurs de  $\tau$  basées sur des mesures expérimentales. Une température de Dingle  $T_D = 14$  K a été mesurée par des oscillations Shubnikov-de Haas dans un échantillon de NCCO au dopage optimal ( $n = 1.15$ ) [181]. Par la relation entre la température de Dingle et le taux de diffusion,  $T_D = \hbar/2\pi k_B \tau$ , en prenant  $t = 350$  meV [21], nous obtenons



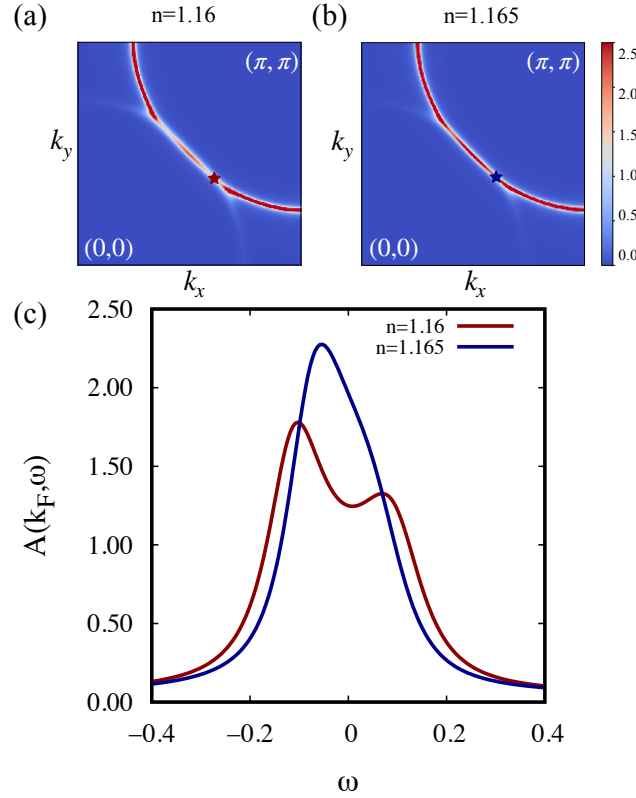
$\tau = 46$  en unités de  $1/t$ . Nous utilisons également le paramètre  $\tau = 25$  de façon à considérer des échantillons qui pourraient être plus désordonnés. Par exemple, des mesures de la résistivité donnent  $l \simeq 25a$  pour des couches minces de PCCO au dopage optimal [139, 182]. En prenant  $l = v_F \tau$ ,  $a = 4$  [139], et  $v_F = 2$  eV [183], nous obtenons  $\tau \simeq 17.5$  en unités de  $1/t$ , une fois de plus avec  $t = 350$  meV. Dans la gamme de températures et de densités que nous étudions, les valeurs  $\tau = 46$  et  $\tau = 25$  considérées ici correspondent approximativement aux libres parcours moyens  $l \simeq 120a$  et  $l \simeq 65a$  respectivement dans nos calculs.

Les diagrammes de phase résultants sont montrés dans la figure 4.2, à gauche. Nous y comparons les trois cas mentionnés plus haut : sans désordre,  $\tau = 46$  et  $\tau = 25$ . Nos calculs montrent que le désordre déplace le *crossover*  $T^*$  vers des densités plus faibles. Comme nous le montrerons maintenant, dans nos calculs pour ce modèle, le point critique quantique antiferromagnétique coïncide avec la densité où la température de *crossover*  $T^*$  peut être extrapolée à 0.

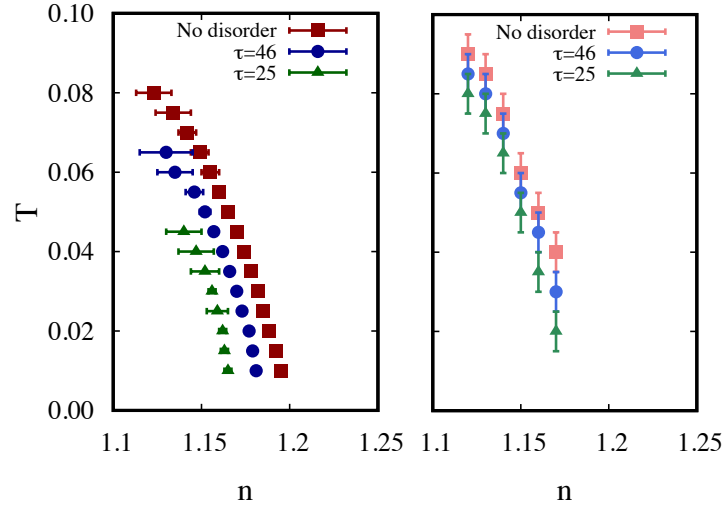
Dans le modèle que nous considérons, un point critique quantique antiferromagnétique est présent à température nulle à une densité supérieure au demi-remplissage. Toutefois, l'approche TPSC que nous utilisons pour résoudre le problème est une méthode formulée à température finie. Nous pouvons tout de même utiliser notre approche pour déterminer le point critique quantique antiferromagnétique par le calcul de la longueur de corrélation de spin à température finie. Nous calculons la longueur de corrélation de spin en fonction de la température et de la densité. La définition de la longueur de corrélation de spin est abordée plus loin dans ce chapitre à la sous-section 4.3.3. Pour des densités inférieures au point critique quantique, la longueur de corrélation augmente lorsque la température diminue. Pour des densités supérieures au point critique quantique, la longueur de corrélation de spin demeure petite et sature lorsque la température diminue.

Nous montrons nos résultats à la figure 4.3 pour les cas sans désordre, avec  $\tau = 46$  et avec  $\tau = 25$ . Nous montrons que le point critique est déplacé vers des densités plus faibles lorsque le désordre augmente, passant de  $n \simeq 1.20$  sans désordre à  $n \simeq 1.17$  pour  $\tau = 25$ . Nous pouvons également constater que le point critique quantique obtenu par la longueur de corrélation de spin est cohérent avec l'extrapolation à  $T = 0$  de l'estimé de  $T^*$  obtenu par le poids spectral montré dans la figure 4.2, à gauche.

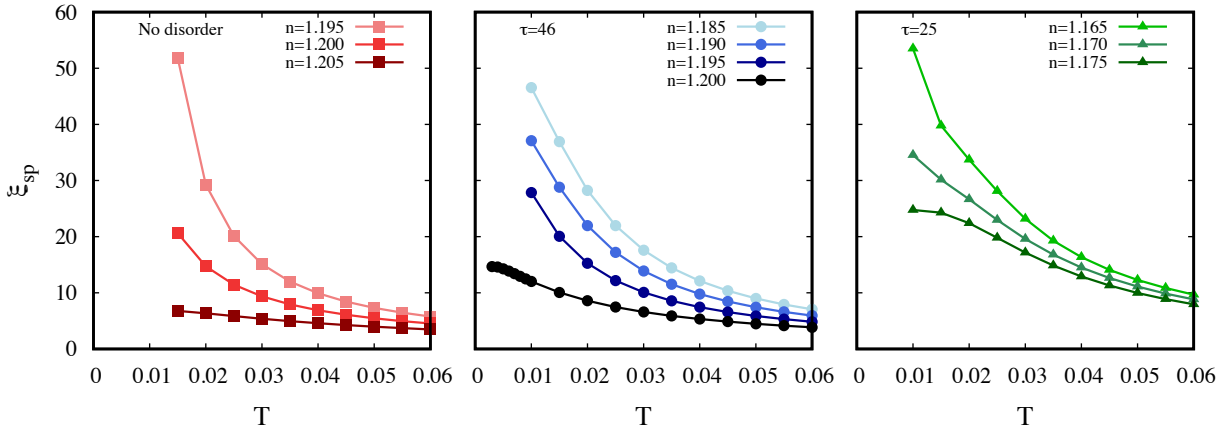
Ainsi, le point critique quantique antiferromagnétique est déplacé vers une densité plus faible lorsque le désordre augmente. Ce résultat est expliqué par l'élargissement de la surface de Fermi causé par le désordre, ce qui diminue l'emboîtement de la surface de Fermi et défavorise l'ordre antiferromagnétique.



**FIGURE 4.1** Illustration de l'obtention de la température du pseudogap antiferromagnétique  $T^*$  par le poids spectral calculé pour la température  $T = 0.02$  et le temps de vie dû au désordre  $\tau = 25$ . Les figures (a) et (b) montrent  $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$ , le poids spectral au niveau de Fermi ( $\omega = 0$ ) en fonction du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  dans un quart de la zone de Brillouin aux densités  $n = 1.16$  et  $1.165$  respectivement. Les étoiles sont placées sur l'un des points chauds  $\mathbf{k}_F$  où la surface de Fermi croise la zone de Brillouin antiferromagnétique. En (a), le pseudogap antiferromagnétique est clairement visible au point chaud pour  $n = 1.16$ . La figure (c) montre  $A(\mathbf{k}_F, \omega)$ , le poids spectral en fonction de la fréquence  $\omega$  aux points chauds  $\mathbf{k}_F$  définis par les étoiles dans les figures (a) et (b). Nous montrons que, à cette valeur de la température, une perte de poids spectral se produit au niveau de Fermi  $\omega = 0$  pour  $n = 1.16$ , mais pas pour  $n = 1.165$ , ce qui définit la frontière du pseudogap antiferromagnétique à cette température. Figure tirée de la référence [2].



**FIGURE 4.2** Température  $T^*$  délimitant le pseudogap antiferromagnétique sans désordre (carrés rouges), avec désordre  $\tau = 46$  (cercles bleus) et avec désordre  $\tau = 25$  (triangles verts). La figure de gauche montre le pseudogap tel qu’obtenu par le poids spectral aux points chauds  $A(\mathbf{k}_F, \omega)$ . La figure de droite montre la température  $T_{C_U}^*$  obtenue par la valeur maximale de la chaleur spécifique divisée par la température  $C_{U,n}/T$  pour une densité donnée. Figure tirée de la référence [2].



**FIGURE 4.3** Dépendance en température de la longueur de corrélation de spin en fonction du niveau de désordre. La figure de gauche montre le cas sans désordre pour les densités  $n = 1.195$ ,  $n = 1.200$  et  $n = 1.205$ . Le point critique quantique pour ce cas se situe autour de  $n = 1.2$  : la longueur de corrélation de spin augmente lorsque  $T \rightarrow 0$  pour cette densité, mais demeure très faible à basse température pour une densité légèrement supérieure  $n = 1.205$ . La figure du centre montre le résultat pour  $\tau = 46$  et la figure de droite pour  $\tau = 25$ , les deux cas avec désordre. Comme pour le cas sans désordre, nous trouvons le point critique quantique antiferromagnétique pour ces systèmes en regardant le comportement de la longueur de corrélation de spin à basse température. Nous trouvons que le point critique quantique est environ  $n = 1.195$  pour  $\tau = 46$  et  $n = 1.170$  pour  $\tau = 25$ . Tous les résultats montrés ici sont obtenus par des calculs où la convergence est atteinte sur un réseau de  $1024 \times 1024$  sites et avec 2048 fréquences de Matsubara. Figure tirée de la référence [2].

### 4.3.2 Chaleur spécifique

Une seconde façon de construire le diagramme de phase est d'étudier la chaleur spécifique. En deux dimensions, le théorème de Mermin-Wagner interdit un ordre antiferromagnétique à longue portée à température finie. Toutefois, des calculs pour le modèle de Hubbard bidimensionnel dans le régime d'interaction faible ont montré des pics dans la chaleur spécifique à basse température. Ces pics peuvent correspondre à l'échelle d'énergie des fluctuations de spins à courte portée qui peuvent être associées au *crossover*  $T^*$  [184]. Par conséquent, nous pouvons définir la température  $T^*$  à partir de la valeur maximale de la contribution des interactions électron-électron à la chaleur spécifique.

Nous désirons ainsi obtenir la contribution à la chaleur spécifique venant des interactions électron-électron que nous noterons  $C_{n,U}^{e-e}$ . Nous suivons la méthode de l'intégration de la constante de couplage, et plus précisément la référence [184], pour calculer la chaleur spécifique. En TPSC, il s'agit de la façon la plus fiable d'obtenir l'énergie libre. Nous commençons par la définition du grand potentiel canonique (normalisé par le nombre de sites  $N_s$ )

$$\Omega(T, \mu, U) = -\frac{T}{N_s} \ln \text{Tr} \left[ e^{-\beta(H - \mu N)} \right], \quad (4.20)$$

où  $H$  est le hamiltonien de Hubbard (équation 1.1), et  $\beta$  est l'inverse de la température. Ce potentiel peut être calculé par une intégrale sur l'interaction de Hubbard  $U$ . En effet, la dérivée du grand potentiel par rapport à  $U$  est la double occupation

$$\left( \frac{\partial \Omega(T, \mu, U)}{\partial U} \right)_{T, \mu} = \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle. \quad (4.21)$$

Alors, en intégrant sur  $U$ , nous obtenons

$$\begin{aligned} \int_0^U dU' \left( \frac{\partial \Omega(T, \mu, U)}{\partial U'} \right)_{T, \mu} &= \Omega(T, \mu, U) - \Omega^0(T, \mu), \\ \Rightarrow \Omega(T, \mu, U) &= \Omega^0(T, \mu) + \int_0^U dU' \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle, \end{aligned} \quad (4.22)$$

où  $\Omega^0(T, \mu)$  est le grand potentiel canonique calculé par le hamiltonien non-interagissant, et la double occupation  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  est une fonction de  $U$  et de la température. Nous calculons l'énergie libre normalisée par site par la transformée de Legendre

$$F(T, n, U) = \Omega(T, \mu(T, n, U), U) + \mu(T, n, U)n. \quad (4.23)$$

À partir de l'énergie libre, nous obtenons l'expression suivante pour la chaleur spécifique

$$\begin{aligned} C_{n,U}(T, n, U) &= -T \left( \frac{\partial^2 F(T, n, U)}{\partial T^2} \right)_{U,n}, \\ &= C_n^0(T, n) - T \int_0^U dU' \left( \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} \right)_{n,U'}, \end{aligned} \quad (4.24)$$

où la chaleur spécifique non-interagissante peut être calculée avec l'énergie par site

$$C_n^0(T, n) = \frac{1}{N_s} \left( \frac{\partial E^0(T, n)}{\partial T} \right)_n. \quad (4.25)$$

La contribution de l'interaction électron-électron à la chaleur spécifique,  $C_{n,U}^{e-e}(T, n, U)$ , est donc

$$C_{n,U}^{e-e}(T, n, U) = -T \int_0^U dU' \left( \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} \right)_{n,U'}. \quad (4.26)$$

En pratique, nous calculons la double occupation  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  à densité fixe  $n$  pour plusieurs valeurs de  $U$  afin d'effectuer une intégrale numérique par la règle de Simpson. Les dérivées par rapport à la température sont calculées par des différences finies.

Nous calculons donc  $C_{n,U}^{e-e}$  en fonction de la température  $T$  pour plusieurs valeurs de la densité  $n$ . Nous définissons  $T_{C_U}^*$  comme la température à laquelle  $C_{n,U}^{e-e}/T$  est maximale à une certaine densité  $n$ . Les résultats de  $T_{C_U}^*$  sont montrés à la figure 4.2, à droite. Nous y montrons les résultats pour les cas sans désordre, ainsi qu'avec les niveaux de désordre définis par  $\tau = 46$  et  $\tau = 25$ . Nous montrons qu'il y a un bon accord entre la tendance de  $T^*$  définie préalablement par le poids spectral et  $T_{C_U}^*$ . L'effet du désordre est toutefois plus marqué dans le calcul du poids spectral que dans celui de la chaleur spécifique. Ce résultat est dû au fait que la chaleur spécifique implique tous les degrés de liberté. À l'inverse, la température  $T^*$  obtenue par le poids spectral n'implique que les points chauds.

### 4.3.3 Longueur de corrélation

Nous nous intéressons maintenant à la longueur de corrélation de spin afin de mieux comprendre l'effet du désordre sur les fluctuations de spins. Dans le régime où les fluctuations de spins sont fortes, et où la fréquence caractéristique des fluctuations de spins est plus petite que la température (le régime classique renormalisé, dont nous parlerons plus en détail à la section 6.4.1), la susceptibilité de spin peut être écrite sous la forme Ornstein-Zernicke [74]

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \simeq \frac{1}{U_{sp} \xi_0^2} \frac{2}{(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 + \xi_{sp}^{-2}}, \quad (4.27)$$

où  $\xi_{sp}$  est la longueur de corrélation de spin, et où la longueur de corrélation particule-trou  $\xi_0$  est définie par

$$\xi_0^2 = -\frac{1}{2\chi_0(\mathbf{Q}, 0)} \left. \frac{\partial^2 \chi_0(\mathbf{q})}{\partial q_x^2} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}. \quad (4.28)$$

Dans l'équation 4.27, la longueur de corrélation de spin est définie par

$$\xi_{sp} = \xi_0 \sqrt{\frac{U_{sp}}{\delta U}}, \quad (4.29)$$

où

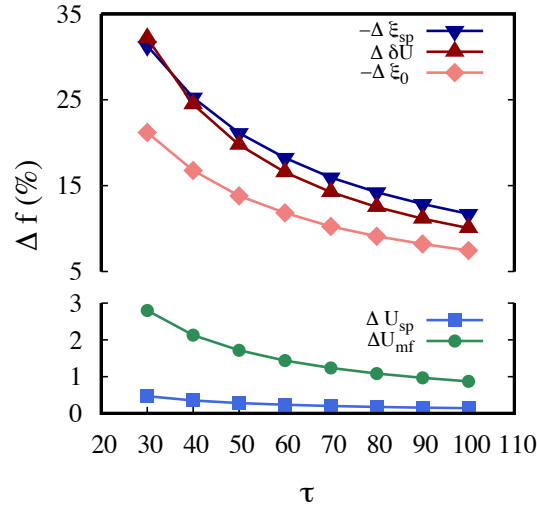
$$\begin{aligned} \delta U &= U_{mf} - U_{sp}, \\ U_{mf} &= \frac{2}{\chi_0(\mathbf{Q}, 0)}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Ici,  $U_{mf}$  est la valeur critique du vertex irréductible de spin  $U_{sp}$  qui mènerait, en RPA, à une transition de phase vers la phase antiferromagnétique qui est interdite en deux dimensions à température non-nulle.

En pratique, nous faisons le calcul TPSC pour obtenir  $U_{sp}$  et  $\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n)$  de façon auto-cohérente. Nous calculons ensuite la longueur de corrélation de spin  $\xi_{sp}$  à partir de la largeur à mi-hauteur de  $\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0)$  autour du vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Nous obtenons également  $U_{mf}$  à partir du calcul TPSC. Nous utilisons ces trois résultats pour extraire  $\xi_0$  à partir de l'équation 4.29.

Nous montrons l'effet du désordre sur  $\xi_{sp}$ ,  $\delta U$ ,  $U_{sp}$ ,  $U_{mf}$  et  $\xi_0$  à la figure 4.4, où nous augmentons le temps de vie dû au désordre de  $\tau = 30$  à  $\tau = 100$ . Tous les résultats montrés dans cette figure ont été obtenus à la température  $T = 0.04$  et à la densité  $n = 1.20$ , la densité associée au point critique quantique antiferromagnétique dans le modèle sans désordre. Nous montrons que la longueur de corrélation de spin est atténuée lorsque le désordre augmente. Ceci provient du comportement combiné de  $\delta U$  et de  $\xi_0$  dans l'expression de la longueur de corrélation 4.29. En effet,  $\delta U$  diminue de façon significative puisque le point critique quantique est déplacé vers une densité plus petite que  $n = 1.2$  avec le désordre. De plus,  $\xi_0$  diminue également en raison de la forme plus arrondie de  $\chi_0$  due au désordre. À l'inverse,  $U_{sp}$  et  $U_{mf}$  ne sont affectés que légèrement par le désordre. Nous montrons à la section 4.5 que l'effet du désordre sur  $U_{mf}$  et  $\xi_0$  peut être expliqué qualitativement par une approche phénoménologique.

Nous notons que le taux de diffusion total ne peut pas être calculé comme la somme de la partie élastique venant du désordre  $\Gamma_{el.}$  et de la partie inélastique obtenue par un calcul sans désordre  $\Gamma_{inel.}^{\text{pur}}$ . En effet, nous pouvons nous attendre à l'inégalité  $\Gamma_{tot} \neq \Gamma_{el.} + \Gamma_{inel.}^{\text{pur}}$ , puisque le taux de diffusion inélastique  $\Gamma_{inel.}$  est modifié par le désordre même dans la limite propre que nous considérons ici.

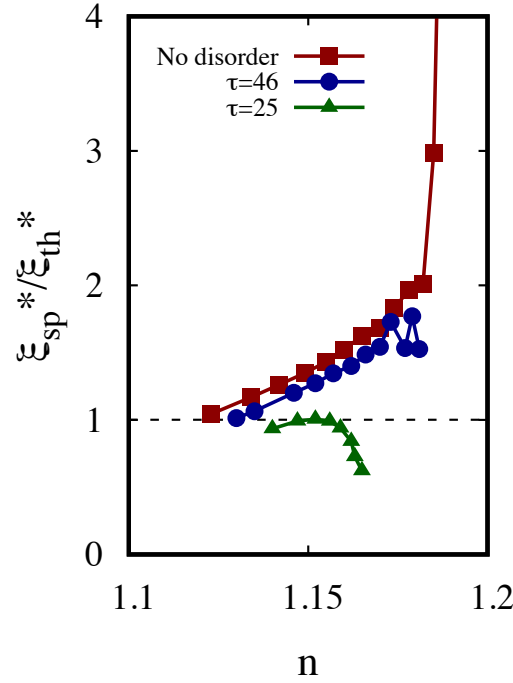


**FIGURE 4.4** Effet du désordre sur les fluctuations de spins. Sur l'axe des abscisses,  $\tau$  dénote le niveau de désordre : le désordre diminue lorsque  $\tau$  augmente. Les calculs ont été réalisés pour la température  $T = 0.04$  et la densité  $n = 1.20$ , la densité associée avec le point critique antiferromagnétique pour le cas sans désordre. La notation  $\Delta f = (f^{\text{dis}} - f)/f$  dénote la déviation relative entre les résultats avec et sans désordre. Les carrés bleus et les cercles verts montrent la déviation relative de  $U_{sp}$  et de  $U_{mf}$  respectivement en raison du désordre. Ces deux quantités sont seulement légèrement modifiées par le désordre. La grande augmentation de  $\delta U$  (triangles rouges) et la diminution de  $\xi_0$  (losanges roses) en raison du désordre atténuent la longueur de corrélation  $\xi_{sp}$  (triangles bleus). Figure tirée de la référence [2].

En effet, comme nous pouvons le voir par l'équation 2.43, la self-énergie calculée en TPSC (et donc le taux de diffusion inélastique) dépend directement des fluctuations de spins par le vertex de spin  $U_{sp}$  et la susceptibilité de spin  $\chi_{sp}$ . Ces quantités sont modifiées par le désordre, d'où :  $\Gamma_{inel.}^{\text{pur}} \neq \Gamma_{inel.}$ . Cette violation de la règle de Matthiessen a également été mentionnée dans la référence [174].

#### 4.4 Critère pour $T^*$ en présence de désordre

Tel que mentionné au chapitre 3, plusieurs méthodes pour le modèle de Hubbard ont montré que le modèle en deux dimensions, dans le régime d'interaction faible, présente un pseudogap antiferromagnétique aux points chauds lorsque le critère de Vilk  $\xi_{sp} > \xi_{th}$  est satisfait [22]. Ici, nous vérifions si ce critère est maintenu en présence du désordre. Nous montrons dans la figure 4.5 le ratio  $\xi_{sp}/\xi_{th}$  évalué à la température de crossover  $T^*$  obtenue par le poids spectral (figure 4.2, à gauche). Dans le cas sans désordre, le critère est satisfait tout au long de  $T^*$ , tel qu'attendu par des calculs TPSC précédents. La même observation peut être faite pour le cas avec  $\tau = 46$ . Dans ces deux cas, nous observons que le ratio  $\xi_{sp}/\xi_{th}$  croît rapidement au-delà de 1 lorsque la densité augmente vers le point critique quantique antiferromagnétique. Cela pourrait être dû au fait que, contrairement au cas sous-dopé où  $\xi_{sp}$  augmente bien plus rapidement que  $\xi_{th}$  lorsque



**FIGURE 4.5** Ratio de la longueur de corrélation de spin  $\xi_{sp}$  et de la longueur d’onde thermique de de Broglie  $\xi_{th}$  évaluée à  $T^*$ . Le critère de Vilk  $\xi_{sp}^* \geq \xi_{th}^*$ , montré par la ligne pointillée dans la figure, est satisfait dans le cas sans désordre (carrés rouges) et avec le niveau de désordre  $\tau = 46$  (cercles bleus). Pour le niveau de désordre supérieur  $\tau = 25$  (triangles verts), le critère n’est pas satisfait aux densités près du point critique quantique, même si un pseudogap antiferromagnétique peut être vu dans le poids spectral pour cette gamme de paramètres (voir la figure 4.1). Figure tirée de la référence [2].

la température décroît, au point critique quantique tant  $\xi_{sp}$  que  $\xi_{th}$  ont la même dépendance en température  $1/T$  [185]. Cette dépendance en  $1/T$  de  $\xi_{sp}$  au point critique quantique est dû au pseudo-emboîtement de la surface de Fermi vu dans la figure 3 de la référence [185].

La figure 4.5 montre toutefois que, pour le cas  $\tau = 25$ , le ratio  $\xi_{sp}/\xi_{th}$  tombe sous 1 à  $T^*$  lorsque la densité augmente vers le point critique quantique. Par conséquent, le critère de Vilk n’a pas à être satisfait pour qu’un pseudogap antiferromagnétique ouvre aux points chauds lorsqu’un niveau de désordre suffisamment grand est présent.

Pour comprendre la distinction entre le cas  $\tau = 25$  et les deux autres cas, nous suivons la référence [74] pour obtenir une expression analytique pour la self-énergie  $\Sigma_{cl}(\mathbf{k}_F, 0)$  aux points chauds. Nous rappelons l’équation de la self-énergie en TPSC (où nous laissons tomber la contribution de Hartree)

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U}{8} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] \mathcal{G}_0^{dis}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (4.31)$$

Dans le régime classique renormalisé, la principale contribution à la self-énergie vient des fluctuations de spins à fréquence de Matsubara nulle  $q_0 = 0$ . Nous simplifions donc la forme de la



self-énergie par ses contributions dominantes

$$\Sigma_{cl}(\mathbf{k}, ik_n) \simeq \frac{3UU_{sp}}{8} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \mathcal{G}_0^{dis}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n). \quad (4.32)$$

Ensuite, nous effectuons le prolongement analytique  $ik_n \rightarrow \omega + i\eta$  pour obtenir la self-énergie retardée  $\Sigma_{cl}^R$  et nous évaluons cette expression à fréquence nulle,  $\omega = 0$ . Nous obtenons

$$\Sigma_{cl}^R(\mathbf{k}, \omega = 0) \simeq \frac{3UU_{sp}}{8} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \frac{1}{-\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \mu - \Sigma^{dis}}, \quad (4.33)$$

où la self-énergie due au désordre prend la forme  $\Sigma^{dis} = -i/2\tau$  après le prolongement analytique. Ensuite, nous utilisons la forme de Ornstein-Zernicke (équation 4.27) pour la susceptibilité de spin, qui est valide dans ce régime où les fluctuations de spins sont importantes

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \simeq \frac{1}{U_{sp}\tilde{\zeta}_0^2} \frac{2}{(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}}, \quad (4.34)$$

et nous transformons la somme sur les vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  en une intégrale avec le changement de variable  $\mathbf{q} - \mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{q}$

$$\Sigma_{cl}^R(\mathbf{k}, 0) = \frac{3UT}{4\tilde{\zeta}_0^2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{1}{\mathbf{q}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}} \frac{1}{-\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}} + \mu + i/2\tau}. \quad (4.35)$$

Nous évaluons cette équation aux points chauds  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_F$  où la surface de Fermi croise la zone de Brillouin antiferromagnétique. Ce vecteur d'onde est donc caractérisé par  $k_{F,y} = \pi - k_{F,x}$ , ce qui implique également que l'énergie aux points chauds est liée au potentiel chimique par  $\epsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{Q}} = \epsilon_{\mathbf{k}_F} = \mu$ . Nous faisons également une approximation pour l'énergie :  $\epsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{q}+\mathbf{Q}} = \epsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{Q}} + \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_F$ . Nous obtenons

$$\Sigma_{cl}^R(\mathbf{k}_F, 0) = \frac{3UT}{4\tilde{\zeta}_0^2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{1}{q_{\perp}^2 + q_{\parallel}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}} \frac{1}{i/2\tau - q_{\parallel}v_F}, \quad (4.36)$$

où nous avons défini  $q_{\parallel}$  ( $q_{\perp}$ ) comme la composante du vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  qui est parallèle (perpendiculaire) à la vitesse de Fermi  $\mathbf{v}_F$ . Nous faisons maintenant le calcul de l'intégrale sur  $q_{\perp}$  dans le

plan complexe

$$\begin{aligned}
\Sigma_{cl}^R(\mathbf{k}_F, 0) &= \frac{3UT}{16\pi^2\tilde{\zeta}_0^2} \int dq_{\parallel} dq_{\perp} \left[ \frac{1}{q_{\perp} + i\sqrt{q_{\parallel}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}}} - \frac{1}{q_{\perp} - i\sqrt{q_{\parallel}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}}} \right] \frac{i}{2\sqrt{q_{\parallel}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}}} \frac{1}{i/2\tau - q_{\parallel}v_F}, \\
&= \frac{3UT}{16\pi^2\tilde{\zeta}_0^2} \int dq_{\parallel} (-2\pi i) \frac{i}{2\sqrt{q_{\parallel}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}}} \frac{1}{i/2\tau - q_{\parallel}v_F}, \\
&= \frac{3UT}{16\pi\tilde{\zeta}_0^2} \int dq_{\parallel} \frac{1}{\sqrt{q_{\parallel}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}}} \frac{1}{i/2\tau - q_{\parallel}v_F}. \tag{4.37}
\end{aligned}$$

Nous nous concentrons maintenant sur la partie imaginaire de la self-énergie, et nous faisons l'intégrale sur  $q_{\parallel}$  en faisant d'abord le changement de variable  $x \equiv q_{\parallel}\tilde{\zeta}_{sp}$

$$\begin{aligned}
\text{Im}\Sigma_{cl}^R(\mathbf{k}_F, 0) &= -\frac{3UT}{16\pi\tilde{\zeta}_0^2} \int dq_{\parallel} \frac{1}{\sqrt{q_{\parallel}^2 + \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}}} \frac{1/2\tau}{(1/2\tau)^2 + (q_{\parallel}v_F)^2}, \\
&= -\frac{3UT}{16\pi\tilde{\zeta}_0^2} \frac{1}{2v_F^2\tau} \int dq_{\parallel} \frac{\tilde{\zeta}_{sp}}{\sqrt{(q_{\parallel}\tilde{\zeta}_{sp})^2 + 1}} \frac{\tilde{\zeta}_{sp}^2}{(\tilde{\zeta}_{sp}/2v_F\tau)^2 + (q_{\parallel}\tilde{\zeta}_{sp})^2}, \\
&= -\frac{3UT}{16\pi\tilde{\zeta}_0^2} \frac{\tilde{\zeta}_{sp}^2}{2v_F^2\tau} \int dx \frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}} \frac{1}{(\tilde{\zeta}_{sp}/2v_F\tau)^2 + x^2}. \tag{4.38}
\end{aligned}$$

Nous intégrons ensuite de  $-\infty$  à  $\infty$

$$\begin{aligned}
\text{Im}\Sigma_{cl}^R(\mathbf{k}_F, 0) &= -\frac{3UT}{8\pi\tilde{\zeta}_0^2} \frac{\tilde{\zeta}_{sp}}{v_F} \frac{\text{arccosh}(\tilde{\zeta}_{sp}/2v_F\tau)}{\sqrt{(\tilde{\zeta}_{sp}/2v_F\tau)^2 - 1}}, \\
&= -\frac{3U}{8\pi^2\tilde{\zeta}_0^2} \frac{\tilde{\zeta}_{sp}}{\tilde{\zeta}_{th}} \frac{\text{arccosh}(\tilde{\zeta}_{sp}/2v_F\tau)}{\sqrt{(\tilde{\zeta}_{sp}/2v_F\tau)^2 - 1}}, \tag{4.39}
\end{aligned}$$

où nous avons introduit la longueur d'onde de de Broglie  $\tilde{\zeta}_{th} = v_F/\pi T$ . Nous obtenons finalement la partie imaginaire de la self-énergie

$$\text{Im}\Sigma_{cl}(\mathbf{k}_F, 0, \tau) = -\frac{3U}{8\pi^2\tilde{\zeta}_0^2(\tau)} \frac{\tilde{\zeta}_{sp}}{\tilde{\zeta}_{th}} F\left(\frac{\tilde{\zeta}_{sp}}{v_F\tau}\right). \tag{4.40}$$

Dans ce qui précède, la fonction  $F(x)$  est définie par

$$F(x) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} & x = 0 \text{ (Sans désordre)}, \\ \frac{\text{arccosh}(x)}{\sqrt{x^2 - 1}} & x > 0, \end{cases} \tag{4.41}$$

où la valeur de  $\text{arccosh}$  doit être calculée dans le plan complexe. Elle est purement imaginaire pour

$x < 1$ . Le résultat 4.40 est en accord avec la forme phénoménologique obtenue dans la référence [161], mais ne comporte pas de paramètre ajustable.

L'effet du désordre sur la self-énergie n'est pas évident au premier regard, puisque le désordre intervient dans la fonction  $F(x)$  définie à l'équation 4.41 ainsi que dans le préfacteur  $\xi_0^{-2}(\tau)$ . Tel que vu à la figure 4.4,  $\xi_0$  est atténuée par le désordre. Nous montrerons également à la section 4.5 que  $\xi_0(\tau)$  diminue quand le désordre augmente dans la limite propre lorsque la valeur sans désordre de  $\xi_0(\tau \rightarrow \infty)$  est petite par rapport à la longueur d'onde thermique de de Broglie, ce qui est en pratique toujours satisfait dans nos cas d'étude. Dans nos calculs,  $\xi_0^2(\tau)$  prend des valeurs dans l'intervalle  $0.65 < \xi_0^2(\tau)/\xi_0^2(\tau \rightarrow \infty) < 0.9$  pour des valeurs de  $\tau$  entre 30 et 100, à la densité  $n = 1.20$  et pour la température  $T = 0.04$ .

Pour comprendre en quoi le résultat ci-haut pour  $\text{Im}\Sigma_{cl}(\mathbf{k}_F, 0, \tau)$  modifie le critère de Vilk, nous débutons par noter que le pseudogap antiferromagnétique apparaît aux points chauds lorsque la partie imaginaire de la self-énergie devient grande (en valeur absolue). Dans le cas sans désordre, cela se produit lorsque la longueur de corrélation de spin devient plus grande que la longueur thermique de de Broglie, comme on peut le voir avec l'équation 4.40 et l'évaluation de l'équation 4.41 pour  $x = 0$

$$\begin{aligned} |\text{Im}\Sigma_{cl}(\mathbf{k}_F, 0, \tau \rightarrow \infty)| &= \frac{3U}{16\pi\xi_0^2(\tau \rightarrow \infty)} \frac{\tilde{\xi}_{sp}}{\tilde{\xi}_{th}}, \\ &\gg 1 \Leftrightarrow \frac{\tilde{\xi}_{sp}}{\tilde{\xi}_{th}} > 1. \end{aligned} \quad (4.42)$$

L'équation 4.42 est la formulation originale du critère de Vilk.

Prenons alors

$$|\text{Im}\Sigma_{cl}(\mathbf{k}_F, 0, \tau)| \geq \frac{3U}{16\pi\xi_0^2(\tau \rightarrow \infty)}. \quad (4.43)$$

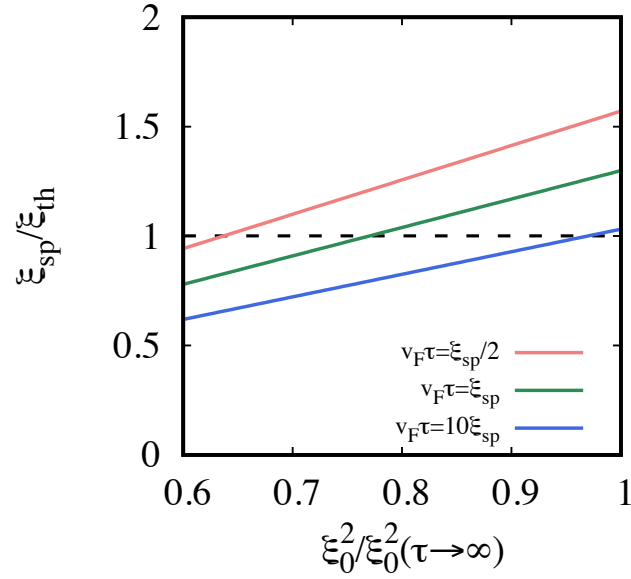
en tant que critère pour la valeur minimale de la partie imaginaire de la self-énergie pour l'ouverture du pseudogap antiferromagnétique. Même si nous avons déduit le résultat 4.43 du cas sans désordre ( $\tau \rightarrow \infty$ ), il demeure valide pour les cas avec des valeurs finies du temps de vie  $\tau$ .

Ainsi, à partir du critère 4.43 et de l'équation 4.40 pour la self-énergie, nous obtenons une nouvelle formulation du critère de Vilk qui inclut les effets du désordre. Un pseudogap antiferromagnétique peut ouvrir aux points chauds lorsque

$$\frac{\tilde{\xi}_{sp}}{\tilde{\xi}_{th}} \geq \frac{\pi}{2} \frac{\xi_0^2(\tau)}{\xi_0^2(\tau \rightarrow \infty)} \frac{1}{F(\frac{\tilde{\xi}_{sp}}{v_F\tau})} \quad (4.44)$$

Le critère de Vilk original est rétabli en prenant la limite  $\tau \rightarrow \infty$  dans l'équation 4.44.

Nous traçons le ratio obtenu par l'égalité stricte de l'équation 4.44 à la figure 4.6 en fonction du



**FIGURE 4.6** Valeur minimale du ratio  $\xi_{sp}/\xi_{th}$  auquel le pseudogap antiferromagnétique peut ouvrir aux points chauds selon le critère 4.44. Le ratio  $\xi_0^2/\xi_0^2(\tau \rightarrow \infty)$  est pris comme un paramètre libre dans le calcul analytique. La ligne noire pointillée correspond au critère de Vilk original. Les trois autres lignes sont calculées avec du désordre :  $v_F\tau = \xi_{sp}/2$  (ligne rose),  $v_F\tau = \xi_{sp}$  (ligne verte),  $v_F\tau = 10\xi_{sp}$  (ligne bleue). Figure tirée de la référence [2].

ratio  $\xi_0^2(\tau)/\xi_0^2(\tau \rightarrow \infty)$ . Le critère de Vilk original correspond à la ligne noire pointillée constante à  $\xi_{sp}/\xi_{th} = 1$ . Nous considérons également trois cas avec des niveaux de désordre variés selon le ratio  $\xi_{sp}/v_F\tau$  qui entre la fonction  $F$  définie par l'équation 4.41 :  $v_F\tau = \xi_{sp}/2$  (ligne rose),  $v_F\tau = \xi_{sp}$  (ligne verte) et  $v_F\tau = 10\xi_{sp}$  (ligne bleue).

Nos calculs analytiques et leur illustration à la figure 4.6 montrent que l'effet du désordre sur le pseudogap antiferromagnétique est subtil. La première modification à la self-énergie par le désordre dépend du ratio de la longueur de corrélation de spin  $\xi_{sp}$  et du libre parcours moyen  $v_F\tau$  qui apparait dans l'argument de la fonction  $F(x)$  définie à l'équation 4.41. Cette modification semble favoriser l'ouverture du pseudogap antiferromagnétique lorsque  $\xi_{sp} \geq \xi_{th}$ , de façon analogue au cas sans désordre. Toutefois, le désordre atténue également  $\xi_0^2(\tau)$ , ce qui a l'effet inverse sur le critère pour le pseudogap. Les deux effets combinés impliquent que le pseudogap antiferromagnétique peut exister lorsque  $\xi_{sp} < \xi_{th}$ , tel qu'illustré à la figure 4.6.

## 4.5 Approche phénoménologique pour la fonction de Lindhard avec désordre

L'atténuation des fluctuations antiferromagnétiques par le désordre peut être comprise de façon plus profonde par une approche phénoménologique. C'est ce que nous montrons dans cette section. Les calculs présentés ici sont analogues à la théorie Abrikosov-Gor'kov des impuretés non-magnétiques dans les supraconducteurs.

Nous débutons en considérant la fonction de corrélation densité-densité non-interagissante (fonction de Lindhard)  $\chi_0(\mathbf{Q}, iq_0 = 0)$ , où  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  est le vecteur d'onde antiferromagnétique. Nous considérons le cas spécifique avec un paramètre de saut aux premiers voisins uniquement ( $t = 1, t' = t'' = 0$ ), au demi-remplissage (potentiel chimique  $\mu = 0$ ). Nous étudions ce cas puisqu'il nous est possible de calculer  $\chi_0(\mathbf{Q}, iq_0 = 0)$  exactement sans désordre

$$\begin{aligned}\chi_0(\mathbf{Q}, iq_0 = 0) &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, ik_n), \\ &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}}}.\end{aligned}\quad (4.45)$$

Dans le réseau carré, nous utilisons la relation  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}}$ . Nous pouvons alors faire la somme sur les fréquences de Matsubara  $ik_n$ , puis la somme sur les vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$ . Nous obtenons

$$\chi_0(\mathbf{Q}, iq_0 = 0) = 2\rho(\epsilon_F) \left[ \ln \left( \frac{2\Omega}{\pi T} \right) + \gamma \right], \quad (4.46)$$

où  $\Omega$  est une énergie de coupure,  $\rho(\epsilon_F)$  est la densité d'états au niveau de Fermi, et  $\gamma$  est la constante d'Euler. Ici, nous avons supposé que la densité d'états au niveau de Fermi est une constante afin de simplifier les calculs.

Avec désordre, nous calculons

$$\begin{aligned}\chi_0^{\text{dis}}(\mathbf{Q}, iq_0 = 0) &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \mathcal{G}_0^{\text{dis}}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}_0^{\text{dis}}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, ik_n), \\ &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \left[ \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}} - i \text{sgn}(k_n)/(2\tau)} \right. \\ &\quad \times \left. \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}} - i \text{sgn}(k_n)/(2\tau)} \right].\end{aligned}\quad (4.47)$$

Puisque la self-énergie due au désordre  $i \text{sgn}(k_n)/(2\tau)$  dépend des fréquences de Matsubara, nous ne pouvons pas faire la somme sur les fréquences de Matsubara analytiquement avant la somme sur

les vecteurs d'onde. Nous contourignons ce problème en calculant

$$\chi_0^{\text{dis}} = \bar{\chi}_0^{\text{dis}} - \bar{\chi}_0 + \chi_0, \quad (4.48)$$

où la quantité  $\bar{\chi}$  est calculée en effectuant la somme sur les vecteurs d'onde en premier, tandis que  $\chi$  est calculée en faisant la somme sur les fréquences de Matsubara d'abord. Nous obtenons ainsi

$$\chi_0^{\text{dis}}(\mathbf{Q}, iq_0 = 0) = \chi_0(\mathbf{Q}, 0) - 2\rho(\epsilon_F)a(0, 4\pi T\tau). \quad (4.49)$$

Nous avons défini la fonction  $a$  par

$$a(n, x) = \psi^{(n)}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{x}\right) - \psi^{(n)}\left(\frac{1}{2}\right), \quad (4.50)$$

où  $\psi^{(n)}$  est la fonction polygamma d'ordre  $n$ .

Dans la limite propre, nous pouvons faire le développement  $\tau \gg 1$  dans l'équation 4.49, ce qui nous donne

$$\chi_0^{\text{dis}}(\mathbf{Q}, iq_0 = 0) \simeq \chi_0(\mathbf{Q}, iq_0 = 0) - \frac{\rho(\epsilon_F)\pi}{4T\tau}. \quad (4.51)$$

Ce dernier résultat implique que les fluctuations antiferromagnétiques sont réduites par la présence de désordre. Ce résultat analytique est cohérent avec notre étude précédente de  $U_{mf} = 2/\chi_0(\mathbf{Q}, 0)$ , montrée à la figure 4.4 :  $U_{mf}$  augmente avec le niveau de désordre.

Au niveau RPA, la température de transition vers la phase antiferromagnétique en champ moyen  $T_N^{\text{RPA}}$  est obtenue par le critère de Stoner  $1 = U\chi_0(\mathbf{Q}, iq_0 = 0)/2$ . En utilisant ce critère, et en notant  $T_N$  et  $T_N^{\text{dis}}$  les températures de transition sans désordre et avec désordre respectivement, nous obtenons

$$T_N^{\text{dis}} \exp\left[\frac{\pi}{8T_N^{\text{dis}}\tau}\right] = T_N. \quad (4.52)$$

Puisque nous nous intéressons à la limite propre, nous pouvons évaluer l'exponentielle autour de  $\tau \rightarrow \infty$ , ce qui résulte en

$$T_N^{\text{dis}} = T_N - \frac{\pi}{8\tau}. \quad (4.53)$$

À partir de l'équation 4.53, nous montrons que le désordre diminue la température de Néel obtenue en RPA (dans la limite propre).

Nous nous tournons maintenant vers le calcul de la longueur de corrélation  $\zeta_0^2$ , définie par

$$\zeta_0^2 = -\frac{1}{2\chi_0(\mathbf{Q}, 0)} \left. \frac{\partial^2 \chi_0(\mathbf{q})}{\partial q_x^2} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}. \quad (4.54)$$

Nous pouvons faire le calcul de  $\chi_0(\mathbf{Q} + \mathbf{q})$  à petites valeurs de  $\mathbf{q}$  de façon analogue au calcul fait plus tôt pour  $\chi_0(\mathbf{Q})$ . Nous calculons ensuite la dérivée seconde par rapport à  $q$ . Nous obtenons

$$\frac{\xi_0^{dis\ 2}}{\xi_0^2} = \frac{1}{\chi_0^{dis}(\mathbf{Q}, 0)} \left[ \chi_0(\mathbf{Q}, 0) - \frac{\rho(\epsilon_F)}{48} \frac{\xi_{th}^2}{\xi_0^2} a(2, 4\pi T\tau) \right], \quad (4.55)$$

où  $a(2, 4\pi T\tau)$  est définie par l'équation 4.50. À partir des équations 4.55 et 4.49, nous trouvons que la longueur  $\xi_0$  est atténuée par le désordre lorsque

$$\frac{\xi_{th}^2}{\xi_0^2} > 96 \frac{a(0, 4\pi T\tau)}{a(2, 4\pi T\tau)}, \quad (4.56)$$

$$\gtrsim 5. \quad (4.57)$$

Ce critère est toujours satisfait dans nos calculs, pour les paramètres choisis.

## 4.6 Conclusion

---

Dans ce chapitre, nous avons montré que le pseudogap antiferromagnétique peut apparaître aux points chauds dans le modèle de Hubbard même lorsque la longueur de corrélation antiferromagnétique  $\xi_{sp}$  est plus petite que la longueur d'onde thermique de de Broglie  $\xi_{th}$  lorsqu'un niveau de désordre suffisant est atteint. Cette violation du critère de Vilk pourrait être une explication de l'observation expérimentale du pseudogap dans NCCO près du dopage optimal [102]. La présente étude suggère la pertinence d'une étude expérimentale systématique de l'effet du désordre sur les points chauds. Toutefois, une comparaison complète à l'expérience pourrait nécessiter l'inclusion de l'effet combiné de la supraconductivité et des fluctuations de spins [186]. Une autre étape possible serait d'inclure un taux de diffusion élastique ayant une dépendance en vecteur d'onde, ce qui pourrait être plus approprié pour l'étude du désordre hors du plan  $\text{CuO}_2$ .

## Chapitre 5

# Quasiparticules résilientes et forces des corrélations électroniques près d'un point critique quantique antiferromagnétique

Ce chapitre est essentiellement une traduction de l'article [1]. Les annexes de l'article ont été intégrées au texte et plusieurs développements mathématiques ont été étoffés.

### 5.1 Motivation expérimentale : Mesures d'ARPES dans les cuprates dopés en électrons

---

Dans les métaux normaux où les interactions entre les électrons ne sont pas très importantes, la théorie des liquides de Fermi de Landau permet de décrire le comportement des électrons. Le concept du liquide de Fermi mène à la description de quasiparticules qui ont une masse effective et une vitesse renormalisées par les interactions. Ces quantités peuvent dépendre de la quantité de mouvement sur la surface de Fermi. Toutefois, dans les matériaux fortement corrélés, les propriétés de transport peuvent diverger de celles attendues par la théorie des liquides de Fermi. C'est le cas notamment dans les matériaux où la résistivité électronique est linéaire à basse température, alors que celle d'un liquide de Fermi est quadratique [187, 188]. Dans ce contexte, les notions de non-liquide de Fermi et de liquide de Fermi marginal ont émergé [189–191]. Le comportement non-liquide de Fermi est souvent associé à la présence d'un point critique quantique magnétique [190].



L'analyse détaillée des quasiparticules de la surface de Fermi par l'extraction de la self-énergie à partir de mesures d'ARPES a été effectuée pour plusieurs matériaux, tels que  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [192], des métaux organiques [193], les cuprates dopés en trous  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  et  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO) [194, 195], et le cuprate dopé en électrons  $\text{Pr}_{1.3-x}\text{La}_{0.7}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (PLCCO) [183]. Dans tous ces cas, il a été montré que des quasiparticules du liquide de Fermi persistent dans certains segments de la surface de Fermi, particulièrement loin des points critiques quantiques dans des échantillons sur-dopés.

Dans le projet qui a fait l'objet de l'article [1], nous étudions le cas spécifique des cuprates dopés en électrons, qui ont fait l'objet de plusieurs études expérimentales [102, 138, 144]. Nous montrons que les quasiparticules du liquide de Fermi sont persistantes sur de grandes portions de la surface de Fermi pour des dopages à proximité d'un point critique quantique antiferromagnétique. Bien que plusieurs études théoriques se soient concentrées sur les points chauds où le comportement non-liquide de Fermi est observé [196, 197], nous nous concentrons ici sur les segments où les quasiparticules persistantes du liquide de Fermi ont des propriétés intéressantes qui peuvent dominer le transport électronique [198–200]. En particulier, nous montrons que les propriétés de ces quasiparticules mènent à une nouvelle façon de quantifier la force des corrélations électroniques, au-delà de propositions précédentes qui étaient basées sur des règles de somme [201].

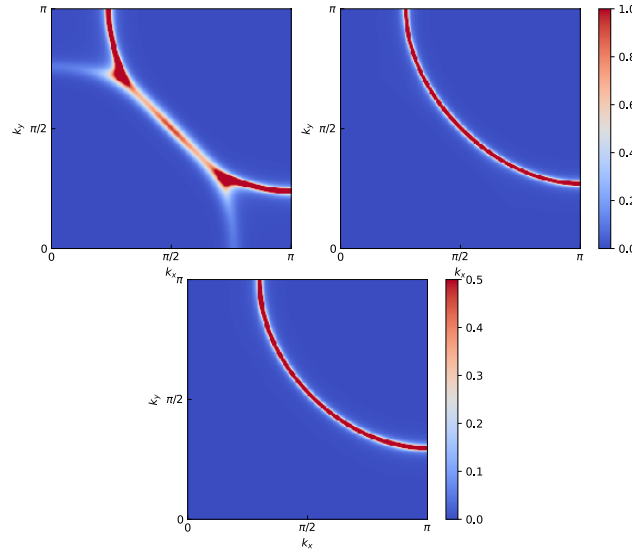
Nous présentons les paramètres du modèle étudié à la section 5.2. À la section 5.3, nous étudions l'évolution des quasiparticules le long de la surface de Fermi en fonction du dopage. Ensuite, à la section 5.4, nous comparons des façons de quantifier la force des interactions électroniques à l'aide des paramètres du liquide de Fermi.

## 5.2 Modèle et paramètres

---

Nous étudions le modèle de Hubbard sur un réseau carré en deux dimensions. Tel que décrit au chapitre 1, la relation de dispersion dans ce modèle peut être caractérisée par des paramètres de saut aux premiers voisins  $t$ , aux seconds voisins  $t'$  et aux troisièmes voisins  $t''$ . Nous choisissons ici les paramètres  $t = 1$ ,  $t' = -0.175$  et  $t'' = 0.05$  qui ont déjà été utilisés pour modéliser le cuprate dopé en électrons NCCO [21]. La majorité des résultats présentés ont été obtenus pour  $U = 5.75$ , une valeur de l'interaction de Hubbard qui a été utilisée pour reproduire le spectre ARPES de NCCO au dopage  $x = 0.15$  [21]. Le paramètre de saut aux premiers voisins  $t = 1$  définit l'unité d'énergie. Ces paramètres sont identiques à ceux qui ont été utilisés pour l'étude présentée au chapitre 4.

Pour étudier l'effet des fluctuations antiferromagnétiques sur les quasiparticules du liquide de Fermi, nous étudions trois dopages différents :  $x = 0.15$  dans le régime sous-dopé (sous le point critique quantique antiferromagnétique),  $x = 0.20$  près du point critique quantique antiferromagnétique [185], et  $x = 0.25$  dans le régime sur-dopé (au-dessus du point critique quantique



**FIGURE 5.1** Poids spectral au niveau de Fermi dans un quart de la zone de Brillouin calculé à la température  $T = 0.04t$  pour les dopages  $x = 0.15$  (en haut, à gauche),  $x = 0.20$  (en haut, à droite) et  $x = 0.25$  (en bas). L'échelle de couleur représente l'intensité du poids spectral. Figure tirée de la référence [1].

antiferromagnétique). Tel que montré à la figure 5.1, dans le régime de température faible (mais non-nulle), le pseudogap antiferromagnétique aux points chauds est seulement présent à  $x = 0.15$ . La surface de Fermi pour les dopages est bien définie pour les dopages  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ .

### 5.3 Résilience des quasiparticules du liquide de Fermi

Dans cette section, nous étudions l'évolution des quasiparticules sur la surface de Fermi en fonction du dopage et de l'angle sur la surface de Fermi. Dans la sous-section 5.3.1, nous vérifions d'abord si elles prennent la forme attendue par la théorie du liquide de Fermi et, si c'est le cas, nous analysons la dépendance en angle sur la surface de Fermi des coefficients qui les caractérisent. Nous étudions la renormalisation de la masse des quasiparticules à la sous-section 5.3.2. Finalement, nous utilisons une loi d'échelle pour déterminer la dépendance en température de la self-énergie au noeud et à l'antinoeud en fonction du dopage à la sous-section 5.3.3.

#### 5.3.1 Dépendance en angle des propriétés des quasiparticules du liquide de Fermi

Nous étudions d'abord le comportement des quasiparticules en fonction de l'angle  $\theta$  sur la surface de Fermi, qui est défini dans la figure 5.4. Dans un liquide de Fermi, la forme attendue de la

self-énergie à basse fréquence est

$$\Sigma''(\omega, T) = a_0(T) - a_2\omega^2, \quad \omega < \omega_c \quad (5.1)$$

où  $T$  est la température,  $\omega$  est la fréquence, et  $\omega_c$  est une fréquence de coupure. Les paramètres  $a_2$ ,  $a_0$  et  $\omega_c$  peuvent être extraits de mesures d'ARPES [183, 195]. En général, la self-énergie dépend de la quantité de mouvement, même si nous ne l'écrivons pas explicitement ici.

Nous travaillons en fréquences de Matsubara où le développement de la self-énergie à basse fréquence est

$$\Sigma(k_n, T) = ia_0(T) + b_0(T) + ia_1k_n + ia_2k_n^2 + \mathcal{O}(k_n^3), \quad (5.2)$$

où  $k_n = (2n + 1)\pi T$  est une fréquence de Matsubara fermionique, et les paramètres  $a_0$ ,  $b_0$ ,  $a_1$  et  $a_2$  sont réels. Nous pouvons obtenir la partie imaginaire (équation 5.1) ainsi que la partie réelle de la self-énergie sur l'axe réel en faisant le prolongement analytique  $k_n \rightarrow -i(\omega + i0^+)$  de l'expression en fréquences de Matsubara (équation 5.2). La partie réelle de la self-énergie est

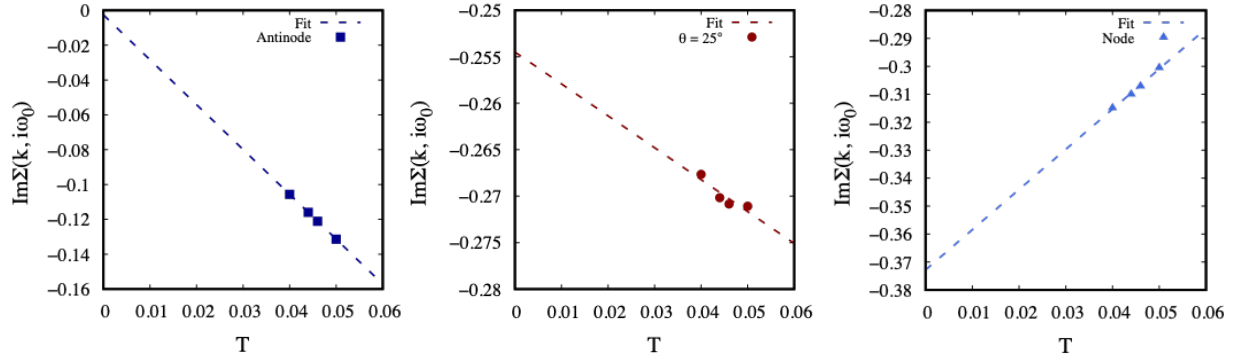
$$\Sigma'(\omega, T) = b_0(T) + a_1\omega. \quad (5.3)$$

Nous pouvons extraire le poids de quasiparticule  $Z$  à partir de la partie réelle de la self-énergie (équation 5.3)

$$\begin{aligned} Z &= \left(1 - \frac{\partial \Sigma'(\omega)}{\partial \omega}\right)^{-1} \Big|_{\omega=0}, \\ &= \frac{1}{1 - a_1}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Nous décrivons maintenant la procédure de lissage nous permettant d'obtenir les paramètres  $a_0$ ,  $b_0$ ,  $a_1$  et  $a_2$  à partir de la self-énergie en fréquences de Matsubara.

En raison de la relation simple entre la partie imaginaire de la self-énergie en fréquences réelles  $\Sigma''$  (équation 5.1) et l'expression correspondante en fréquences de Matsubara (équation 5.2), il est possible d'extraire les paramètres de la self-énergie  $a_0(T)$ ,  $a_1$  et  $a_2$  à partir d'un lissage polynomial de la self-énergie en fréquences de Matsubara que nous obtenons d'un calcul TPSC. Ce processus n'est pas tout à fait direct en raison de la nature discrète des fréquences de Matsubara et de leur dépendance en température. Pour éviter ces problèmes, nous considérons la dépendance en température attendue pour la partie imaginaire de la self-énergie retardée pour un liquide de Fermi, qui est (en négligeant les corrections logarithmiques qui devraient apparaître pour un système en



**FIGURE 5.2** Partie imaginaire de la self-énergie évaluée à la première fréquence de Matsubara. Les calculs sont réalisés pour le dopage  $x = 0.15$ , pour  $U = 5.75$ , en fonction de la température et du vecteur d'onde : l'antinode à gauche,  $\theta = 25^\circ$  au centre et le noeud à droite.

deux dimensions avec une surface de Fermi cylindrique [202])

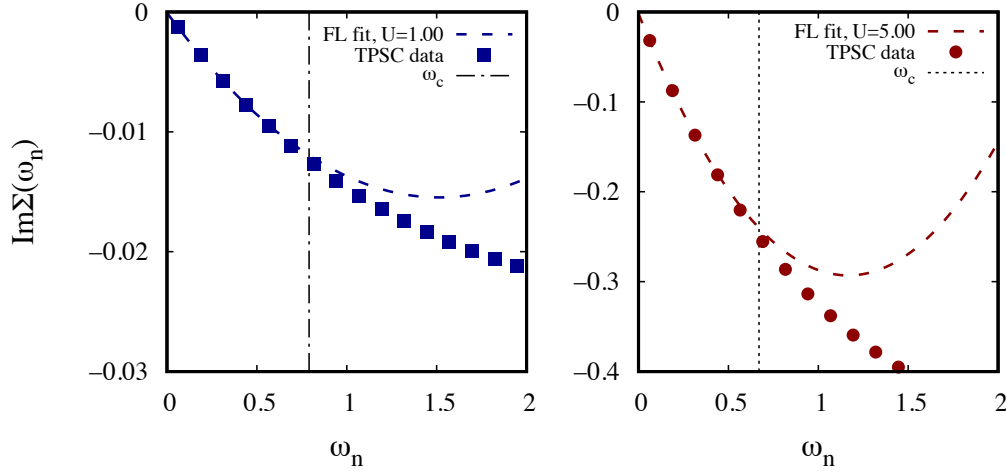
$$\begin{aligned}
 a_0(T) &= -a(\pi T)^2, \\
 a_2 &= a, \\
 \Rightarrow \Sigma''(\omega, T) &= -a(\pi T)^2 - a\omega^2.
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

En fréquences de Matsubara, cette relation entre les coefficients  $a_0$  et  $a_2$  nous permet d'obtenir, lorsque nous évaluons la self-énergie à la première fréquence de Matsubara  $k_0 = \pi T$ ,

$$\begin{aligned}
 \text{Im}\Sigma(k_0, T) &= -a(\pi T)^2 + a_1\pi T + a(\pi T)^2, \\
 &= a_1\pi T.
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Ainsi, notre première étape dans le calcul des paramètres est d'extraire le paramètre  $a_1$  par le biais d'un lissage de  $\text{Im}\Sigma(k_0, T)$  en fonction de la température. À la figure 5.2, nous montrons la partie imaginaire de la self-énergie évaluée à la première fréquence de Matsubara en fonction de la température,  $\text{Im}\Sigma(k_0, T)$ . Les calculs présentés sont réalisés pour le dopage  $x = 0.15$ , aux vecteurs d'onde associés aux angles  $\theta = 0^\circ$  (l'antinode),  $\theta = 25^\circ$  et  $\theta = 45^\circ$  (le noeud). Nous pouvons remarquer que, pour ces trois exemples, seul le calcul à l'antinode suit la forme décrite par l'équation 5.6 : l'extrapolation des résultats à température nulle pour les deux autres vecteurs d'onde ne passe pas par l'origine. Pour le noeud, le coefficient  $a_1$  obtenu par le lissage de  $\text{Im}\Sigma(k_0, T)$  n'a pas le bon signe. Nous constatons ainsi que l'extraction du coefficient  $a_1$  par un lissage de  $\text{Im}\Sigma(k_0, T)$  en température permet non seulement d'obtenir la valeur de  $a_1$ , mais également de déterminer si la self-énergie en fréquences de Matsubara pour un certain cas a bien une forme liquide de Fermi ou non.

Par la suite, pour les cas où le coefficient  $a_1$  peut être correctement obtenu par la forme liquide



**FIGURE 5.3** Lissages avec la forme liquide de Fermi de la partie imaginaire de la self-énergie en fréquences de Matsubara. Nous montrons la self-énergie en fréquences de Matsubara obtenue par les calculs TPSC (points) ainsi que le lissage (courbes hachurées en couleur). Les lignes verticales sont placées aux valeurs de la fréquence de coupure  $\omega_c$ . Ces résultats sont obtenus pour le dopage  $x = 0.20$ , à l'antinoeud, avec  $U = 1$  (à gauche) et  $U = 5$  (à droite). Figure tirée de la référence [1].

de Fermi de la self-énergie, nous calculons les paramètres restants  $a_0(T)$  et  $a_2$  avec un lissage de

$$\text{Im}\Sigma(k_n, T) - a_1 k_n = a_0(T) + a_2 k_n^2. \quad (5.7)$$

Nous faisons ce lissage sur les deux premières fréquences de Matsubara pour plusieurs températures. Nous obtenons la valeur finale du paramètre  $a_2$  en prenant la moyenne des valeurs obtenues à chaque température. Des exemples des lissages sont montrés à la figure 5.3.

À la figure 5.4, nous montrons le poids de quasiparticule  $Z$  et le coefficient  $a_2$  en fonction de l'angle sur la surface de Fermi  $\theta$  pour les dopages  $x = 0.15$ ,  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ . Au plus grand dopage étudié, loin du point critique quantique antiferromagnétique, tant  $Z$  que  $a_2$  montrent une dépendance très faible par rapport à l'angle  $\theta$ . Nous observons un comportement qualitativement différent au dopage  $x = 0.20$ . Même si la surface de Fermi est toujours bien définie à ce dopage dans le régime de températures que nous étudions, l'effet des fluctuations antiferromagnétiques peut être vu dans la dépendance en angle de  $Z$  et  $a_2$ . Les deux paramètres sont relativement constants pour des angles  $\theta$  près de l'antinoeud ( $\theta = 0^\circ$ ). Toutefois, lorsque  $\theta$  augmente vers le point chaud et le noeud, nous observons une augmentation marquée du coefficient  $a_2$  qui n'est pas présent dans le cas de fort dopage ( $x = 0.25$ ).

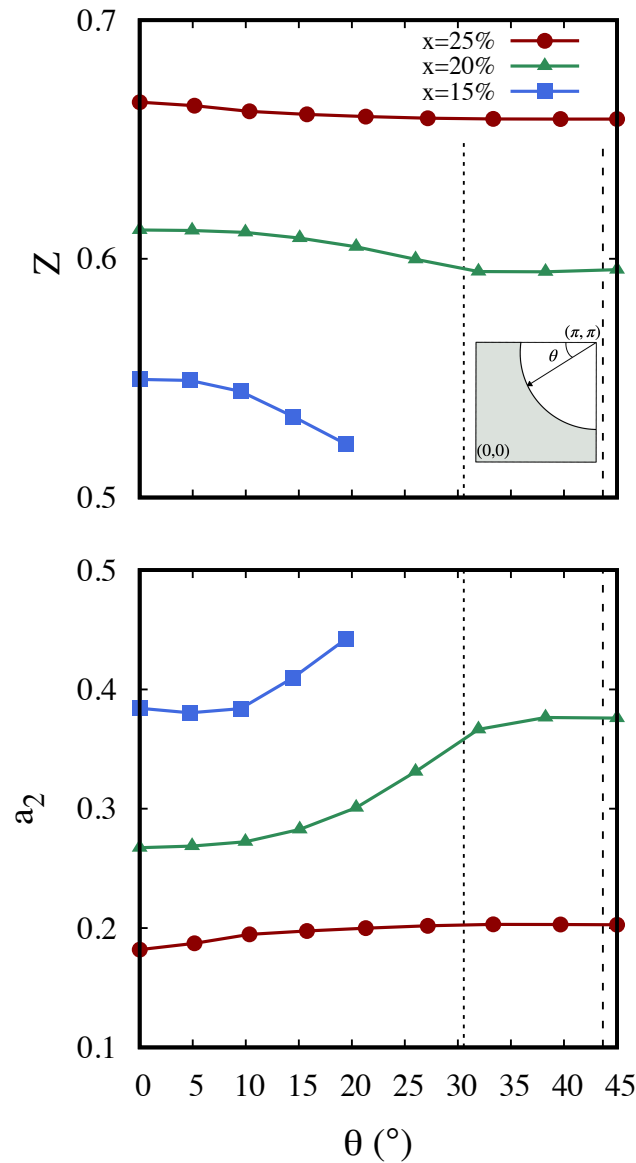
Au dopage  $x = 0.15$ , tant  $Z$  que  $a_2$  sont non-définis pour des angles près du point chaud. La forme liquide de Fermi de la self-énergie n'est pas valide près du point chaud et du noeud lorsque le pseudogap antiferromagnétique est présent [74]. En effet, pour ces paramètres d'angle et de dopage, le coefficient  $a_1$  dans la partie réelle de la self-énergie  $\Sigma'$  ne peut pas être calculé par la

méthode de lissage décrite précédemment : ce coefficient change de signe près des points chauds, dénotant la destruction des quasiparticules [73]. Nous avons déjà discuté de ces cas à la figure 5.2. Toutefois, même en présence du pseudogap antiferromagnétique au dopage  $x = 0.15$ , tant  $Z$  que  $a_2$  demeurent bien définis près de l'antinode. La partie imaginaire de la self-énergie à l'antinode conserve la forme attendue par la théorie du liquide de Fermi à ce dopage, bien qu'il soit situé sous le point critique quantique antiferromagnétique.

Cette étude de  $Z$  et de  $a_2$  en fonction de l'angle sur la surface de Fermi montre une destruction anisotrope des quasiparticules sur la surface de Fermi. Ceci est illustré par la persistance de quasiparticules bien définies à l'antinode sous le point critique quantique antiferromagnétique. De plus, cette destruction semble graduelle en fonction du dopage. Les fluctuations antiferromagnétiques influencent déjà les quasiparticules même lorsque le pseudogap antiferromagnétique n'est pas encore présent, tel qu'illustré par l'augmentation de  $a_2$  avec l'angle  $\theta$  près du point chaud au dopage  $x = 0.20$ .

Une dépendance en angle du coefficient  $a_2$  analogue à ce que nous avons observé ici a déjà été mesurée par ARPES dans le cuprate dopé en trous LSCO dans le régime sur-dopé, à l'extérieur de la phase pseudogap [195]. Ces résultats sont présentés à la figure 3 (c) de la référence [195]. Dans le cas de LSCO, le coefficient  $a_2$  est stable autour du noeud et augmente lorsque l'angle diminue vers l'antinode, avant de disparaître complètement près d'un angle  $\simeq 15^\circ$  sur la surface de Fermi. Ce comportement est analogue à celui que nous décrivons ici, mais les rôles du noeud et de l'antinode sont inversés. Dans les cuprates dopés en trous, le pseudogap apparaît dans la région antinodale de la surface de Fermi, alors qu'il apparaît aux points chauds (près du noeud) dans les cuprates dopés en électrons. Le cas de LSCO illustre ainsi que différentes portions de la surface de Fermi peuvent être influencées de façon drastiquement différentes par les interactions, de façon analogue à ce que nous avons vu dans nos calculs.

Des mesures d'ARPES plus récentes ont montré que le coefficient  $a_2$  dans le cuprate dopé en électrons PLCCO est constant en fonction de l'angle sur la surface de Fermi dans le régime sur-dopé [183]. Ces résultats sont présentés à la figure 2 (g) de la référence [183]. Ces résultats expérimentaux sont similaires à nos résultats pour  $x = 0.25$ , loin du point critique quantique antiferromagnétique. Notons que la méthode de recuit protégé a été utilisée pour l'échantillon sur lequel ces mesures ont été réalisées. Cette méthode de recuit mène à une atténuation des fluctuations antiferromagnétiques [147]. La surface de Fermi bien définie obtenue pour cet échantillon est analogue à la surface de Fermi que nous obtenons pour nos calculs au dopage  $x = 0.25$ .



**FIGURE 5.4** Paramètres du liquide de Fermi en fonction de l'angle sur la surface de Fermi  $\theta$ . Les résultats sont montrés pour les trois dopages :  $x = 0.15$  (bleu),  $x = 0.20$  (vert) et  $x = 0.25$  (rouge). La figure supérieure montre le poids de quasiparticule  $Z$ . La figure inférieure montre le coefficient du terme en  $\omega^2$  de la self-énergie en unités de  $1/t$ . Les lignes pointillées et hachurées montrent l'angle correspondant au point chaud pour les dopages  $x = 0.15$  et  $x = 0.20$  respectivement. L'angle sur la surface de Fermi  $\theta$  est défini tel qu'illustré dans l'encart de la figure supérieure, avec  $\theta = 0^\circ$  l'antinode et  $\theta = 45^\circ$  le nœud. Les calculs sont réalisés dans la gamme de températures  $T = 0.02t$  à  $T = 0.04t$  pour  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ . Pour  $x = 0.15$ , nous avons fait les calculs entre  $T = 0.04t$  et  $T = 0.05t$  parce que l'approche TPSC n'est pas valide lorsque la température est très basse par rapport à la température  $T^*$  d'ouverture du pseudogap. Figure tirée de la référence [1].

### 5.3.2 Renormalisation de la masse des quasiparticules

Nous passons maintenant à une seconde façon de déterminer si les quasiparticules sont bien définies le long de la surface de Fermi, soit par le calcul de la masse effective  $m^*$ . La masse effective est calculée en fonction du poids de quasiparticule  $Z$  et de la dépendance en vecteur d'onde de la self-énergie

$$\frac{m}{m^*} = Z \left( 1 + \frac{\partial \Sigma'(\mathbf{k}, \omega = 0)}{\partial \tilde{\zeta}_{\mathbf{k}}} \right), \quad (5.8)$$

$$\frac{\partial \Sigma'(\mathbf{k}, \omega = 0)}{\partial \tilde{\zeta}_{\mathbf{k}}} = \frac{\hat{e}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \Sigma'(\mathbf{k}, \omega = 0)}{\hat{e}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{\zeta}_{\mathbf{k}}}. \quad (5.9)$$

Nous calculons les gradients par des petites différences en vecteur d'onde  $\Delta k$  :  $\nabla_{\mathbf{k}} \Sigma'(\mathbf{k}) \simeq (\Sigma'(\mathbf{k} \pm \Delta k) - \Sigma'(\mathbf{k})) / \Delta k$ . Nous déterminons si la masse effective est bien définie ou non en comparant les dérivées calculées avec des valeurs positives et négatives de  $\Delta k$ .

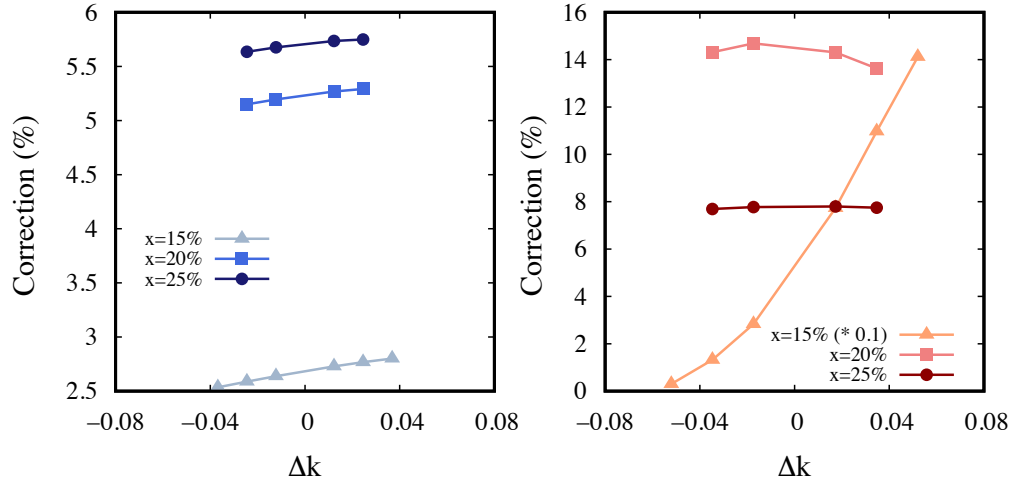
Pour obtenir la correction à la masse effective (équation 5.9), nous faisons un lissage polynomial de second degré sur les trois premières fréquences de Matsubara de la partie réelle de la self-énergie pour en extraire une valeur approximative de  $\Sigma'(\mathbf{k}, \omega = 0)$ . Nous répétons ce processus pour plusieurs valeurs du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  dans des directions perpendiculaires aux vecteurs d'onde d'intérêt, soit le noeud et l'antinoeud. Ensuite, nous calculons les gradients de la self-énergie par différences finies

$$\nabla_{\mathbf{k}} \Sigma'(\mathbf{k}) \simeq (\Sigma'(\mathbf{k} \pm \Delta k) - \Sigma'(\mathbf{k})) / \Delta k. \quad (5.10)$$

Les valeurs que nous obtenons à partir de l'équation 5.9 sont montrées à la figure 5.5. Nous pouvons y voir un désaccord significatif entre les dérivées obtenues par les valeurs positive et négative de  $\Delta k$  pour le dopage  $x = 0.15$  au noeud.

Nous énumérons également nos résultats des corrections à la masse effective au tableau 5.1. Nous y observons que la correction à la masse effective est bien définie à l'antinoeud pour les trois dopages d'intérêt, puisque les dérivées calculées avec des valeurs positive et négative de  $\Delta k$  sont égales et que les corrections sont relativement petites, de l'ordre de 5%. Ces considérations s'appliquent également au noeud pour le dopage  $x = 0.25$ , loin du point critique quantique. Toutefois, au noeud pour le dopage  $x = 0.20$ , la correction est plus grande d'un ordre de grandeur. Ceci indique une forte dépendance en vecteur d'onde pour ce dopage au noeud, même si ce cas est dépourvu de pseudogap antiferromagnétique. Pour le dopage  $x = 0.15$ , au noeud, la correction est beaucoup plus grande, et les dérivées calculées avec  $\pm \Delta k$  sont en désaccord. Ces résultats sont cohérents avec notre discussion de la dépendance en angle et en dopage de  $Z$  et de  $a_2$ , et renforcent notre conclusion que les quasiparticules du liquide de Fermi persistent à l'antinoeud pour  $x = 0.15$ .





**FIGURE 5.5** Correction à la masse effective définie par l'équation 5.9 en fonction du dopage et de la valeur de la différence finie  $\Delta k$ . La figure de gauche montre les corrections à l'antinode, tandis que la figure de droite montre les corrections au noeud. La correction au noeud pour  $x = 0.15$  est divisée par 10 dans la figure pour l'illustrer sur le même axe que les corrections pour les autres dopages. Les calculs ont été faits à  $T = 0.02$  pour les dopages  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ , et à  $T = 0.04$  pour le dopage  $x = 0.15$ . Figure tirée de la référence [1].

|                 | $x = 0.15$ | $x = 0.20$ | $x = 0.25$ |
|-----------------|------------|------------|------------|
| AN, $-\Delta k$ | 2.6        | 5.2        | 5.7        |
| AN, $+\Delta k$ | 2.8        | 5.3        | 5.7        |
| N, $-\Delta k$  | 28         | 15         | 7.8        |
| N, $+\Delta k$  | 77         | 14         | 7.8        |

**TABLEAU 5.1** Corrections à la masse effective, en pourcentage, calculées par l'équation 5.9. Les calculs ont été faits à  $T = 0.02$  pour les dopages  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ , et à  $T = 0.04$  pour le dopage  $x = 0.15$ . Les valeurs de  $\Delta k$  sont 0.12 pour l'antinode et 0.17 pour le noeud. Tableau tiré de la référence [1].

### 5.3.3 Loi d'échelle pour la dépendance en température de la self-énergie

Dans cette section, nous étudions la dépendance en température de la self-énergie puisque nous pouvons y déceler une autre signature de l'anisotropie entre les quasiparticules au noeud et à l'antinoeud. Pour ce faire, nous suivons l'annexe B de la référence [22]. Nous commençons par supposer que la partie imaginaire de la self-énergie suit une loi d'échelle en  $\omega/T$

$$\Sigma''(\omega) = a(\pi T)^\nu \phi\left(\frac{\omega}{\pi T}\right), \quad (5.11)$$

où  $a$  est une constante. L'exposant  $\nu$  permet de caractériser le type de quasiparticule :  $\nu = 2$  correspond à un comportement associé au liquide de Fermi, tandis que  $\nu < 2$  correspond au cas non-liquide de Fermi.

Nous décrivons maintenant la procédure permettant d'obtenir l'exposant  $\nu$  à la fréquence nulle  $\omega = 0$ . Si nous supposons que la loi d'échelle de la forme décrite par l'équation 5.11 est valide, alors la dépendance en température  $T^\nu$  de la partie imaginaire de la self-énergie peut être déduite d'un lissage de la self-énergie en fréquences de Matsubara. Pour ce faire, nous utilisons la représentation spectrale de la self-énergie

$$\Sigma(ik_n) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\Sigma''(\omega)}{\omega - ik_n}. \quad (5.12)$$

Ensuite, nous faisons un lissage linéaire sur les deux premières fréquences de Matsubara  $k_0 = \pi T$  et  $k_1 = 3\pi T$

$$\text{Im}\Sigma^{\text{fit}}(ik_n) = \alpha_0(T) + \alpha_1(T)k_n, \quad (5.13)$$

où les coefficients  $\alpha_i$  sont définis par

$$\alpha_0 = \frac{3\text{Im}\Sigma(ik_0) - \text{Im}\Sigma(ik_1)}{2}, \quad (5.14)$$

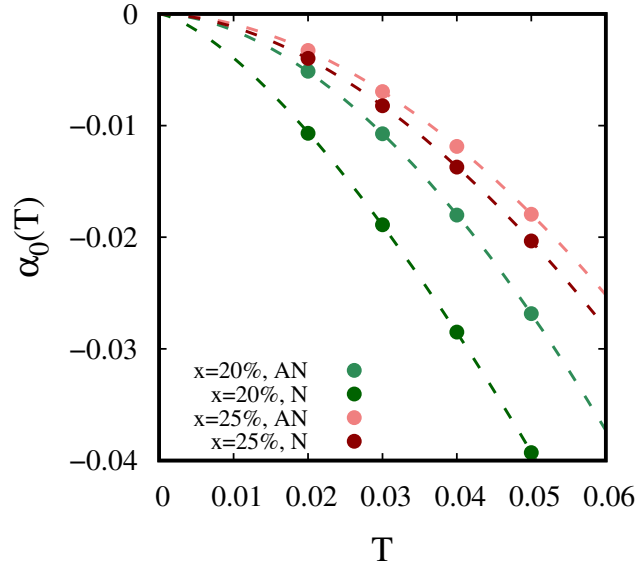
$$\alpha_1 = \frac{\text{Im}\Sigma(ik_1) - \text{Im}\Sigma(ik_0)}{2\pi T}. \quad (5.15)$$

En substituant  $\text{Im}\Sigma^{\text{fit}}(ik_0)$  et  $\text{Im}\Sigma^{\text{fit}}(ik_1)$  dans la représentation spectrale de la self-énergie (équation 5.12), et en utilisant la loi d'échelle 5.11, nous pouvons obtenir la dépendance en température  $T^\nu$  par le paramètre  $\alpha_0$ . En effet, nous calculons

$$\Sigma(ik_n) = a(\pi T)^\nu \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\phi(\frac{\omega}{\pi T})}{\omega - ik_n}, \quad (5.16)$$

$$\Rightarrow \text{Im}\Sigma(ik_n) = a(\pi T)^\nu \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{k_n \phi(\frac{\omega}{\pi T})}{\omega^2 + k_n^2}, \quad (5.17)$$

Nous pouvons faire le changement de variable  $x \equiv \omega/\pi T$  dans l'intégrale précédente, en utilisant



**FIGURE 5.6** Coefficient  $\alpha_0$  en fonction de la température pour les dopages  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$  à l'antinoeud et au noeud. Les points sont obtenus par l'équation 5.14. Les lignes pointillées sont des lissages sous la forme de l'équation 5.20, soit  $AT^\nu$ . Figure tirée de la référence [1].

la définition des fréquences de Matsubara fermioniques  $k_n = (2n + 1)\pi T$

$$\begin{aligned}
 \text{Im}\Sigma(ik_n) &= a(\pi T)^\nu \int \frac{d\omega}{\pi^3 T^2} \frac{(2n+1)\pi T \phi(\frac{\omega}{\pi T})}{(\frac{\omega}{\pi T})^2 + (2n+1)^2}, \\
 &= a(\pi T)^\nu \frac{(2n+1)}{\pi} \int \frac{d\omega}{\pi T} \frac{\phi(\frac{\omega}{\pi T})}{(\frac{\omega}{\pi T})^2 + (2n+1)^2}, \\
 &= a(\pi T)^\nu \frac{(2n+1)}{\pi} \int dx \frac{\phi(x)}{x^2 + (2n+1)^2}.
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Nous obtenons ainsi

$$\alpha_0(T) = a(\pi T)^\nu \frac{3}{2\pi} \left[ \int dx \frac{\phi(x)}{x^2 + 1} - \int dx \frac{\phi(x)}{x^2 + 9} \right]. \tag{5.19}$$

Par conséquent, la dépendance en température du paramètre de lissage  $\alpha_0$  est

$$\alpha_0 \propto T^\nu. \tag{5.20}$$

Nous pouvons ainsi obtenir l'exposant  $\nu$  en traçant le paramètre  $\alpha_0$  en fonction de la température. La figure 5.6 montre le paramètre  $\alpha_0$  obtenu en fonction de la température, pour les dopages  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ , à l'antinoeud et au noeud. Les points sont les résultats obtenus par l'équation 5.14, tandis que les lignes pointillées correspondent au lissage en  $T^\nu$ .

Nous pouvons également évaluer la dépendance en température  $T^\nu$  en utilisant un lissage

quadratique sur les trois premières fréquences de Matsubara

$$\text{Im}\Sigma^{\text{fit}}(ik_n) = \tilde{\alpha}_0(T) + \tilde{\alpha}_1(T)k_n + \tilde{\alpha}_2(T)k_n^2, \quad (5.21)$$

où le paramètre  $\tilde{\alpha}_0$  est

$$\tilde{\alpha}_0 = \frac{1}{16} [30\text{Im}\Sigma(ik_0) - 20\text{Im}\Sigma(ik_1) + 6\text{Im}\Sigma(ik_2)]. \quad (5.22)$$

Nous pouvons substituer la loi d'échelle (plus précisément, l'équation 5.18) dans l'équation précédente pour obtenir une nouvelle expression pour  $\tilde{\alpha}_0$

$$\tilde{\alpha}_0 = \frac{30a(\pi T)^\nu}{16\pi} \left[ \int dx \frac{\phi(x)}{x^2 + 1} - 2 \int dx \frac{\phi(x)}{x^2 + 9} + \int dx \frac{\phi(x)}{x^2 + 25} \right], \quad (5.23)$$

$$\Rightarrow \tilde{\alpha}_0 \propto T^\nu. \quad (5.24)$$

Ainsi, l'équation 5.20 est valide tant pour le lissage linéaire que pour le lissage quadratique, mais la constante de proportionnalité dépend du degré du polynôme du lissage. En revanche, l'exposant  $\nu$  ne dépend pas du type de lissage effectué.

Nous montrons au tableau 5.2 les exposants  $\nu$  obtenus pour le lissage linéaire sur les deux premières fréquences de Matsubara et le lissage quadratique sur les trois premières fréquences de Matsubara. Les résultats sont obtenus au noeud et à l'antinoeud pour les dopages  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ . Nous pouvons voir que les exposants calculés ne dépendent pas fortement du type de lissage. Nous montrons que  $\nu \simeq 2$  aux deux dopages à l'antinoeud. Au noeud, nous obtenons également  $\nu \simeq 2$  pour le dopage  $x = 0.25$ . Ce n'est pas le cas pour le dopage  $x = 0.20$ , où nous obtenons  $\nu \simeq 1.4$  au noeud. De façon analogue à nos calculs de  $a_2$  en fonction de l'angle sur la surface de Fermi, cette analyse de la dépendance en température de la self-énergie montre que les quasiparticules du liquide de Fermi sont persistantes près de l'antinoeud, alors que les signes d'instabilité apparaissent au noeud à  $x = 0.20$ .

## 5.4 Force des corrélations électroniques

Dans cette section, nous tentons de déterminer des façons de quantifier la force des interactions électroniques dans les matériaux à partir des propriétés du liquide de Fermi. Il a été suggéré que la fréquence de coupure du liquide de Fermi  $\omega_c$ , soit la fréquence à laquelle le comportement en  $\omega^2$  de la partie imaginaire de la self-énergie disparaît, peut indiquer la force des interactions dans un matériau corrélé [183]. Nous débutons cette section par le calcul de la fréquence de coupure  $\omega_c$  à la sous-section 5.4.1. Ensuite, à la sous-section 5.4.2, nous analysons une formulation spectroscopique

|                     | $x = 0.20$ |       | $x = 0.25$ |       |
|---------------------|------------|-------|------------|-------|
|                     | Antinoeud  | Noeud | Antinoeud  | Noeud |
| Lissage linéaire    | 1.8        | 1.4   | 1.9        | 1.8   |
| Lissage quadratique | 2.0        | 1.4   | 2.0        | 1.9   |

**TABLEAU 5.2** Exposant  $\nu$  pour la dépendance en température  $T^\nu$  de la partie imaginaire de la self-énergie, en supposant qu'elle respecte une loi d'échelle  $\omega/T$ . Les exposants sont obtenus par les méthodes de lissage linéaire et quadratique décrites entre les équations 5.11 et 5.20.

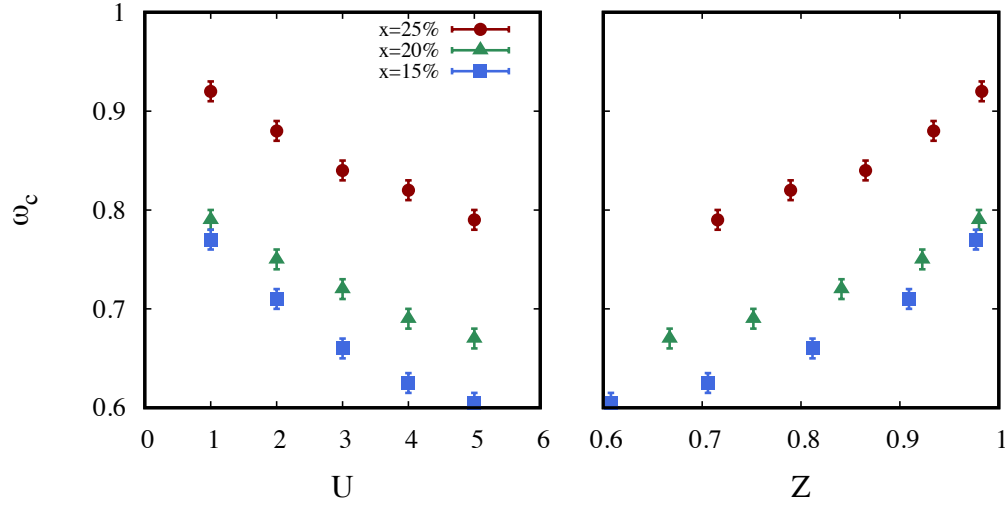
du ratio de Kadowaki-Woods et proposons un ratio alternatif permettant de mesurer la force des corrélations.

#### 5.4.1 Fréquence de coupure

Dans cette section, nous cherchons à calculer la fréquence de coupure  $\omega_c$ . Évidemment, déterminer la fréquence de coupure  $\omega_c$  est quelque peu arbitraire. Nous considérons que nous pouvons obtenir des résultats cohérents pourvu que nous adhérons à une définition claire. Nous utilisons d'abord la self-énergie en fréquences de Matsubara obtenue par les calculs TPSC, où nous incluons une interpolation linéaire entre les points aux fréquences discrètes. Nous faisons de plus un lissage avec la forme liquide de Fermi attendue pour la self-énergie (équation 5.2). Nous calculons ensuite la déviation entre ces deux quantités, soit la self-énergie interpolée et le lissage. Nous définissons la fréquence de coupure  $\omega_c$  comme étant la fréquence à laquelle cette déviation atteint une valeur précise (en pratique, 10%, 15% ou 20%) à la température fixe  $T = 0.02$ .

Tel que mentionné plus tôt, il a été proposé expérimentalement que la fréquence de coupure  $\omega_c$  peut être utilisée pour quantifier la force des corrélations électroniques dans un matériau. Afin de vérifier si l'approche TPSC peut reproduire cette proposition expérimentale, nous calculons la fréquence de coupure pour les trois dopages  $x = 0.15$ ,  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ , à l'antinoeud, pour des valeurs de  $U$  allant de 1 à 5.

À la figure 5.7, nous montrons la fréquence de coupure  $\omega_c$  en fonction de l'interaction  $U$  et du poids de quasiparticule  $Z$ . Dans ce graphique, nous montrons les valeurs de  $\omega_c$  obtenues par une déviation de 15% entre la self-énergie en fréquences de Matsubara et le lissage sous la forme liquide de Fermi. Utiliser une déviation de 10% ou de 20% pour déterminer  $\omega_c$  ne change pas qualitativement nos résultats. Nous voyons que la fréquence de coupure diminue quand  $U$  augmente et, réciproquement, qu'elle augmente avec  $Z$ . De plus, pour une valeur fixe de  $U$ , la fréquence de coupure augmente avec le dopage :  $\omega_c$  est une mesure des corrélations électroniques dans un sens



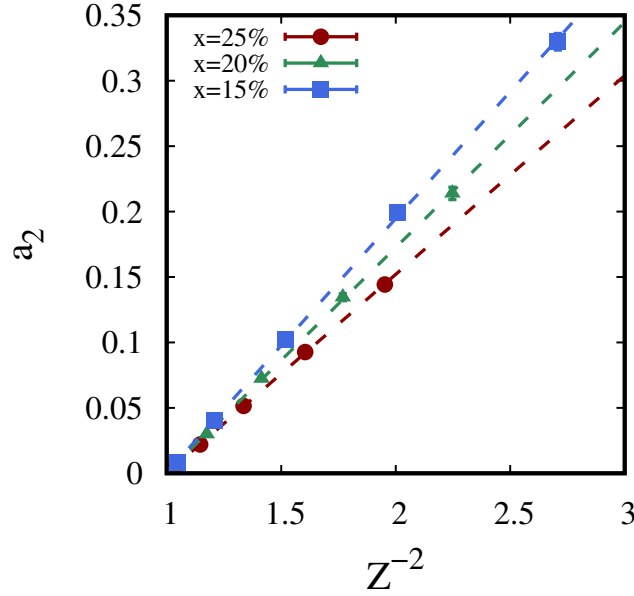
**FIGURE 5.7** Fréquence de coupure  $\omega_c$  (en unités du paramètre de saut  $t$ ) en fonction de la force de l'interaction  $U$  (à gauche) et du poids de quasiparticle  $Z$  (à droite). Tous les calculs ont été faits à l'antinode, pour les dopages  $x = 0.25$  (rouge),  $x = 0.20$  (vert) et  $x = 0.15$  (bleu). Figure tirée de la référence [1].

plus large que la seule valeur de  $U$ . Expérimentalement, des mesures de la fréquence de coupure ont été faites pour le cuprate dopé en trous LSCO [195] et le cuprate dopé en électrons PLCCO [183]. Il a été montré que la fréquence  $\omega_c$  est plus petite dans LSCO que dans PLCCO [183]. Cette observation est cohérente avec des propositions théoriques antérieures suggérant que les cuprates dopés en trous sont plus fortement corrélés que les cuprates dopés en électrons [20, 203, 204].

Il est toutefois difficile de déterminer une relation précise entre la fréquence de coupure  $\omega_c$  et  $U$  ou  $Z$ . Le problème principal vient du calcul de  $\omega_c$  en lui-même, que nous faisons en fréquences de Matsubara. La partie imaginaire de la self-énergie en fréquences de Matsubara comporte des termes de l'ordre  $\mathcal{O}(k_n^3)$  qui, après le prolongement analytique, contribuent à la partie réelle de la self-énergie en fréquence réelle  $\Sigma'$  et non à sa partie imaginaire  $\Sigma''$ . Il est donc possible que nous sous-estimions la valeur de  $\omega_c$  en raison de ces termes dans la self-énergie en fréquences de Matsubara. Finalement, tant le poids de quasiparticle  $Z$  que la fréquence de coupure  $\omega_c$  dépendent du vecteur d'onde. Il est donc difficile d'établir une relation unique entre ces quantités et la force de l'interaction locale  $U$ .

#### 5.4.2 Ratio de Kadowaki-Woods spectroscopique

Dans sa formulation originale, le ratio de Kadowaki-Woods [205, 206] est calculé à partir de la résistivité et de la chaleur spécifique d'un matériau et n'est pas réellement universel. Il dépend fortement du matériau, et peut même varier significativement au sein d'une même famille de matériaux [207]. Dans la référence [183], un analogue spectroscopique du ratio de Kadowaki-



**FIGURE 5.8** Ratio de Kadowaki-Woods dans la formulation spectroscopique introduite dans la référence [183], avec  $a_2$  le coefficient du terme en  $\omega^2$  de la partie imaginaire de la self-énergie en unités de  $1/t$  et  $Z$  le poids de quasiparticule. Ici, tous les points sont calculés à des valeurs différentes de  $U$  (montrées à la figure 5.7), à l’antinoeud, pour les dopages  $x = 0.25$  (rouge),  $x = 0.20$  (vert) et  $x = 0.15$  (bleu). Figure tirée de la référence [1].

Woods reliant le coefficient  $a_2$  au poids de quasiparticule  $Z$  a été proposé en tant que mesure des corrélations électroniques. Ce ratio est

$$a_2 \propto Z^{-2}. \quad (5.25)$$

Nous expliquons plus bas, en détail, d’où provient cette relation de proportionnalité. Elle est reliée au ratio de Kadowaki-Woods  $A/\gamma$ , où  $A$  est le coefficient du terme en  $T^2$  de la résistivité et  $\gamma$  le coefficient du terme linéaire en température de la chaleur spécifique, par le fait que ces coefficients peuvent être calculés à partir de la self-énergie, tout comme les paramètres  $a_2$  et  $Z$  [207].

Ayant calculé les paramètres  $Z$  et  $a_2$  du liquide de Fermi en fonction de  $U$  à trois dopages, nous les traçons à la figure 5.8 sous la forme proposée (équation 5.25). Nous montrons que ce ratio n’est pas universel dans nos calculs : le facteur de proportionnalité (la pente) dépend fortement du dopage. Nous nous intéressons maintenant à la cause de la non-universalité du ratio donné par l’équation 5.25, et proposons une formulation alternative du ratio spectroscopique.

Afin d’étudier le sens de l’équation 5.25, nous utilisons le formalisme de la référence [207]. Nous écrivons la self-énergie d’un liquide de Fermi comme

$$\Sigma''(\omega, T) = \begin{cases} -a((\pi T)^2 + \omega^2) & \omega < \omega_c, \\ F(\frac{\omega}{\omega_c}) & \omega > \omega_c. \end{cases} \quad (5.26)$$

Dans l'équation précédente,  $F(\omega/\omega_c)$  est une fonction qui tombe à 0 lorsque la fréquence est grande et conserve la continuité de  $\Sigma''(\omega, T)$  à la fréquence de coupure  $\omega = \omega_c$ . Nous supposons également que cette fonction est symétrique :  $F(\omega/\omega_c) = F(-\omega/\omega_c)$ . Nous calculons maintenant la self-énergie en fréquences de Matsubara en utilisant la représentation spectrale

$$\Sigma(ik_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\Sigma''(\omega, T)}{\omega - ik_n}. \quad (5.27)$$

Nous y substituons la forme liquide de Fermi de la self-énergie (équation 5.26)

$$\Sigma(ik_n) = \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \frac{(-a(\pi T)^2 - a\omega^2)}{\omega - ik_n} + \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})}{\omega - ik_n} + \int_{-\infty}^{-\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})}{\omega - ik_n}, \quad (5.28)$$

que nous réécrivons en multipliant au numérateur et au dénominateur par le complexe conjugué  $\omega + ik_n$

$$\Sigma(ik_n) = \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \frac{(-a(\pi T)^2 - a\omega^2)(\omega + ik_n)}{\omega^2 + k_n^2} + \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})(\omega + ik_n)}{\omega^2 + k_n^2} + \int_{-\infty}^{-\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})(\omega + ik_n)}{\omega^2 + k_n^2}. \quad (5.29)$$

Nous nous intéressons à la partie imaginaire uniquement, qui est

$$\text{Im}\Sigma(ik_n) = k_n \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \frac{(-a(\pi T)^2 - a\omega^2)}{\omega^2 + k_n^2} + 2k_n \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})}{\omega^2 + k_n^2}. \quad (5.30)$$

La première intégrale peut être résolue analytiquement. En effet, nous pouvons calculer

$$k_n \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \frac{(-a(\pi T)^2 - a\omega^2)}{\omega^2 + k_n^2} = -\frac{2ak_n}{\pi} \left[ \frac{(\pi T)^2}{k_n} - k_n \right] \arctan\left(\frac{\omega_c}{k_n}\right) - \frac{2ak_n\omega_c}{\pi}. \quad (5.31)$$

Cette équation peut être simplifiée. En effet, puisque nous voulons obtenir le développement de la self-énergie du liquide de Fermi, nous nous intéressons au cas  $k_n \ll \omega_c$ . L'arctangente peut être développée dans cette limite :  $\arctan(y) \simeq \pi/2 - 1/y$  pour  $y \gg 1$ . L'équation précédente peut ainsi être réécrite comme

$$\begin{aligned} k_n \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \frac{(-a(\pi T)^2 - a\omega^2)}{\omega^2 + k_n^2} &\simeq -\frac{2ak_n}{\pi} \left[ \frac{(\pi T)^2}{k_n} - k_n \right] \left( \frac{\pi}{2} - \frac{k_n}{\omega_c} \right) - \frac{2ak_n\omega_c}{\pi}, \\ &= -a(\pi T)^2 + 2a\pi T^2 \frac{k_n}{\omega_c} + ak_n^2 - \frac{2ak_n^3}{\pi\omega_c} - \frac{2ak_n\omega_c}{\pi}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

La seconde intégrale ne peut être résolue exactement puisque nous ne connaissons pas la forme de la fonction de coupure  $F(y)$ . Toutefois, nous pouvons la simplifier en développant le



dénominateur

$$\begin{aligned}
2k_n \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})}{\omega^2 + k_n^2} &= 2k_n \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})}{\omega^2} \frac{1}{1 + (\frac{k_n}{\omega})^2}, \\
&= 2k_n \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi \omega_c^2} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})}{(\omega/\omega_c)^2} \frac{1}{1 + (\frac{k_n/\omega_c}{\omega/\omega_c})^2}, \\
&= 2 \frac{k_n}{\pi \omega_c} \int_1^{\infty} dx \frac{F(x)}{x^2} \frac{1}{1 + (\frac{x'}{x})^2}.
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Dans la dernière équation, nous avons posé  $x' \equiv k_n/\omega_c$ . Puisque nous voulons obtenir le développement de la self-énergie du liquide de Fermi, nous nous intéressons uniquement aux basses fréquences de Matsubara. Dans l'intégrale précédente, comme  $\omega > \omega_c$ , nous utilisons le développement  $(1 + y^2)^{-1} \simeq 1 - y^2 + \mathcal{O}(y^4)$ . Nous obtenons ainsi

$$2k_n \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{F(\frac{\omega}{\omega_c})}{\omega^2 + k_n^2} = 2 \frac{k_n}{\pi \omega_c} \int_1^{\infty} dx \frac{F(x)}{x^2} - 2 \frac{k_n^3}{\pi \omega_c^3} \int_1^{\infty} dx \frac{F(x)}{x^4}. \tag{5.34}$$

Nous regroupons les équations 5.32 et 5.34 pour obtenir une expression pour la partie imaginaire de la self-énergie, dans laquelle nous négligeons les termes en  $k_n^3$  ainsi que le terme linéaire en  $k_n$  qui dépend de la température (une approximation valide à basse température). La partie imaginaire de la self-énergie est finalement

$$\text{Im}\Sigma(ik_n) = -a(\pi T)^2 + ak_n^2 + k_n \frac{4a\omega_c}{\pi} \left[ -\frac{1}{2} + \frac{1}{2a\omega_c^2} \int_1^{\infty} dx \frac{F(x)}{x^2} \right]. \tag{5.35}$$

À partir de ce qui précède, les coefficients  $a_0$ ,  $a_1$  et  $a_2$  que nous avons définis plus tôt prennent la forme

$$a_0(T) = -a(\pi T)^2, \tag{5.36}$$

$$a_1 = -\frac{4a\omega_c \zeta}{\pi}, \tag{5.37}$$

$$a_2 = a, \tag{5.38}$$

où  $\zeta$  est une "constante" qui dépend de la fonction de coupure  $F(\omega/\omega_c)$ . Cette constante est

$$\zeta = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{1}{a\omega_c^2} \int_1^{\infty} dy \frac{F(y)}{y^2} \right). \tag{5.39}$$

Dans la référence [207], Jacko *et al* considèrent une fonction de coupure qui décroît de façon monotone entre la fréquence de coupure  $\omega = \omega_c$  et la limite de grande fréquence  $\omega \rightarrow \infty$ . Par définition, la fonction de coupure maintient la continuité à la fréquence de coupure  $\omega_c$ , ce qui implique que  $F(y = 1) = a\omega_c^2$ . Cela implique que  $1/2 < \zeta < 1$  pour une fonction de coupure qui

décroit monotonement. Cette hypothèse pour la forme de la fonction de coupure n'est pas valide pour la self-énergie que nous obtenons de nos calculs TPSC. Nous obtenons plutôt que  $\zeta$  prend des valeurs entre 2 et 4, selon le dopage, le vecteur d'onde et le choix de fréquence de coupure. Le paramètre  $\zeta$  n'est donc pas une constante universelle. Dans nos calculs TPSC, cela pourrait être dû au fait que la fonction de coupure ne décroît pas de façon monotone.

Pour vérifier la cohérence de nos calculs, nous utilisons une relation de Kramers-Kronig pour calculer, en fréquences réelles, la partie réelle de la self-énergie à partir de sa partie imaginaire (donnée par l'équation 5.26). Cette évaluation est distincte du calcul précédent utilisant la représentation en fréquences de Matsubara. La relation de Kramers-Kronig est, à température nulle,

$$\Sigma'(\omega, 0) = \Sigma'(\omega \rightarrow \infty, 0) + \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\Sigma''(\omega', 0)}{\omega' - \omega}. \quad (5.40)$$

Nous y substituons la forme liquide de Fermi de la self-énergie à température nulle et obtenons

$$\Sigma'(\omega, 0) = \Sigma'(\omega \rightarrow \infty, 0) - \frac{a}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\omega' \frac{\omega'^2}{\omega' - \omega} + \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{\omega_c}^{\infty} d\omega' \frac{F(\omega'/\omega_c)}{\omega' - \omega} + \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{-\omega_c} d\omega' \frac{F(\omega'/\omega_c)}{\omega' - \omega}.$$

Afin de clarifier les étapes de calcul, nous détaillons le calcul des trois intégrales une à la fois. La première peut être résolue analytiquement

$$\frac{a}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\omega' \frac{\omega'^2}{\omega' - \omega} = \frac{a}{\pi} \left[ \omega^2 \ln \left| \frac{\omega - \omega_c}{\omega_c + \omega} \right| + 2\omega\omega_c \right]. \quad (5.41)$$

Dans la limite de basse fréquence  $\omega \ll \omega_c$ , le logarithme s'annule et nous obtenons

$$\frac{a}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\omega' \frac{\omega'^2}{\omega' - \omega} \simeq 2\frac{a}{\pi} \omega\omega_c. \quad (5.42)$$

Pour la seconde intégrale, ne connaissant pas la forme de la fonction de coupure, nous nous intéressons une fois de plus au cas  $\omega \ll \omega_c$  et calculons

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{\omega_c}^{\infty} d\omega' \frac{F(\omega'/\omega_c)}{\omega' - \omega} &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{\omega_c}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega_c} \frac{F(\omega'/\omega_c)}{\frac{\omega'}{\omega_c} - \frac{\omega}{\omega_c}}, \\ &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_1^{\infty} dx' \frac{F(x')}{x' - \frac{\omega}{\omega_c}}, \\ &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_1^{\infty} dx' \frac{F(x')}{x'} \left[ 1 + \frac{\omega}{x'\omega_c} + \frac{\omega^2}{x'^2\omega_c^2} + \mathcal{O}\left(\frac{\omega^3}{x'^3\omega_c^3}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Nous faisons un développement similaire pour le calcul de la dernière intégrale

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{-\omega_c} d\omega' \frac{F(\omega'/\omega_c)}{\omega' - \omega} &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{-\omega_c} \frac{d\omega'}{\omega_c} \frac{F(\omega'/\omega_c)}{\frac{\omega'}{\omega_c} - \frac{\omega}{\omega_c}}, \\
&= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{-1} dx' \frac{F(x')}{x' - \frac{\omega}{\omega_c}}, \\
&= -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{\infty}^1 du \frac{F(u)}{-u - \frac{\omega}{\omega_c}}, \\
&= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{\infty}^1 du \frac{F(u)}{u + \frac{\omega}{\omega_c}}, \\
&= -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_1^{\infty} du \frac{F(u)}{u + \frac{\omega}{\omega_c}}, \\
&= -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_1^{\infty} dx' \frac{F(x')}{x'} \left[ 1 - \frac{\omega}{x'\omega_c} + \frac{\omega^2}{x'^2\omega_c^2} - \mathcal{O}\left(\frac{\omega^3}{x'^3\omega_c^3}\right) \right]. \quad (5.44)
\end{aligned}$$

La somme de la deuxième intégrale et de la troisième intégrale mène à l'annulation de plusieurs termes. En ne conservant que le terme d'ordre inférieur en  $\omega/\omega_c$ , nous obtenons

$$\Sigma'(\omega, 0) = \Sigma'(\omega \rightarrow \infty, 0) - 2\frac{a}{\pi}\omega\omega_c + \frac{2\omega}{\pi\omega_c} \int_1^{\infty} dx' \frac{F(x')}{x'^2}. \quad (5.45)$$

Dans l'équation précédente, nous reconnaissons le coefficient de la dépendance en  $\omega$  de la partie réelle de la self-énergie. Nous obtenons en effet

$$\Rightarrow \Sigma'(\omega, 0) = \Sigma'(\omega \rightarrow \infty, 0) + a_1\omega. \quad (5.46)$$

où le coefficient  $a_1$  obtenu par la relation de Kramers-Kronig est le même que celui qui est défini par l'équation 5.37, qui avait été obtenu par la représentation spectrale de la self-énergie en fréquences de Matsubara. Il s'agit d'une vérification de la cohérence de nos calculs.

Ainsi, à partir de l'expression pour le poids de quasiparticule en fonction de  $a_1$  (équation 5.4), nous obtenons

$$Z_{\mathbf{k}}^{-1} - 1 = \frac{4\zeta_{\mathbf{k}}}{\pi} \omega_{c,\mathbf{k}} a_{2,\mathbf{k}}. \quad (5.47)$$

Nous avons écrit explicitement la dépendance en vecteur d'onde dans l'équation précédente. Dans la référence [207], la relation  $Z^{-2} \propto a_2$  avec un coefficient de proportionnalité qui ne dépend pas de la fréquence de coupure  $\omega_c$  provient de l'équation 5.47 en faisant les hypothèses suivantes : (1) Les interactions sont fortes ( $Z \ll 1$ ), ce qui implique que  $Z^{-1} - 1 \simeq Z^{-1}$ , et (2) Le coefficient  $a_2$  est défini par l'équation  $a_2 = s/\omega_c^2$ , où  $s$  est une quantité dépendant du matériau et ayant des unités d'énergie. Dans nos calculs, cependant, aucune de ces hypothèses n'est valide.

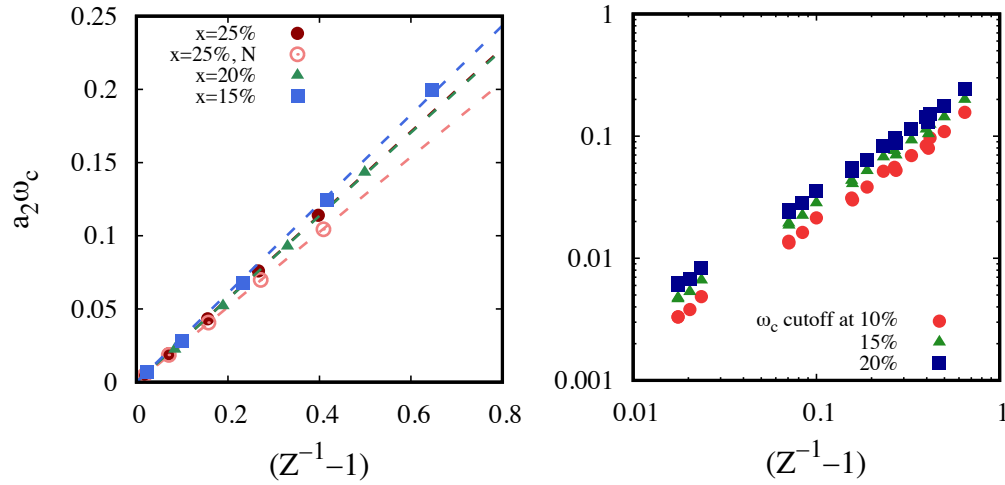
Pour ces raisons, nous étudions plutôt l'équation 5.47 sans faire davantage d'approximation, en

traçant directement le produit  $a_2\omega_c$  (un nombre sans dimension) en fonction de  $(Z^{-1} - 1)$ . Ce ratio est un résultat général qui, comme nous venons de le montrer, émerge naturellement de la relation de Kramers-Kronig. Le nombre  $a_2\omega_c$  peut en principe être extrait de mesures d'ARPES.

Nous montrons nos résultats à la figure 5.9. La figure de gauche montre le nombre  $a_2\omega_c$  en fonction de  $(Z^{-1} - 1)$  à l'antinoeud pour les dopages  $x = 0.15$ ,  $x = 0.20$  et  $x = 0.25$ , ainsi qu'au noeud pour  $x = 0.25$ . Les calculs ont été effectués en faisant varier la force de l'interaction  $U$  entre 1 et 5. La fréquence de coupure  $\omega_c$  a été obtenue pour une déviation de 15% entre le lissage liquide de Fermi et la self-énergie en fréquences de Matsubara. Nous réitérons que le coefficient  $\zeta_{\mathbf{k}}$  qui entre dans l'équation 5.47 dépend du matériau, du vecteur d'onde, ainsi que du critère qui définit la fréquence de coupure  $\omega_c$ . Ceci explique pourquoi les pentes dans la figure 5.9 sont légèrement différentes les unes des autres.

À la figure 5.9 à droite, nous montrons à nouveau  $a_2\omega_c$  en fonction de  $(Z^{-1} - 1)$ , mais cette fois-ci, sur une échelle log-log. Nous illustrons trois séries de données, chacune correspondant à une valeur différente de la déviation limite permettant de déterminer  $\omega_c$  : 10%, 15% et 20%. Chacune des séries de données contient les données pour les trois dopages, à l'antinoeud. Nous constatons que, sur cette échelle, seul le choix de la déviation limite pour le calcul de  $\omega_c$  a une influence visible sur le résultat. Notre conclusion générale est que le produit  $a_2\omega_c$  peut être utile pour quantifier la force des corrélations dans un matériau, bien qu'il ne soit pas lié au poids de quasiparticule par une relation strictement universelle.

La figure 5.9 illustre une façon de quantifier la force relative des interactions dans différents systèmes. Les deux quantités en jeu, soit le coefficient  $a_2$  de la dépendance en  $\omega^2$  de la self-énergie, et  $\omega_c$  la fréquence de coupure pour la dépendance en  $\omega^2$ , peuvent être obtenues expérimentalement par des mesures d'ARPES. Il serait possible de comparer la force des corrélations dans différents matériaux en utilisant la relation de proportionnalité entre  $a_2\omega_c$  et  $Z^{-1} - 1$ . Une telle comparaison nécessite toutefois un accord entre les groupes de recherche sur une manière commune de déterminer la fréquence de coupure  $\omega_c$ . Au moment d'écrire cette thèse, nous ne pouvons pas comparer quantitativement nos résultats aux mesures expérimentales puisque nous avons obtenu  $\omega_c$  à partir de la self-énergie en fréquences de Matsubara. Tout de même, en utilisant les données présentées dans les références [183] et [195], nous obtenons  $a_2\omega_c = 0.90 \pm 0.07$  pour PLCCO, et  $1.0 \pm 0.4 < a_2\omega_c < 1.7 \pm 0.2$  selon l'angle sur la surface de Fermi pour LSCO. Une fois de plus, notre analyse est en accord avec des prédictions théoriques selon lesquelles les cuprates dopés en trous sont plus fortement corrélés que les cuprates dopés en électrons [20, 203, 204].



**FIGURE 5.9** Ratio pour la force des interactions reliant la fréquence de coupure, le coefficient  $a_2$  et le poids de quasiparticule. Le produit de  $a_2$ , le coefficient du terme en  $\omega^2$  dans la partie imaginaire de la self-énergie  $\Sigma''$ , et de  $\omega_c$ , la fréquence de coupure, est relié au poids de quasiparticule par une relation de Kramers-Kronig. Ici, tous les points sont calculés pour différentes valeurs de  $U$  (montrées à la figure 5.7). La figure de gauche montre les données à l'antinode pour les dopages  $x = 0.25$  (rouge),  $x = 0.20$  (vert) et  $x = 0.15$  (bleu), ainsi qu'au noeud pour  $x = 0.25$  (rose). La fréquence de coupure  $\omega_c$  est calculée par une déviation relative de 15% entre le lissage liquide de Fermi et la self-énergie en fréquences de Matsubara. La figure de droite montre les données pour les dopages mentionnés plus tôt, sur une échelle log-log, avec  $\omega_c$  calculée pour trois différentes déviations limites : 10% (orange), 15% (vert) et 20% (bleu). Notons que, pour une déviation limite donnée pour la définition de  $\omega_c$ , tous les dopages dans la figure de gauche tombent sur la même ligne droite lorsque tracés sur une échelle log-log. Figure tirée de la référence [1].

## 5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats d'un projet portant sur la caractérisation des quasiparticules sur la surface de Fermi dans le modèle de Hubbard en deux dimensions. Nous nous sommes intéressés à un modèle qui rappelle le cuprate dopé en électrons NCCO. Cette étude nous a permis de conclure que les quasiparticules du liquide de Fermi sont persistantes sur la portion antinode de la surface de Fermi, même dans le régime où un pseudogap apparaît aux points chauds où la surface de Fermi croise la zone de Brillouin antiferromagnétique. Nous avons également montré que la relation de proportionnalité entre le nombre sans dimension  $a_2\omega_c$ , accessible par ARPES, et le poids de quasiparticule peut être utilisé pour quantifier la force des corrélations électroniques dans un matériau.

## **Troisième partie**

# **Extensions de la TPSC**

## Chapitre 6

# Amélioration de l'approche auto-cohérente à deux particules : TPSC+ et TPSC+SFM

Ce chapitre est essentiellement une traduction de la section IV de l'article [3]. Des détails supplémentaires sont inclus dans ce chapitre, notamment une définition du régime classique renormalisé, une explication étoffée des lois de conservation, et une comparaison avec la théorie des perturbations au second ordre.

## 6.1 Introduction

---

Au cours des chapitres précédents, nous avons introduit l'approche auto-cohérente à deux particules sous sa forme originale. Le chapitre 2 a présenté les détails théoriques de l'approche, ainsi que ses propriétés principales. Nous avons exploré deux applications de la TPSC à l'étude du modèle de Hubbard pour les cuprates dopés en électrons aux chapitres 4 et 5.

Tout le travail présenté jusqu'à présent nous mène à la question qui motive la seconde partie de cette thèse : est-il possible d'étendre le domaine d'applicabilité de la TPSC et d'améliorer la précision de ses résultats *tout en conservant son faible coût numérique* ?

Dans ce chapitre, nous discutons les approches TPSC+ et TPSC+SFM, deux méthodes basées sur la TPSC. L'une des principales limitations de la TPSC est le fait qu'elle n'est pas valide à basse température dans le régime classique renormalisé du modèle de Hubbard bidimensionnel. Les approches TPSC+ et TPSC+SFM sont proposées afin de résoudre cette limitation de la TPSC. La base de l'approche TPSC+ provient d'une idée de Yury Vilk, co-auteur de l'article [3].

Nous présentons d'abord le formalisme de la TPSC+ et de la TPSC+SFM dans la section 6.2. Ensuite, nous montrons que ces approches satisfont au théorème de Mermin-Wagner dans la section 6.3. La validité de la TPSC+ et de la TPSC+SFM dans le régime classique renormalisé est montrée dans la section 6.4. Nous discutons ensuite de la cohérence entre les quantités à une et à deux particules calculées par la TPSC+ et la TPSC+SFM dans la section 6.5, et du pseudogap antiferromagnétique dans la section 6.6. Finalement, nous montrons à la section 6.7 que la TPSC+ ne respecte pas la règle de somme f et certaines lois de conservation, des limitations qui ne sont pas présentes pour la TPSC+SFM.

Dans ce chapitre, nous montrons plusieurs résultats obtenus numériquement. Tous les calculs ont été réalisés pour le modèle de Hubbard bidimensionnel sur un réseau carré, au demi-remplissage (densité  $n = 1$ ), avec des sauts aux premiers voisins uniquement ( $t = 1, t' = t'' = 0$ ). Les valeurs de la température  $T$  et de l'interaction  $U$  choisies pour chaque calcul seront précisées en temps et lieu. Comme c'était le cas dans les chapitres précédents, nous travaillons dans des unités où les constantes de Planck et de Boltzmann sont égales à 1, tout comme le paramètre de saut aux premiers voisins  $t$  et le pas du réseau  $a$ .

## 6.2 Formulation des méthodes

### 6.2.1 Formulation de l'approche TPSC+

L'approche TPSC+ est construite sur les mêmes fondations que la TPSC. En particulier, la self-énergie  $\Sigma^{(2)}$  qui entre dans la fonction de Green interagissante  $\mathcal{G}^{(2)}$  est définie de la même façon qu'en TPSC, soit

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = Un_{-\sigma} + \frac{T}{N} \frac{U}{8} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (6.1)$$

Toutefois, les susceptibilités de charge et de spin qui entrent dans le calcul de la self-énergie via l'équation 6.1 ne sont plus définies par la susceptibilité non-interagissante  $\chi^{(1)}$ , mais plutôt par

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n)}, \quad (6.2)$$

$$\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n)}. \quad (6.3)$$

Les vertex irréductibles de spin et de charges sont calculés de la même façon qu'en TPSC, soit à partir de la relation d'auto-cohérence entre les règles de somme locales et de l'ansatz TPSC, l'équation



2.23. La susceptibilité  $\chi^{(2)}$  utilisée dans le calcul sera dite *partiellement habillée*. En TPSC+, elle est définie par

$$\chi_{\text{TPSC+}}^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \left( \mathcal{G}_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n) + \mathcal{G}_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, ik_n - iq_n) \right). \quad (6.4)$$

Dans l'équation 6.4,  $\mathcal{G}^{(1)}$  est la fonction de Green non-interagissante tandis que  $\mathcal{G}^{(2)}$  est la fonction de Green avec interactions qui inclut la self-énergie définie à l'équation 6.1.

L'approche TPSC+ est auto-cohérente de deux façons : (a) l'auto-cohérence entre  $U_{sp}$  et la double occupation par la règle de somme et l'ansatz TPSC est toujours présent dans cette approche, et (b) la self-énergie  $\Sigma_\sigma^{(2)}$ , la fonction de Green  $\mathcal{G}_\sigma^{(2)}$  et la susceptibilité  $\chi^{(2)}$  sont toutes inter-dépendantes et peuvent être calculées par un processus itératif.

## 6.2.2 Formulation de l'approche TPSC+SFM

Les susceptibilités calculées dans la formulation originale de la TPSC respectent les lois de conservation du spin et de la charge. Cela se reflète par le fait que les susceptibilités de spin et de charge sont nulles lorsqu'elles sont évaluées au vecteur d'onde  $\mathbf{q} = 0$  et à fréquence de Matsubara non-nulle :  $\chi_{sp, ch}(\mathbf{q} = 0, iq_n \neq 0) = 0$ . La TPSC satisfait également la règle de somme f calculée avec la distribution de Fermi-Dirac. Puisque les susceptibilités de spin et de charge en TPSC+ sont construites à partir d'une susceptibilité partiellement habillée  $\chi^{(2)}$ , nous pouvons anticiper que cette méthode ne respecte ni les lois de conservations ni la règle de somme f. Ces limitations seront discutées en détail à la section 6.7. Nous introduisons dans cette section une approche intermédiaire entre la TPSC et la TPSC+, appelée TPSC+SFM. Cette méthode est construite de façon à satisfaire les lois de conservation et la règle de somme f au même niveau que la TPSC, tout en présentant les mêmes améliorations que la TPSC+.

La TPSC+SFM est construite de façon analogue à la TPSC+, c'est-à-dire que les susceptibilités de spin et de charge sont calculées à partir d'une susceptibilité partiellement habillée. Cette dernière prend une forme distincte de la susceptibilité calculée en TPSC+, soit

$$\chi_{\text{TPSC+SFM}}^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n) = \begin{cases} -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \left( \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, ik_n) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) + \tilde{\mathcal{G}}_\sigma^{(2)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) \right), & q_n = 0 \\ \chi^{(1)}(\mathbf{q}, iq_n) & q_n \neq 0. \end{cases} \quad (6.5)$$

Ici,  $\tilde{\mathcal{G}}^{(2)}$  est une fonction de Green avec interactions dans laquelle la self-énergie ne contient que la contribution venant des fluctuations de spins (dans le canal longitudinal, d'où le facteur 1/4 plutôt que 3/8). Ainsi, la distinction entre les fonctions de Green avec interactions  $\mathcal{G}^{(2)}$  et  $\tilde{\mathcal{G}}^{(2)}$  est

$$\mathcal{G}^{(2)} \Rightarrow \Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{T}{N} \frac{U}{8} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (6.6)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}^{(2)} \Rightarrow \tilde{\Sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{T}{N} \frac{U}{4} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (6.7)$$

Notons que la fonction de Green finale obtenue par l'approche TPSC+SFM est toujours celle qui inclut tant les fluctuations de spins que de charge, définie par l'équation 6.1. Seule la self-énergie utilisée dans le calcul de la susceptibilité partiellement habillée prend la forme définie par l'équation 6.7.

### 6.2.3 Justification phénoménologique

Sachant que l'utilisation d'une susceptibilité partiellement habillée mène à la violation de la règle de somme f et des lois de conservation, quel est l'intérêt de formuler la TPSC+ de cette façon ? Dans cette courte sous-section, nous présentons un argument phénoménologique expliquant l'utilisation d'une telle susceptibilité. Nous détaillerons de façon plus rigoureuse les propriétés de la TPSC+ dans les sections à suivre. L'intérêt de cette section est de justifier cette approche de façon intuitive, avant de la justifier de façon mathématique. Notons également que cette justification de la TPSC+ a été introduite dans l'annexe D.7 de la référence [22].

L'approche TPSC+ est similaire dans sa formulation à l'approximation d'appariement (théorie  $GG_0$ ) pour la susceptibilité de paire développée par Kadanoff et Martin [208–210]. Tel que décrit dans la section 1.4 de cette thèse, dans l'approche des champs source, les susceptibilités sont obtenues par des dérivées fonctionnelles de la fonction de Green. Ces susceptibilités peuvent être réécrites en utilisant l'identité  $G(1, \bar{3})G^{-1}(\bar{3}, 2) = \delta(1 - 2)$

$$\frac{\delta G}{\delta \phi} = -G \frac{\delta G^{-1}}{\delta \phi} G, \quad (6.8)$$

où  $\frac{\delta G^{-1}}{\delta \phi}$  est le vertex. Nous supposons maintenant que les fonctions de Green peuvent être exprimées avec un formalisme de quasiparticules, c'est-à-dire à partir du produit du poids de quasiparticule  $Z$  et d'une fonction de Green sans interaction  $G_0$  :  $G = ZG_0$ . Ainsi, dans cette approximation, la dérivée fonctionnelle de la fonction de Green devient, en négligeant la dérivée fonctionnelle de  $Z$ ,

$$\frac{\delta G}{\delta \phi} = -G_0 \frac{\delta G_0^{-1}}{\delta \phi} G. \quad (6.9)$$

Cette forme est analogue aux susceptibilités décrites par les équations 6.2, 6.3 et 6.4, qui étaient obtenues par le produit d'une fonction de Green non-interagissante  $\mathcal{G}^{(1)}$ , d'une fonction de Green avec interactions  $\mathcal{G}^{(2)}$  et d'un vertex  $U_{sp,ch}$ .

### 6.3 Théorème de Mermin-Wagner

Dans cette section, nous montrons que les approches TPSC+ et TPSC+SFM respectent le théorème de Mermin-Wagner. Plus précisément, nous montrons que ces méthodes ne permettent pas l'existence d'une phase antiferromagnétique à température finie en deux dimensions. Cette preuve est essentiellement identique au cas de l'approche TPSC détaillée dans la référence [74].

Rappelons d'abord que la susceptibilité de spin obtenue par les trois approches TPSC prend une forme de type "RPA"

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n)}. \quad (6.10)$$

Le modèle de Hubbard admet une transition de phase vers une phase antiferromagnétique à la température de Néel  $T_N = 0$  en deux dimensions, et  $T_N \geq 0$  en dimensions supérieures à  $d = 2$ . Cette transition de phase est caractérisée par une susceptibilité de spin divergente au vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  et à fréquence de Matsubara nulle  $iq_0 = 0$ . La divergence de la susceptibilité de spin se produit lorsque le dénominateur de l'équation 6.10 devient nul. Nous pouvons obtenir une forme asymptotique de la susceptibilité de spin en substituant au dénominateur le développement de la susceptibilité  $\chi^{(i)}$ . Ce développement est

$$\chi^{(i)}(\mathbf{q}, 0) \simeq \chi^{(i)}(\mathbf{Q}, 0) + \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2}{2} \frac{\partial \chi^{(i)}(\mathbf{q}, 0)^2}{\partial q^2} \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}, \quad (6.11)$$

où nous avons utilisé le fait que la susceptibilité  $\chi^{(i)}$  étant maximale à  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ ,  $iq_0 = 0$ , sa dérivée première est nulle lorsqu'elle est évaluée à ce point.

En substituant ce développement dans l'équation 6.10, nous obtenons la forme dite de Ornstein-Zernicke de la susceptibilité de spin, que nous avons déjà utilisée dans des chapitres précédents sans la démontrer, évaluée à un vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  près de  $\mathbf{Q}$  et à la fréquence  $iq_0 = 0$

$$\chi_{sp}(\mathbf{q} \simeq \mathbf{Q}, 0) \simeq \frac{2}{U_{sp} \zeta_0^2} \frac{1}{q^2 + \zeta_{sp}^{-2}}, \quad (6.12)$$

où  $q^2 = |\mathbf{Q} - \mathbf{q}|^2$ . De plus, la longueur de corrélation particule-trou  $\xi_0$  est définie par

$$\xi_0^2 = \frac{-1}{2\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)} \left. \frac{\partial^2 \chi^{(2)}(\mathbf{q}, 0)}{\partial q_x^2} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}, \quad (6.13)$$

et la longueur de corrélation de spin est

$$\xi_{sp} = \xi_0 \sqrt{\frac{U_{sp}}{\frac{2}{\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)} - U_{sp}}}. \quad (6.14)$$

Nous écrivons ensuite la règle de somme pour la susceptibilité de spin locale en explicitant la forme de Ornstein-Zernicke

$$n - 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{2}{U_{sp}\xi_0^2} \sum_{\mathbf{q}, q < \Lambda} \frac{1}{q^2 + \xi_{sp}^{-2}} + C, \quad (6.15)$$

où la constante  $C$  contient toutes les contributions à la règle de somme dues aux fréquences de Matsubara non-nulles et aux vecteurs d'onde dont la norme est supérieure à une certaine coupure  $\Lambda$ . Ces contributions sont positives et prennent des valeurs finies, ce qui peut être vérifié grâce à la représentation spectrale de la susceptibilité. La coupure  $\Lambda$  reflète le fait que la forme de Ornstein-Zernicke n'est valide que pour des vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  près du vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q}$ . Notons également que la valeur maximale que peut prendre la double occupation est la valeur sans interaction :  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle_0 = \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle = n^2/4$ . Ainsi, le terme  $n - 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - C$  obtenu par l'équation 6.15 prend une valeur finie. Nous nous concentrons maintenant sur le terme restant de l'équation 6.15, et transformons la somme en l'intégrale

$$\sum_{\mathbf{q}} \chi_{sp}(\mathbf{q} \simeq \mathbf{Q}, 0) \simeq \frac{2}{U_{sp}\xi_0^2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \xi_{sp}^{-2}}, \quad (6.16)$$

où  $d$  est la dimension spatiale.

Considérons d'abord le cas tridimensionnel  $d = 3$ , où l'élément d'intégration est  $d^3 q = q^2 \sin \theta dq d\theta d\phi$ . Supposons également qu'un ordre magnétique est atteint : la longueur de corrélation de spin prend ainsi une valeur infinie. Nous obtenons

$$\int d^3 q \frac{1}{q^2 + \xi_{sp}^{-2}} \propto \int_0^{\Lambda} dq, \quad (6.17)$$

Cette intégrale converge vers une valeur finie. Ainsi, en trois dimensions  $d = 3$ , la somme dans l'équation 6.15 prend une valeur finie même lorsque la longueur de corrélation de spin est infinie, tout comme les autres termes de l'équation. L'absence d'incohérence dans l'équation 6.15 indique que l'ordre antiferromagnétique est permis en trois dimensions par les approches TPSC+ et TPSC+SFM. Ce résultat est également vrai en dimensions supérieures à 3.

En deux dimensions  $d = 2$ , le théorème de Mermin-Wagner interdit le développement d'un ordre magnétique à longue portée. Nous vérifions ici ce qui se produit si nous supposons qu'un tel ordre peut tout de même être prédit par les approches TPSC+ et TPSC+SFM. En deux dimensions, l'élément d'intégration est  $d^2q = qdq d\phi$ . Lorsque nous imposons un ordre magnétique en prenant la limite infinie pour la longueur de corrélation de spin  $\xi_{sp} \rightarrow \infty$ , la somme transformée en intégrale (équation 6.16) devient

$$\int d^2q \frac{1}{q^2 + \xi_{sp}^{-2}} \propto \int_0^\Lambda \frac{dq}{q}. \quad (6.18)$$

Cette intégrale diverge de façon logarithmique lorsque le vecteur d'onde tend vers 0 ( $q \rightarrow 0$ ). Nous observons ainsi une contradiction dans l'équation 6.15 : le côté gauche de l'équation prend toujours une valeur finie, alors que le côté droit est infini en deux dimensions si nous autorisons la longueur de corrélation à devenir infinie. Par conséquent, en deux dimensions, la longueur de corrélation de spin obtenue par la TPSC+ ou la TPSC+SFM ne peut jamais diverger à température finie, en accord avec le théorème de Mermin-Wagner.

## 6.4 Validité dans le régime classique renormalisé

---

L'une des principales limitations de l'approche TPSC est que cette méthode n'est pas valide à basse température dans le régime classique renormalisé du modèle de Hubbard en deux dimensions. Dans cette section, nous définissons d'abord ce régime à la sous-section 6.4.1. Nous étudions ensuite l'exemple spécifique du modèle de Hubbard avec un paramètre de saut aux premiers voisins seulement ( $t' = t'' = 0$ ) au demi-remplissage. Nous montrons que la TPSC mène à des résultats non-physiques pour la double occupation et le vertex de spin, contrairement à la TPSC+ et à la TPSC+SFM, à la sous-section 6.4.2. Finalement, nous montrons que la TPSC+ et la TPSC+SFM prédisent un état fondamental antiferromagnétique avec un critère de Stoner renormalisé à la sous-section 6.4.3. Ces éléments nous permettent de conclure que la TPSC+ et la TPSC+SFM sont valides dans le régime classique renormalisé.

### 6.4.1 Régime classique renormalisé

Nous débutons cette section par une définition du régime classique renormalisé. Nous étudions d'abord ce régime d'un point de vue mathématique. Pour ce faire, nous procédons à un développement similaire à la démarche menant à l'obtention de la forme Ornstein-Zernicke de la susceptibilité de spin (sous-section 6.3). Plus précisément, nous développons la susceptibilité  $\chi^{(i)}$  au dénominateur de  $\chi_{sp}$ , cette fois en conservant sa dépendance en fréquence. La variable  $i = 1, 2$  distingue les susceptibilités non-interagissante et partiellement habillée. Nous suivons les

démarches présentées à l'annexe D de la référence [74]. Ce calcul est fait en fréquences réelles, soit en appliquant le prolongement analytique pour obtenir la susceptibilité de spin retardée  $\chi_{sp}^R$

$$\chi_{sp}^R(\mathbf{q}, \omega) = \lim_{iq_n \rightarrow \omega + i\eta} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n). \quad (6.19)$$

Nous obtenons

$$\chi^{(i),R}(\mathbf{q}, \omega) \simeq \chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0) + \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2}{2} \frac{\partial \chi^{(i),R}(\mathbf{q}, 0)^2}{\partial q^2} \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}} + \omega \frac{\partial \chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0}. \quad (6.20)$$

Nous substituons ensuite ce développement au dénominateur de la susceptibilité de spin

$$\begin{aligned} \chi_{sp}^R(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{\chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \left( \chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0) + \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2}{2} \frac{\partial \chi^{(i),R}(\mathbf{q}, 0)^2}{\partial q^2} \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}} + \omega \frac{\partial \chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} \right)}, \\ &= \frac{\chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0)}{\frac{\chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0)}{2} \left( \frac{2}{\chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0)} - U_{sp} - U_{sp} \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2}{2\chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0)} \frac{\partial \chi^{(i),R}(\mathbf{q}, 0)^2}{\partial q^2} \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}} - \frac{U_{sp}}{\chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0)} \omega \frac{\partial \chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} \right)}, \\ &= \frac{2}{U_{sp} \left( \frac{\delta U}{U_{sp}} + (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 \tilde{\zeta}_0^2 - \omega \tau_0 \right)}, \\ &= \frac{2}{U_{sp} \tilde{\zeta}_0^2 \left( \tilde{\zeta}_{sp}^{-2} + (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - \omega \frac{\tau_0}{\tilde{\zeta}_0^2} \right)}, \\ &= \frac{2\tilde{\zeta}_{sp}^2}{U_{sp} \tilde{\zeta}_0^2 \left( 1 + (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 \tilde{\zeta}_{sp}^2 - \frac{\omega}{\omega_{SF}} \right)}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Dans ce qui précède, nous avons défini l'énergie caractéristique des fluctuations de spins  $\omega_{SF}$  par

$$\omega_{SF} \equiv \frac{\tilde{\zeta}_0^2}{\tilde{\zeta}_{sp}^2 \tau_0}, \quad (6.22)$$

où le temps de relaxation  $\tau_0$  est défini par

$$\tau_0 = \frac{1}{\chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, 0)} \frac{\partial \chi^{(i),R}(\mathbf{Q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0}. \quad (6.23)$$

Nous remarquons ainsi que l'énergie caractéristique des fluctuations de spins est inversement proportionnelle au carré de la longueur de corrélation de spin :  $\omega_{SF} \propto \tilde{\zeta}_{sp}^{-2}$ . Or, dans ce régime où la susceptibilité de spin est très grande en deux dimensions, la longueur de corrélation de spin croît exponentiellement lorsque la température diminue :  $\tilde{\zeta}_{sp} \propto e^{A/T}$  [74] ( $\tilde{\zeta}_{sp} \propto e^{A/T^3}$  au

demi-remplissage pour le cas d'emboîtement parfait [109]).

Ces observations nous mènent à une définition plus qualitative du régime classique renormalisé. Pensons à l'analogie suivante : dans le cas de l'oscillateur harmonique, nous atteignons un régime classique lorsque la température est beaucoup plus grande que l'espacement entre les niveaux d'énergie. Un phénomène similaire se présente ici. La susceptibilité de spin possède autour de la fréquence nulle  $\omega = 0$  un pic de largeur  $\omega_{SF}$ . Lorsque l'énergie caractéristique des fluctuations de spins  $\omega_{SF}$  est beaucoup plus petite que la température ( $\hbar\omega_{SF} \ll k_B T$ ), le système se trouve dans un régime "classique", par analogie à l'oscillateur harmonique. Or, ce régime n'est pas un régime classique ordinaire : il apparaît à basse température lorsque la longueur de corrélation antiferromagnétique devient exponentiellement grande en raison d'effets *quantiques*, comme l'emboîtement et l'effet des interactions.

#### 6.4.2 Vertex de spin et double occupation dans le régime classique renormalisé : cas $t' = t'' = 0$

Nous considérons dans cette sous-section le cas spécifique du modèle de Hubbard en deux dimensions, au demi-remplissage, avec un paramètre de saut aux premiers voisins uniquement ( $t' = t'' = 0$ ).

Tel que montré précédemment à la section 6.3, les approches TPSC, TPSC+ et TPSC+SFM respectent le théorème de Mermin-Wagner. Cela implique que la susceptibilité de spin évaluée au vecteur d'onde  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  doit prendre des valeurs finies à température non-nulle en deux dimensions. Considérant la forme de type "RPA" des susceptibilités de spin calculées par ces méthodes, cela mène à une contrainte sur la valeur du vertex de spin  $U_{sp}$ , soit

$$U_{sp} < \frac{2}{\chi^{(i)}(\mathbf{Q}, 0)}, \quad (6.24)$$

où  $i = 1$  ( $i = 2$ ) dans le cas de l'approche TPSC (TPSC+, TPSC+SFM). Ce critère empêche la divergence de la susceptibilité de spin.

Considérant cette contrainte, nous posons la question suivante : le vertex de spin  $U_{sp}$  peut-il être contraint à être nul, ou autrement dit à prendre une valeur non-physique, afin que le théorème de Mermin-Wagner soit bel et bien satisfait par la TPSC, la TPSC+ et la TPSC+SFM ? Pour pouvoir répondre à cette question, nous calculons la valeur de  $\chi^{(i)}(\mathbf{Q}, 0)$  en fonction de la température.

Considérons d'abord le cas de la TPSC. Dans l'exemple qui est d'intérêt ici, la fonction de

Lindhard ( $\chi^{(1)}$ ) à fréquence nulle est, au vecteur d'onde  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ ,

$$\begin{aligned}\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0) &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \mathcal{G}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, ik_n), \\ &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu^{(1)}} \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \mu^{(1)}},\end{aligned}\quad (6.25)$$

$$= -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^{(1)}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu^{(1)})}{-\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}}}.$$
 (6.26)

Dans le modèle que nous considérons dans cette section, le potentiel chimique est nul  $\mu^{(1)} = 0$  et la relation de dispersion est telle que les énergies aux vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$  sont reliées par  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ . Nous obtenons donc

$$\begin{aligned}\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0) &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(-\epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}}}, \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\epsilon_{\mathbf{k}}/2T)}{\epsilon_{\mathbf{k}}}.\end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant changer la somme sur les vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$  en une intégrale sur les énergies  $\epsilon : \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int d\epsilon \rho(\epsilon)$ . Nous obtenons l'équation suivante pour la fonction de Lindhard

$$\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0) = \int d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\tanh(\epsilon/2T)}{\epsilon}.$$
 (6.27)

Dans cette équation,  $\rho(\epsilon)$  est la densité d'états et est définie par

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2 t} K \left[ \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{4t}\right)^2} \right],$$
 (6.28)

avec  $K$  l'intégrale elliptique de la première espèce [211].

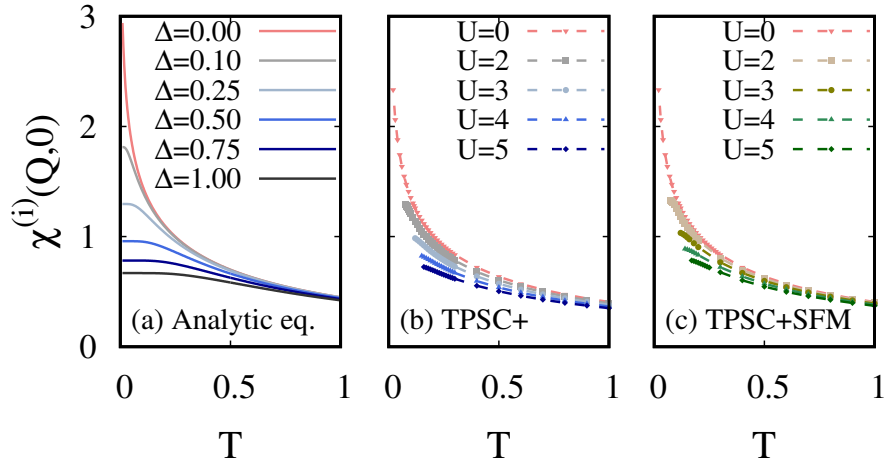
L'intégrale 6.27 peut être calculée numériquement en fonction de la température  $T$ . Dans la figure 6.1, nous montrons que  $\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0)$  diverge à basse température, lorsque  $T$  décroît vers 0. Cette divergence est observée tant à partir de l'intégration numérique de l'équation 6.27 (Figure 6.1 (a), courbe rose), que dans l'évaluation numérique de l'équation 2.11 :  $\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0) = -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} G^{(0)}(k) G^{(0)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, ik_n)$  (Figure 6.1 (b) et (c), courbes roses). Cette divergence peut être comprise par l'évaluation analytique approximative de l'équation 6.27.

La contribution principale à l'intégrale elliptique de la première espèce  $K$  est

$$K \left[ \sqrt{1 - x^2} \right] \rightarrow -\ln x, \quad x \rightarrow 0.$$
 (6.29)

Ainsi, dans ce modèle, la densité d'états comporte une singularité de Van Hove au niveau de Fermi





**FIGURE 6.1** Fonction de Lindhard  $\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0)$  (en rose) et susceptibilité partiellement habillée  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  (en bleu et vert) en fonction de la température  $T$ . Les lignes de la figure (a) proviennent de l'intégration numérique de l'équation 6.27 pour  $\Delta = 0$  et de l'équation 6.39 pour  $\Delta > 0$ . Les points dans les figures (b) et (c) sont obtenus par l'intégration numérique de (b) l'équation 6.4 pour la TPSC+ et de (c) l'équation 6.5 pour la TPSC+SFM. Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ . Figure tirée de la référence [3].

( $\epsilon_F = 0$ ).

Nous substituons la densité d'états par son terme dominant et effectuons ensuite le changement de variable  $u = \epsilon/2T$  dans l'intégrale 6.27. Nous obtenons

$$\begin{aligned} \chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0) &\sim \left[ - \int_1^{\Lambda/2T} du \frac{\ln u}{u} + C \right], \\ &\sim - \ln^2 \frac{\Lambda}{2T}, \end{aligned} \quad (6.30)$$

où  $C$  inclut les termes non-dominants qui contribuent à l'intégrale (incluant certains termes singuliers, mais qui divergent plus lentement que le terme écrit explicitement), et  $\Lambda$  est une coupure à haute énergie. Ainsi, la fonction de Lindhard diverge comme le carré d'un logarithme pour ce modèle lorsque la température diminue vers 0.

Retournons maintenant à la contrainte sur la valeur de  $U_{sp}$  due au théorème de Mermin-Wagner 6.24. Nous constatons que, afin de satisfaire la contrainte, le vertex de spin obtenu par la TPSC doit diminuer vers 0 lorsque la température décroît vers 0, puisque la fonction de Lindhard diverge à basse température.

La figure 6.2 (a) présente le vertex de spin  $U_{sp}$  obtenu par la TPSC en fonction de la température. Les valeurs de  $U$  choisies pour ces calculs sont  $U = 1, 2, 3$  et  $4$ . Pour chacun de ces cas, la valeur de  $U_{sp}$  chute vers 0 lorsque la température décroît. Nous remarquons également que les courbes obtenues pour ces quatre valeurs de  $U$  se recouvrent à basse température. Cette indépendance

de  $U_{sp}$  par rapport à la valeur de la force de l'interaction de Hubbard  $U$  est due au fait que  $U_{sp}$  devient limité par la fonction de Lindhard, une quantité non-interagissante. Nous montrons ce phénomène dans la figure 6.2 (a) en incluant la ligne pointillée noire, qui est la valeur limite de  $U_{sp} : U_{sp}^{max} = 2/\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0)$ . À suffisamment basse température, la valeur de  $U_{sp}$  coïncide avec cette valeur limite, peu importe la valeur de  $U$ .

Nous montrons maintenant que les approches TPSC+ et TPSC+SFM ne sont pas soumises à cette même limitation. Nous évaluons d'abord  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  dans le régime classique renormalisé où les fluctuations de spins sont fortes. Pour ce faire, nous calculons une forme approchée de la self-énergie qui entre dans le calcul de la fonction de Green avec interaction  $\mathcal{G}^{(2)}$ . Puisque les fluctuations de spins sont dominantes dans ce régime, nous faisons les approximations suivantes : (a) nous ne conservons que la contribution provenant de la susceptibilité de spin à la self-énergie, et (b) nous utilisons la forme de Ornstein-Zernicke pour la susceptibilité de spin. Ces approximations sont valides tant pour la TPSC+ que pour la TPSC+SFM. En deux dimensions, nous obtenons

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) \simeq \frac{3UT}{4\tilde{\xi}_0^2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \tilde{\xi}_{sp}^{-2}} \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}} + \mu^{(1)}}. \quad (6.31)$$

Puisque la longueur de corrélation de spin  $\tilde{\xi}_{sp}$  est très grande dans ce régime, le terme  $1/(q^2 + \tilde{\xi}_{sp}^{-2})$  n'est non-négligeable que dans la limite où la norme du vecteur d'onde  $q$  est petite. Nous remarquons également que le terme  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}} + \mu^{(1)}$  est non-nul pour les vecteurs d'onde à l'extérieur de la surface de Fermi. Or, le calcul de  $\chi^{(2)}$  requiert une somme sur l'ensemble de la zone de Brillouin. Pour ces raisons, nous négligeons la dépendance en vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  de  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}}$  dans l'équation 6.31. Cela mène à

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{\Delta^2}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \mu^{(1)}}, \quad (6.32)$$

où le paramètre  $\Delta^2$  est défini par

$$\Delta^2 = \frac{3UT}{4\tilde{\xi}_0^2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \tilde{\xi}_{sp}^{-2}}. \quad (6.33)$$

Nous obtenons maintenant une expression pour  $\chi^{(2)}$  dans la limite  $T \rightarrow 0$  dans le régime classique renormalisé

$$\begin{aligned} \chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0) &= -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \left[ \mathcal{G}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, ik_n) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{G}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}^{(1)}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, ik_n) \right], \end{aligned} \quad (6.34)$$

$$= -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \frac{2}{\left( ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{(1)} \right) \left( ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} \right) - \Delta^2}, \quad (6.35)$$

où nous avons utilisé l'égalité  $\epsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}} = \epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{Q}}$ , et où nous définissons  $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(i)} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^{(i)}$  pour alléger l'écriture. Rappelons que, tel qu'expliqué à la section 2.2.4, les potentiels chimiques évalués au premier et au second niveaux d'approximation de la TPSC peuvent être différents. La somme sur les fréquences de Matsubara discrètes peut être réalisée analytiquement. En effet, le dénominateur peut être réécrit suivant

$$(ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{(1)}) (ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}) - \Delta^2 = (ik_n - E_{\mathbf{k}}^+) (ik_n - E_{\mathbf{k}}^-), \quad (6.36)$$

où les énergies  $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$  sont définies par

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{2} \left( \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{(1)} \pm \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{(1)})^2 + 4\Delta^2} \right). \quad (6.37)$$

Nous faisons la somme sur les fréquences de Matsubara, et nous obtenons

$$\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0) = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(E_{\mathbf{k}}^+) - f(E_{\mathbf{k}}^-)}{E_{\mathbf{k}}^+ - E_{\mathbf{k}}^-}, \quad (6.38)$$

où  $f(\epsilon)$  est la distribution de Fermi-Dirac. Jusqu'à présent, nous avons obtenu des résultats généraux. Nous utilisons maintenant une propriété de l'exemple d'intérêt dans cette section, avec emboîtement parfait, où le potentiel chimique est nul au demi-remplissage :  $\mu^{(1)} = \mu^{(2)} = 0$ ,

$$\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0) = \int d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\tanh(\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}/2T)}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}. \quad (6.39)$$

L'équation 6.39 est analogue à l'équation 6.27 obtenue pour la fonction de Lindhard. Comme dans le cas de  $\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0)$ , nous effectuons la résolution de l'équation 6.39 pour  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  numériquement. Nous varions le paramètre  $\Delta$  afin de représenter différentes forces d'interaction. À la figure 6.1 (a), nous comparons nos résultats pour  $\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0)$  et  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  par intégration numérique. Nous montrons que la présence d'une self-énergie dans la susceptibilité partiellement habillée, via le paramètre  $\Delta^2$ , élimine la divergence à basse température. Plutôt que de diverger lorsque la température décroît,  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  sature vers une valeur finie. Par conséquent, la contrainte sur la valeur du vertex de spin exprimée par l'équation 6.24 peut être satisfaite par une valeur finie et non-nulle de  $U_{sp}$  dans les approches TPSC+ et TPSC+SFM.

Nous montrons nos résultats pour  $\chi^{(1)}(\mathbf{Q}, 0)$  et  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  obtenus par des calculs TPSC+ dans la figure 6.1 (b), et par la TPSC+SFM dans la figure 6.1 (c). Nous notons ici que, au moment de rédiger cette thèse, nos calculs TPSC+ et TPSC+SFM sont limités par des problèmes de convergence à basse température. Cela implique que nous n'avons pas réussi à obtenir des résultats pour les températures les plus basses qui étaient toutefois accessibles en TPSC. Néanmoins, nous observons tout de même une diminution de la valeur de  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  à basse température à mesure que  $U$

augmente. Cette observation est en accord avec les résultats d'intégration numérique présentés à la figure 6.1 (a), où  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  diminue à mesure que le paramètre  $\Delta$  augmente.

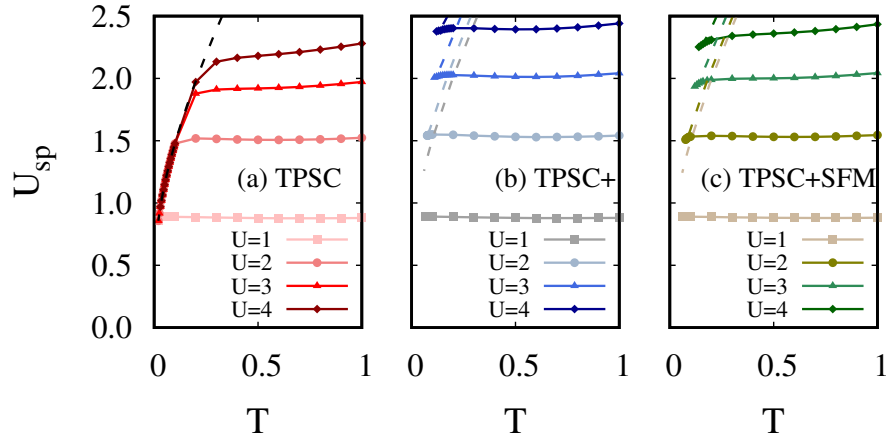
Nous illustrons ensuite, à la figure 6.2 (b), les valeurs de  $U_{sp}$  calculées par la TPSC+ en fonction de la température. Les résultats obtenus par TPSC+ sont illustrés à la figure 6.2. Les calculs ont été effectués pour des valeurs de l'interaction de Hubbard  $U = 1, 2, 3$  et 4. Contrairement aux résultats obtenus par la TPSC, aucune chute drastique du vertex de spin  $U_{sp}$  ne peut être vue à basse température. De plus,  $U_{sp}$  dépend fortement de la valeur de  $U$  même à basse température. Nous remarquons tout de même que, pour  $U > 2$ , et dans le régime de convergence de nos calculs, le vertex de spin  $U_{sp}$  calculé par TPSC+ et TPSC+SFM devient limité par sa valeur maximale  $U_{sp}^{max} = 2/\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  à basse température. La valeur maximale de  $U_{sp}$  est illustrée sur ces figures par les lignes pointillées et dépend de la valeur de  $U$ .

La faible diminution de  $U_{sp}$  observée à basse température pour toutes les valeurs de  $U$  par les trois approches TPSC peut être comprise par la proportionnalité entre le vertex de spin et la double occupation due à l'ansatz TPSC. Notons d'abord que la figure 6.3 présente une comparaison de la double occupation obtenue par les trois méthodes : (a) TPSC, (b) TPSC+ et (c) TPSC+SFM. Dans la figure (a), la double occupation obtenue par TPSC chute rapidement vers 0 pour toutes les valeurs de  $U$  considérées lorsque la température décroît. Cette chute est due aux valeurs non-physiques prises par  $U_{sp}$  dans ce régime de paramètre. Dans les figures (b) et (c), la double occupation obtenue par TPSC+ et TPSC+SFM décroît lorsque la température diminue, mais de façon moins prononcée que pour la TPSC. Dans le régime d'interaction faible du modèle de Hubbard en deux dimensions, une diminution de la double occupation est observée lorsque la température décroît due à une augmentation des corrélations antiferromagnétiques. Ces corrélations mènent à une augmentation des moments magnétiques locaux et à une diminution de la double occupation [22, 212].

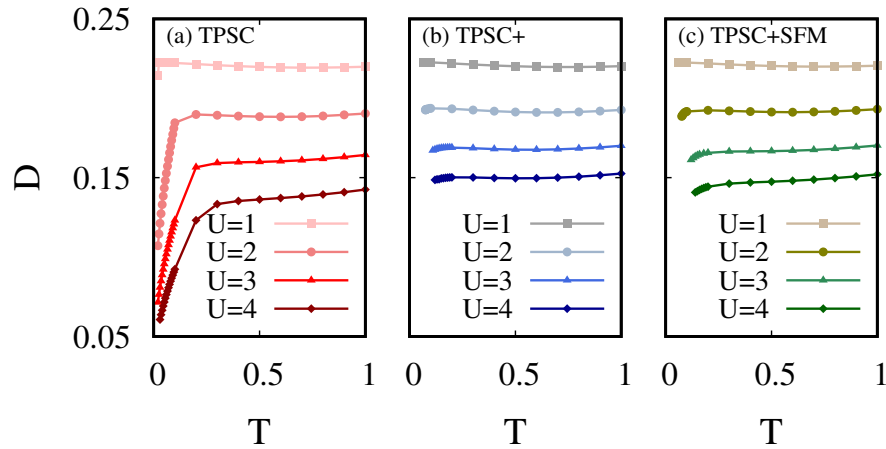
Les trois approches TPSC décrivent cette physique. Toutefois, la TPSC n'est plus valide à basse température à partir du moment où  $U_{sp}$  devient limité par le théorème de Mermin-Wagner. En contraste, dans les approches TPSC+ et TPSC+SFM, le vertex de spin est toujours limité par le théorème de Mermin-Wagner, mais n'est pas forcé à diminuer rapidement vers une valeur nulle non-physique.

### 6.4.3 Critère de Stoner renormalisé

Dans cette section, nous nous intéressons à la transition de phase vers la phase antiferromagnétique dans le modèle de Hubbard. Cette transition de phase est caractérisée par la divergence de la susceptibilité de spin à la température de Néel  $T_N$ . La température de Néel est nulle en deux dimensions, mais peut prendre une valeur finie en dimensions supérieures. En TPSC+ et en TPSC+SFM, la divergence de la susceptibilité de spin évaluée au vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ ,



**FIGURE 6.2** Vertex de spin irréductible  $U_{sp}$  obtenu par (a) la TPSC, (b) la TPSC+ et (c) la TPSC+SFM, pour  $U = 1, 2, 3$  et  $4$ . La TPSC prédit une chute non-physique de  $U_{sp}$  lorsque la température décroît vers zéro. Les valeurs de  $U_{sp}$  obtenues par la TPSC+ et la TPSC+SFM ne montrent pas de chute drastique à basse température dans les limites du régime de convergence de nos calculs. Les lignes pointillées dans les figures représentent la valeur maximale de  $U_{sp}$  :  $U_{sp}^{max} = 2/\chi^{(i)}(\mathbf{Q}, 0)$ . Pour (a) la TPSC, la valeur de  $U_{sp}^{max}$  ne dépend pas de  $U$  puisque la limite est imposée par la fonction de Lindhard. À l'inverse, pour (b) la TPSC+ et (c) la TPSC+SFM, la valeur de  $U_{sp}^{max}$  dépend de  $U$ . Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ . Une figure similaire, sans les courbes pointillées, se trouve dans la référence [3].



**FIGURE 6.3** Double occupation  $D = \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  obtenue par (a) la TPSC, (b) la TPSC+ et (c) la TPSC+SFM, pour  $U = 1, 2, 3$  et  $4$ . La TPSC prédit une chute non-physique de la double occupation lorsque la température diminue en raison de la contrainte imposée par le théorème de Mermin-Wagner sur le vertex de spin. Ce phénomène n'est pas observé dans nos résultats pour la TPSC+ et la TPSC+SFM, dans la limite du régime de convergence de nos calculs. Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ . Figure tirée de la référence [3].

à la température de Néel  $T_N$  et à la fréquence de Matsubara nulle  $q_0 = 0$ , est définie par le critère

$$\frac{2}{U_{sp}} = \chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0). \quad (6.40)$$

Nous substituons le critère 6.40 dans l'expression obtenue pour  $\chi^{(2)}(\mathbf{Q}, 0)$  à la section précédente, 6.38. Nous obtenons alors, à la température de Néel  $T_N$ ,

$$\frac{1}{U_{sp}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(E_{\mathbf{k}}^+) - f(E_{\mathbf{k}}^-)}{E_{\mathbf{k}}^+ - E_{\mathbf{k}}^-}. \quad (6.41)$$

Dans le cas spécifique où la dimension est  $d = 2$ , et où la température de Néel est nulle  $T_N = 0$ , la fonction de Fermi-Dirac  $f(x)$  est une fonction de Heaviside  $\theta(-x)$ . Ainsi, la relation en deux dimensions devient

$$\frac{1}{U_{sp}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\theta(-E_{\mathbf{k}}^+) - \theta(-E_{\mathbf{k}}^-)}{E_{\mathbf{k}}^+ - E_{\mathbf{k}}^-}, \quad (6.42)$$

Tant le résultat à température finie 6.41 que le résultat à température nulle 6.42 sont analogues à l'équation du gap dans l'état antiferromagnétique obtenu par un calcul Hartree-Fock en champ moyen [213]. La différence entre ces résultats est que, dans les approches TPSC+ et TPSC+SFM, le terme de gauche fait intervenir le vertex de spin renormalisé  $U_{sp}$  plutôt que le  $U$  de Hubbard non-renormalisé.

Notons également que, d'après les définitions des énergies propres  $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$  de l'équation 6.37, le gap antiferromagnétique prend la valeur  $2\Delta$  dans le cas particulier où  $\mu^{(1)} = \mu^{(2)} = \epsilon_{k_F} = 0$ , comme le cas sur un réseau carré en deux dimensions, au demi-remplissage, où seul le terme de saut aux premiers voisins est permis.

En somme, les approches TPSC+ et TPSC+SFM connectent le régime classique renormalisé du modèle de Hubbard bidimensionnel à un état fondamental antiferromagnétique décrit par un critère de Stoner renormalisé. Comme ces méthodes peuvent décrire une physique qualitativement adéquate jusqu'à température nulle, nous concluons qu'elles sont valides dans le régime classique renormalisé, contrairement à la TPSC.

## 6.5 Cohérence entre quantités à une et deux particules

Nous vérifions la cohérence entre les quantités à une et à deux particules à partir de l'équation 2.5. Cette équation fait le lien entre la trace du produit de la self-énergie et de la fonction de Green, deux quantités à une particule, et la double occupation, une quantité à deux particules. En TPSC, la relation suivante est respectée [74]

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, \bar{2}) \mathcal{G}_{\sigma}^{(1)}(\bar{2}, 1^+) = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle, \quad (6.43)$$

mais l'égalité n'est pas respectée lorsque l'on utilise la fonction de Green au deuxième niveau d'approximation  $\mathcal{G}^{(2)}$  plutôt qu'au premier niveau d'approximation  $\mathcal{G}^{(1)}$ . Dans l'approche TPSC originale, la déviation entre les résultats obtenus avec la fonction de Green  $\mathcal{G}^{(1)}$  et avec  $\mathcal{G}^{(2)}$  peut être utilisée comme un critère de validité : lorsque la déviation est trop importante, les calculs ne sont pas considérés comme étant valides. Une grande déviation est obtenue hors du régime de validité de l'approche (par exemple, lorsque la force de l'interaction  $U$  est trop grande, ou dans le régime classique renormalisé).

Nous considérons maintenant le cas de la TPSC+ et calculons directement la trace d'intérêt dans le second niveau d'approximation, soit

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, \bar{2}) \mathcal{G}_{\sigma}^{(2)}(\bar{2}, 1^+) = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n). \quad (6.44)$$

En insérant l'équation pour la self-énergie 6.1 et en utilisant la propriété  $\chi_{sp, ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \chi_{sp, ch}(-\mathbf{q}, -iq_n)$ , nous obtenons

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, \bar{2}) \mathcal{G}_{\sigma}^{(2)}(\bar{2}, 1^+) &= \frac{Un^2}{4} \\ &- \frac{UT}{16N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [3U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] \chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n). \end{aligned} \quad (6.45)$$

Cette équation peut être simplifiée en utilisant les deux propriétés suivantes :

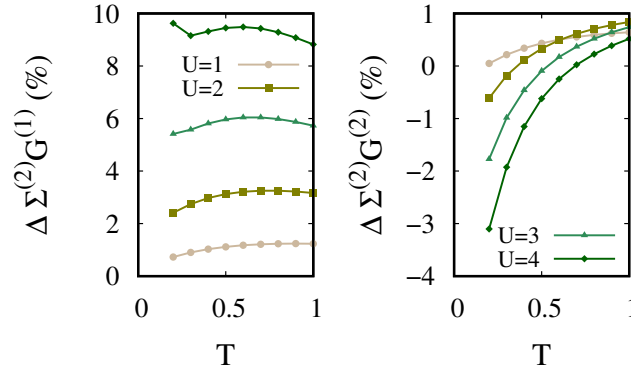
$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) - \chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) \chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n), \quad (6.46)$$

$$\chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n) - \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{U_{ch}}{2} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) \chi^{(2)}(\mathbf{q}, iq_n). \quad (6.47)$$

Nous substituons ces relations dans l'équation 6.45 et nous utilisons les règles de somme pour  $\chi_{sp, ch}$  et  $\chi^{(2)}$ . Nous obtenons ainsi

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, \bar{2}) \mathcal{G}_{\sigma}^{(2)}(\bar{2}, 1^+) = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle, \quad (6.48)$$

ce qui est le résultat exact attendu par l'équation 2.5. Ainsi, l'approche TPSC+ présente une cohérence



**FIGURE 6.4** Déviation relative entre les traces  $\text{Tr} \Sigma^{(2)} \mathcal{G}^{(i)}$  et le résultat exact attendu par l'équation 2.5 pour l'approche TPSC+SFM. À gauche, la trace est calculée avec la fonction de Green non-interagissante  $\mathcal{G}^{(1)}$ , tandis qu'à droite, elle est calculée avec la fonction de Green avec interaction  $\mathcal{G}^{(2)}$ . Les calculs sont faits au demi-remplissage  $n = 1$ . Figure tirée de la référence [3].

entre les quantités à une et à deux particules. Contrairement à la TPSC originale, cette cohérence existe *au second niveau d'approximation* de l'approche. Il s'agit ainsi d'une amélioration de la méthode.

Ce résultat n'est pas valide pour l'approche TPSC+SFM : les traces du produit de la self-énergie et de la fonction de Green, tant la fonction non-interagissante  $\mathcal{G}^{(1)}$  que la fonction de Green interagissante  $\mathcal{G}^{(2)}$ , ne permettent pas d'obtenir le résultat exact 2.5. Nous montrons toutefois à la figure 6.4 que cette déviation se situe sous 10% pour des valeurs de  $U$  entre 1 et 4 et au demi-remplissage. La déviation est plus faible dans le cas de la trace évaluée avec  $\mathcal{G}^{(2)}$  qu'avec  $\mathcal{G}^{(1)}$ .

## 6.6 Pseudogap dans le modèle de Hubbard

Plusieurs méthodes numériques ont permis d'établir que le pseudogap dans le régime d'interaction faible du modèle de Hubbard est dû aux fluctuations antiferromagnétiques [22]. Son existence a d'abord été prédite par la TPSC, qui a d'ailleurs permis d'établir le critère de Vilk pour le pseudogap antiferromagnétique [21, 74]. Nous avons abordé ce critère en détail au chapitre 4. Dans cette section, nous montrons que la même phénoménologie est obtenue par les approches TPSC+ et TPSC+SFM.

Le pseudogap antiferromagnétique apparaît sous une température de *crossover* notée  $T^*$ . Dans ce régime, nous pouvons utiliser la forme de Ornstein-Zernicke (équation 6.12) pour la susceptibilité de spin et, ainsi, la forme de la self-énergie obtenue à l'équation 6.31.

Nous évaluons la self-énergie aux points chauds, là où la surface de Fermi croise la zone de Brillouin antiferromagnétique, en suivant la méthode décrite par la référence [74] et détaillée à la



section 4.4 du chapitre 4. Ce calcul est effectué à fréquence nulle  $\omega = i0^+$ . Nous obtenons

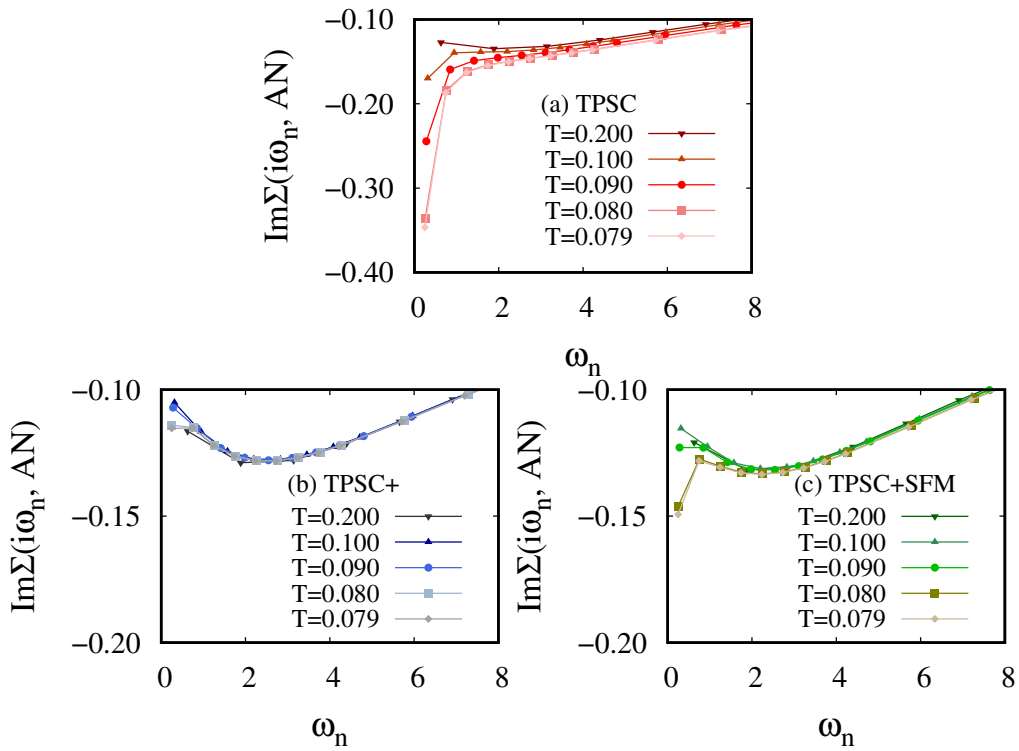
$$\text{Im}\Sigma_{cl}(\mathbf{k}_F, 0) = -\frac{3UT}{16\tilde{\zeta}_0^2} \frac{\tilde{\zeta}_{sp}}{\tilde{\zeta}_{th}}, \quad (6.49)$$

où  $\tilde{\zeta}_{th} = \frac{v_F}{\pi T}$  est la longueur d'onde thermique de de Broglie. Rappelons que le poids spectral  $A(\mathbf{k}, \omega)$  peut être écrit en fonction de la self-énergie

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -2 \frac{\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega))^2 + (\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega))^2}. \quad (6.50)$$

Au niveau de Fermi, si la valeur absolue de la partie imaginaire de la self-énergie est grande, le poids spectral est atténué. À l'inverse, le poids spectral prend une valeur importante au niveau de Fermi lorsque la partie imaginaire de la self-énergie est petite. Les approches TPSC+ et TPSC+SFM prédisent ainsi une perte de poids spectral au points chauds lorsque la longueur de corrélation  $\tilde{\zeta}_{sp}$  est plus importante que la longueur d'onde de de Broglie. Il s'agit une fois de plus du "critère de Vilk" qui correspond à l'apparition d'un pseudogap antiferromagnétique dû aux fluctuations de spins. De plus, nous pouvons utiliser les arguments présentés dans la section V.B de la référence [74] pour montrer que le poids spectral possède deux pics à fréquence finie, de part et d'autre du niveau de Fermi, lorsque le critère de Vilk est satisfait.

Ayant présenté les arguments analytiques et phénoménologiques qui justifient l'apparition du pseudogap antiferromagnétique par la TPSC+ et la TPSC+SFM, nous présentons maintenant des résultats numériques obtenus par ces approches. La figure 6.5 montre la partie imaginaire de la self-énergie évaluée au point antinodal  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$  en fonction des fréquences de Matsubara. Les résultats sont obtenus à différentes températures, pour l'interaction de Hubbard  $U = 2$ . Dans ce modèle avec emboîtement parfait, la surface de Fermi coïncide avec la zone de Brillouin antiferromagnétique : tous les points sur la surface de Fermi, incluant le point antinodal, sont donc des points chauds. La figure montre que les trois approches TPSC prédisent effectivement l'ouverture d'un pseudogap antiferromagnétique. Cette ouverture correspond à la température  $T^*$  où la partie imaginaire de la self-énergie est plus grande (en valeur absolue) à la première fréquence de Matsubara qu'à la seconde. Nous remarquons que les trois approches prédisent des valeurs différentes de  $T^*$ . Des calculs en Monte Carlo diagrammatique (DiagMC) prédisent une valeur inférieure pour la température de *crossover* vers le pseudogap, soit  $T^* = 0.065$  à l'antinode [22]. La température  $T^*$  obtenue par la TPSC+ est ainsi la plus près de la valeur exacte obtenue par DiagMC. Les trois approches TPSC offrent tout de même une solution qualitativement adéquate du problème.



**FIGURE 6.5** Partie imaginaire de la self-énergie calculée par (a) TPSC, (b) TPSC+ et (c) TPSC+SFM pour  $n = 1$ ,  $U = 2$ , au point antinodal  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ . Les trois méthodes prédisent l'ouverture d'un pseudogap lorsque la température décroît, tel qu'illustré par la valeur de la partie imaginaire de la self-énergie à la fréquence  $\omega_0$  qui devient plus négative que sa valeur à  $\omega_1$ . Figure tirée de la référence [3].

## 6.7 Règle de somme f

Nous présentons dans cette section une première limitation de la TPSC+ : la violation de la règle de somme f. Dans le modèle de Hubbard, la règle de somme f pour les susceptibilités de charge et de spin est [74, 113]

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''_{sp,ch}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}, \sigma}^{(2)}, \quad (6.51)$$

où  $n_{\mathbf{k}, \sigma}^{(2)}$  est la fonction de distribution résolue en spin et en quantité de mouvement. Cette quantité peut être calculée avec la fonction de Green interagissante  $\mathcal{G}^{(2)}$

$$n_{\mathbf{k}, \sigma}^{(2)} = -\mathcal{G}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau = 0^-). \quad (6.52)$$

Nous montrons maintenant que la règle de somme f donnée par l'équation 6.51 est satisfaite à un certain niveau par la TPSC [74] et la TPSC+SFM, mais pas par la TPSC+. Nous commençons par écrire les susceptibilités dans leur représentation spectrale

$$\begin{aligned} \chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, iq_n) &= \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{sp,ch}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega - iq_n}, \\ &= \frac{1}{q_n^2} \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega \chi''_{sp,ch}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + (\omega/q_n)^2}, \end{aligned} \quad (6.53)$$

ce qui, à haute fréquence, se réduit à

$$\chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, iq_n) \simeq \frac{1}{q_n^2} \int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''_{sp,ch}(\mathbf{q}, \omega). \quad (6.54)$$

Nous devons ainsi calculer le coefficient du terme  $1/q_n^2$  du développement à haute fréquence pour la susceptibilité de spin (ou de charge) afin de déterminer si les approches TPSC respectent la règle de somme f. En effet, tel qu'illustré par l'équation 6.54, ce coefficient correspond au terme de gauche de l'équation 6.51. Nous notons ce coefficient  $\alpha^{(i)}$ , où  $i$  correspond à la méthode TPSC, TPSC+ ou TPSC+SFM.

$$\chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, iq_n) \underset{q_n \gg 1}{\simeq} \frac{\alpha^{(i)}}{q_n^2}. \quad (6.55)$$

Rappelons également la forme des susceptibilités obtenues par les approches TPSC

$$\chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 \mp \frac{U_{sp,ch}}{2} \chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n)}. \quad (6.56)$$

Puisque les susceptibilités non-interagissante et partiellement habillée  $\chi^{(i)}$  ont également un com-

portement en  $1/q_n^2$  à haute fréquence, seuls les numérateurs des susceptibilités de spin et de charge (équation 6.56) contribuent aux coefficients  $\alpha^{(i)}$

$$\chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, iq_n) \underset{q_n \gg 1}{\simeq} \chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n) \underset{q_n \gg 1}{\simeq} \frac{\alpha^{(i)}}{q_n^2}. \quad (6.57)$$

Nous devons ainsi calculer le développement à haute fréquence de  $\chi^{(i)}$ . Pour ce faire, nous utilisons la représentation spectrale des fonctions de Green

$$\mathcal{G}_\sigma^{(i)}(\mathbf{k}, ik_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A_\sigma^{(i)}(\mathbf{k}, \omega)}{ik_n - \omega}, \quad (6.58)$$

où  $A_\sigma^{(i)}$  est le poids spectral, et  $i = 1, 2$  correspond aux cas sans interaction et avec interaction respectivement.

Afin d'alléger la notation du calcul à suivre, nous écrivons l'équation pour  $\chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n)$  comme

$$\begin{aligned} \chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n) &= -\frac{T}{2N} \sum_{k,\sigma} [\mathcal{G}_\sigma^{(1)}(k) \mathcal{G}_\sigma^{(i)}(k+q) + \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(k) \mathcal{G}_\sigma^{(i)}(k-q)], \\ &= -\frac{T}{2N} \sum_{k,\sigma} \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(k) \mathcal{G}_\sigma^{(i)}(k+q) + [q \leftrightarrow -q]. \end{aligned} \quad (6.59)$$

En remplaçant les fonctions de Green par leur représentation spectrale dans la définition des susceptibilités  $\chi^{(i)}$ , nous obtenons

$$\begin{aligned} \chi^{(i)}(\mathbf{q}, iq_n) &= -\frac{T}{2N} \sum_{k,\sigma} \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(k) \mathcal{G}_\sigma^{(i)}(k+q) + [q \leftrightarrow -q], \\ &= -\frac{T}{2N} \sum_{k,\sigma} \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{A_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) A_\sigma^{(i)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega')}{(ik_n - \omega)(ik_n + iq_n - \omega')} + [q \leftrightarrow -q], \\ &= -\frac{T}{2N} \sum_{k,\sigma} \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{A_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) A_\sigma^{(i)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega')}{iq_n - \omega' + \omega} \left[ \frac{1}{ik_n - \omega} - \frac{1}{ik_n + iq_n - \omega'} \right] + [q \leftrightarrow -q], \\ &= -\frac{1}{2N} \sum_{k,\sigma} \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{A_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) A_\sigma^{(i)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega')}{iq_n - \omega' + \omega} (f(\omega) - f(\omega')) + [q \leftrightarrow -q], \\ &= -\frac{1}{2N} \sum_{k,\sigma} \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \frac{A_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) A_\sigma^{(i)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega')}{q_n^2 + (\omega - \omega')^2} (f(\omega) - f(\omega'))(\omega - \omega') + [q \leftrightarrow -q]. \end{aligned} \quad (6.60)$$

Nous pouvons ainsi déterminer les coefficients  $\alpha^{(i)}$

$$\alpha^{(i)} = -\frac{1}{2N} \sum_{k,\sigma} \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} A_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) A_\sigma^{(i)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega') (f(\omega) - f(\omega'))(\omega - \omega') + [q \leftrightarrow -q]. \quad (6.61)$$

Cette dernière équation peut être résolue en utilisant les relations suivantes [74]

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} A_{\sigma}^{(i)}(\mathbf{k}, \omega) = 1, \quad (6.62)$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} A_{\sigma}^{(i)}(\mathbf{k}, \omega) f(\omega) = n_{\mathbf{k},\sigma}^{(i)}, \quad (6.63)$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} A_{\sigma}^{(i)}(\mathbf{k}, \omega) \omega = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^{(i)} + U \frac{n}{2} \delta_{i,2}, \quad (6.64)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} A_{\sigma}^{(i)}(\mathbf{k}, \omega) \omega f(\omega) = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \delta_{i,2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^{(i)}) n_{\mathbf{k},\sigma}^{(i)}. \quad (6.65)$$

Ici,  $\mu^{(i)}$  est le potentiel chimique, et  $n_{\mathbf{k},\sigma}^{(i)}$  est la fonction de distribution résolue en quantité de mouvement et en spin calculée à partir de la fonction de Green sans interaction ( $i = 1$ ) ou avec interaction ( $i = 2$ ). Dans le cas non-interagissant, il s'agit de la distribution de Fermi-Dirac. Notons que l'équation 6.65 n'est valide au niveau  $i = 2$  que lorsque l'équation  $\text{Tr}[\Sigma^{(2)} \mathcal{G}^{(2)}] = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  est satisfaite, ce qui est le cas en TPSC+. Nous trouvons ainsi que le coefficient du terme en  $1/q_n^2$  est

$$\alpha^{(i)} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)} + n_{\mathbf{k},\sigma}^{(i)}) + U \frac{n^2}{2} \delta_{i,2} - 2U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \delta_{i,2}. \quad (6.66)$$

En TPSC, avec  $i = 1$ , nous obtenons

$$\alpha^{(\text{TPSC})} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)}. \quad (6.67)$$

Le coefficient obtenu en TPSC+SFM est identique à celui que nous obtenons en TPSC puisque, à haute fréquence, les susceptibilités de spin et de charge sont calculées à partir de la fonction de Lindhard  $\chi^{(1)}$  (voir l'équation 6.5). Ce terme diffère du membre de droite de la règle de somme f présentée à l'équation 6.51 en raison de la fonction de distribution de particules : la TPSC et la TPSC+SFM satisfont la règle de somme f au niveau non-interagissant (avec la distribution de Fermi-Dirac  $n^{(1)}$ ). La règle de somme f est satisfaite exactement au vecteur d'onde nul  $\mathbf{q} = 0$  tant par la TPSC que la TPSC+SFM.

Pour la TPSC+, où  $i = 2$ , nous obtenons plutôt

$$\alpha^{(\text{TPSC}+)} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)} + n_{\mathbf{k},\sigma}^{(2)}) + U \frac{n^2}{2} - 2U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle. \quad (6.68)$$

Le coefficient obtenu par la TPSC+ diffère ainsi de la valeur attendue pour la règle de somme f (membre de droite de l'équation 6.51) par le terme  $U \frac{n^2}{2} - 2U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  au vecteur d'onde nul  $\mathbf{q} = 0$ .

Nous présentons maintenant une évaluation quantitative des déviations des coefficients 6.67 et

6.68 par rapport à la règle de somme f. En pratique, nous évaluons : (a) les coefficients 6.67 et 6.68, (b) les valeurs attendues de la règle de somme f par le membre de droite de l'équation 6.51, et (c) le membre de gauche de l'équation 6.51. Ce dernier résultat est obtenu par une dérivée en temps imaginaire de la susceptibilité de spin

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''_{sp,ch}(\mathbf{q}, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} T \sum_{iq_n} (e^{-iq_n \eta} - e^{iq_n \eta}) i q_n \chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, i q_n), \quad (6.69)$$

$$= -2 \left. \frac{\partial \chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0^+}. \quad (6.70)$$

Nous calculons cette dérivée numériquement en utilisant des différences finies

$$-2 \left. \frac{\partial \chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0^+} \simeq -2 \left( \frac{\chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, \tau_1) - \chi_{sp,ch}(\mathbf{q}, 0)}{\tau_1} \right), \quad (6.71)$$

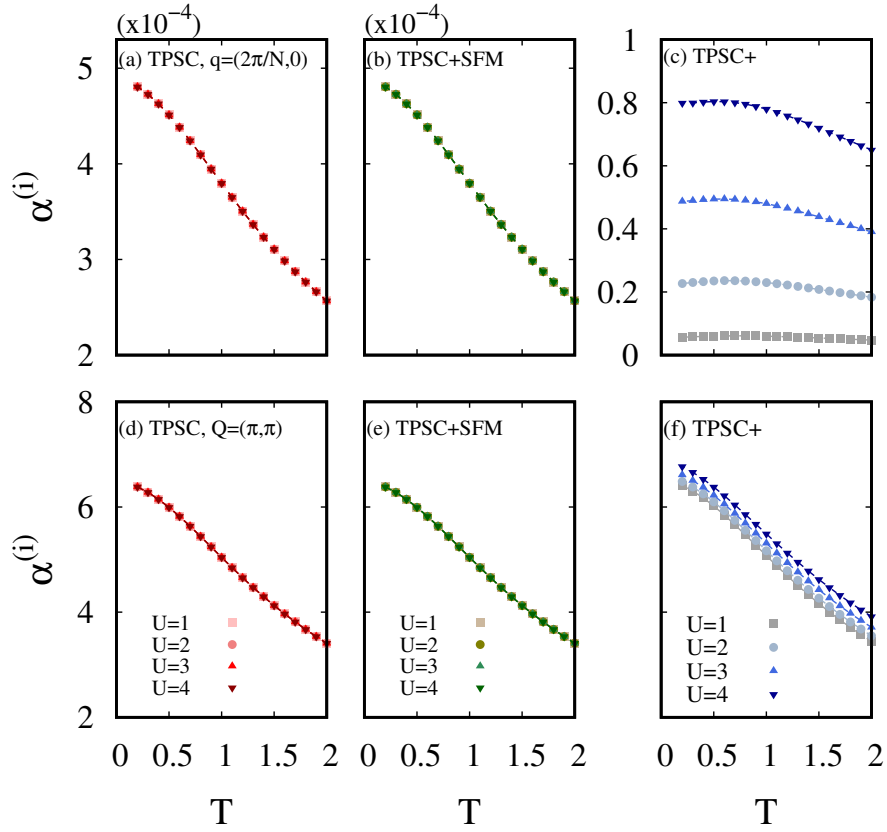
où la valeur  $\tau_1$  est choisie près de 0 ( $\tau_1 = 10^{-5}$ ).

Il est possible de vérifier que l'évaluation des coefficients  $\alpha^{(i)}$  menant aux résultats 6.67 et 6.68 est correcte en comparant leur évaluation numérique à l'évaluation de la dérivée 6.70. Nous montrons ces résultats à la figure 6.6, où les points sont obtenus par le développement à haute fréquence, et les lignes pointillées par la dérivée. Nous observons un recouvrement parfait entre les résultats obtenus par ces deux méthodes de calculs qui sont considérablement différentes.

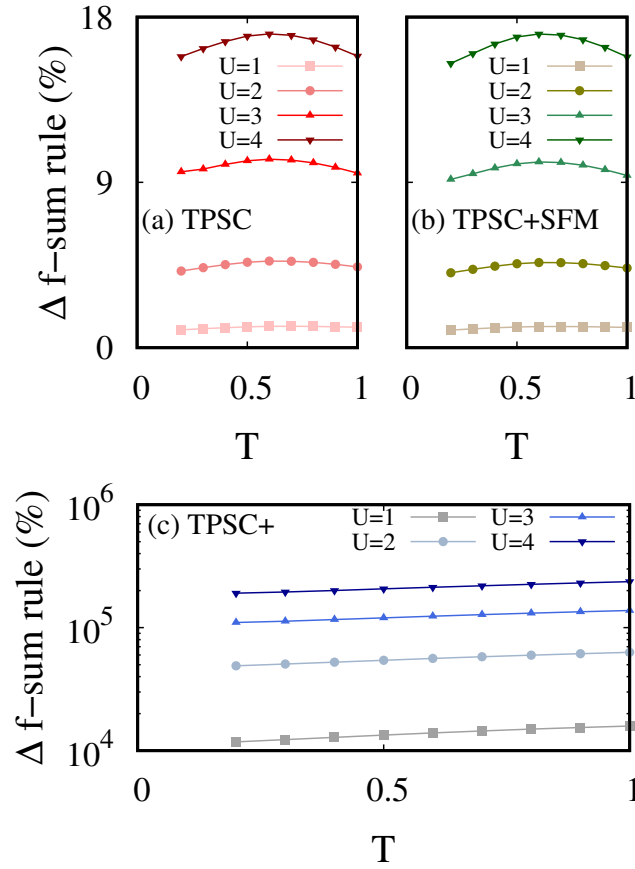
Ayant validé les calculs présentés jusqu'à présent dans cette section, nous procédons maintenant à l'évaluation de la violation de la règle de somme f par les trois approches TPSC. Nous montrons la déviation relative des coefficients obtenus par l'équation 6.70 et la valeur attendue de la règle de somme f (membre de droite de l'équation 6.51).

Nous présentons à la figure 6.7 cette déviation au vecteur d'onde  $\mathbf{q} = (2\pi/N, 0)$  où  $N = 256$  est le nombre de sites dans une direction de l'espace, puisque nous nous attendons à ce que la déviation soit plus importante à de faibles valeurs du vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ , où la règle de somme f devrait être petite. Les calculs ont été faits pour des températures entre  $T = 0.2$  et  $T = 1$ , et des valeurs de  $U$  entre 1 et 4. Nous montrons que, pour les trois approches TPSC, l'écart avec la règle de somme f augmente avec la valeur de l'interaction  $U$ . Les sous-figures (a) et (b) présentent les résultats obtenus par la TPSC et la TPSC+SFM. Pour ces deux méthodes, les déviations relatives sont inférieures à 18% pour la plus grande valeur de  $U$  considérée. Ces petites déviations sont dues au fait que les deux approches satisfont la règle de somme f au niveau non-interagissant. La TPSC+ offre des résultats bien différents : les déviations à la règle de somme f atteignent des ordres de grandeur de 10<sup>5</sup>%. Ces énormes écarts sont attendus : tel que discuté plus haut, l'écart à la règle de somme f prend la valeur  $U \frac{n^2}{2} - 2U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  à  $\mathbf{q} = 0$ .

La déviation à la règle de somme f par la TPSC+ est moins importante lorsque le vecteur d'onde



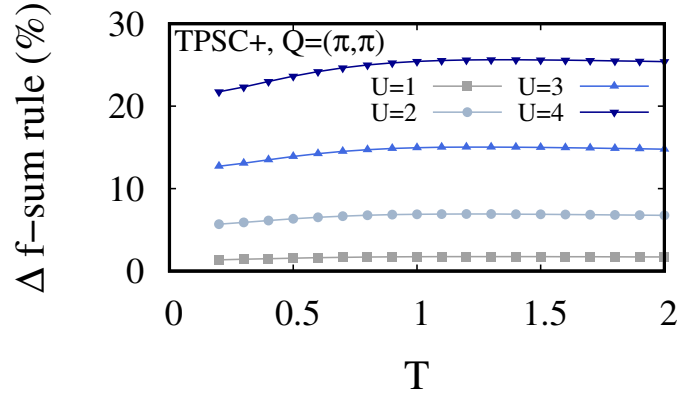
**FIGURE 6.6** Dérivée de la susceptibilité de spin par rapport au temps imaginaire. Les points sont obtenus par le calcul de la dérivée par différences finies (équation 6.70). Les lignes pointillées sont obtenues par l'évaluation des coefficients du terme en  $1/q_n^2$  du développement à haute fréquence de  $\chi^{(i)}$  donnés par l'équation 6.67 pour la TPSC et la TPSC+SFM, et par l'équation 6.68 pour la TPSC+. Les figures (a), (b) et (c) présentent le calcul pour le vecteur d'onde  $\mathbf{q} = (2\pi/N, 0)$  avec  $N = 256$  le nombre de sites dans une direction de l'espace. Les figures (d), (e) et (f) présentent le calcul pour le vecteur d'onde  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ .



**FIGURE 6.7** Violation de la règle de somme  $f$  évaluée au vecteur d'onde  $\mathbf{q} = (2\pi/N, 0)$  avec  $N = 256$  sites dans une direction de l'espace. Les résultats sont obtenus par les approches (a) TPSC, (b) TPSC+SFM et (c) TPSC+ pour plusieurs valeurs de l'interaction  $U$  en fonction de la température  $T$ . Plus précisément, les figures présentent la déviation relative obtenue entre les coefficients calculés par la dérivée en temps imaginaire de la susceptibilité de spin (équation 6.70) et la règle de somme  $f \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}, \sigma}^{(2)}$ . Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ . Figure tirée de la référence [3].

est grand. En particulier, la figure 6.8 présente cette déviation relative évaluée au vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . La déviation à ce vecteur d'onde atteint  $\sim 25\%$  pour  $U = 4$ , soit le même ordre de grandeur que les déviations observées pour les approches TPSC et TPSC+SFM.





**FIGURE 6.8** Violation de la règle de somme  $f$  évaluée au vecteur d'onde  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Les résultats sont obtenus par l'approche TPSC+ pour plusieurs valeurs de l'interaction  $U$  en fonction de la température  $T$ . Plus précisément, la figure présente la déviation relative obtenue entre les coefficients calculés par la dérivée en temps imaginaire de la susceptibilité de spin (équation 6.70) et la règle de somme  $f \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}, \sigma}^{(2)}$ . Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ .

## 6.8 Lois de conservation

En raison des lois de conservation du spin et de la charge, les susceptibilités de spin et de charge évaluées au vecteur d'onde nul et à fréquence de Matsubara non-nulle doivent être nulles :  $\chi_{sp, ch}(\mathbf{q} = 0, iq_n \neq 0) = 0$ . En effet, la charge et le spin sont des quantités conservées dans le modèle de Hubbard, ce qui implique que les opérateurs de charge et de spin au vecteur d'onde  $\mathbf{q} = 0$  (soit le nombre de particules total et le spin total) ne dépendent pas du temps. Considérons d'abord la densité. L'opérateur densité dans l'espace des vecteurs d'onde est

$$\begin{aligned}
 n_{\mathbf{q}} &= \sum_j e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} n_j, \\
 &= \sum_{j\sigma} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{j\sigma} e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}.
 \end{aligned} \tag{6.72}$$

Nous calculons la dérivée en temps imaginaire de cet opérateur, sachant que  $[n_{i\sigma}, n_{j\sigma'}] = 0 \Rightarrow$

$$[n_{i\sigma}, n_{\mathbf{q}}] = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{\mathbf{q}}(\tau)}{\partial \tau} &= [H, n_{\mathbf{q}}(\tau)], \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \\ \Rightarrow \frac{\partial n_{\mathbf{q}=0}(\tau)}{\partial \tau} &= 0. \end{aligned} \quad (6.73)$$

Nous pouvons procéder au même calcul pour l'opérateur de spin  $S_{\mathbf{q}}^z$ , qui est défini par

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{q}}^z &= \sum_{j\sigma} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} n_{j\sigma} \sigma, \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \sigma, \end{aligned} \quad (6.74)$$

où  $\sigma = \pm 1$  correspond au signe du spin lorsqu'elle est utilisée comme une variable dans la somme (plutôt que comme un indice d'opérateur). Par conséquent, l'opérateur  $S_{\mathbf{q}=0}^z$  est également constant en temps imaginaire

$$\frac{\partial S_{\mathbf{q}}^z(\tau)}{\partial \tau} = [H, S_{\mathbf{q}}^z(\tau)], \quad (6.75)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \quad (6.76)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial S_{\mathbf{q}=0}^z(\tau)}{\partial \tau} = 0. \quad (6.77)$$

Puisque les opérateurs de spin et de charge au vecteur d'onde nul  $S_{\mathbf{q}=0}^z$  et  $n_{\mathbf{q}=0}$  sont constants en temps imaginaire, les susceptibilités de charge et de spin correspondantes le sont également

$$\chi_{ch}(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{N} \langle n_{\mathbf{q}}(\tau) n_{-\mathbf{q}} \rangle - \frac{1}{N} \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \langle n_{-\mathbf{q}} \rangle, \quad (6.78)$$

$$\Rightarrow \chi_{ch}(\mathbf{q} = 0, \tau) = \frac{1}{N} \langle n_{\mathbf{q}=0}^2 \rangle - \frac{1}{N} \langle n_{\mathbf{q}=0} \rangle^2 = \text{Constante indépendante de } \tau, \quad (6.79)$$

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{N} \langle S_{\mathbf{q}}^z(\tau) S_{-\mathbf{q}}^z \rangle \quad (6.80)$$

$$\Rightarrow \chi_{sp}(\mathbf{q} = 0, \tau) = \frac{1}{N} \langle (S_{\mathbf{q}=0}^z)^2 \rangle = \text{Constante indépendante de } \tau. \quad (6.81)$$

Comme ces fonctions de corrélation sont constantes en temps imaginaire, seule la composante à fréquence de Matsubara nulle ( $iq_0 = 0$ ) de leur fonction réciproque en transformée de Fourier est non-nulle. Ceci prouve le résultat mentionné au début de cette section, soit  $\chi_{sp,ch}(\mathbf{q} = 0, iq_n \neq 0) = 0$ .

En TPSC, ces lois de conservation sont respectées puisque la susceptibilité non-interagissante  $\chi^{(1)}$  est nulle au vecteur d'onde  $\mathbf{q} = 0$  pour toutes les fréquences de Matsubara non-nulles

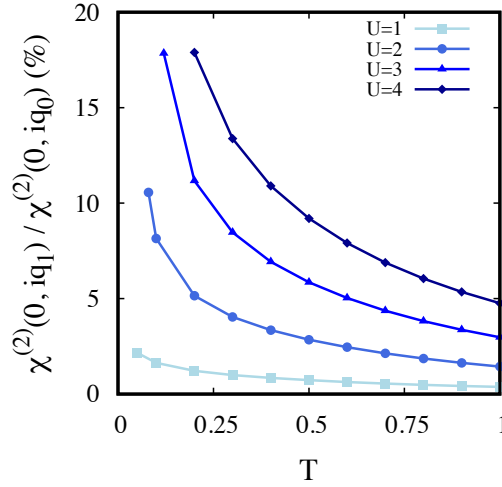
$$\begin{aligned}
 \chi^{(1)}(\mathbf{q} = 0, iq_n \neq 0) &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \mathcal{G}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) \mathcal{G}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n + iq_n), \\
 &= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu^{(1)}} \frac{1}{ik_n + iq_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu^{(1)}}, \\
 &= -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}})}{iq_n}, \\
 &= 0 \quad \forall q_n \neq 0.
 \end{aligned} \tag{6.82}$$

Cette propriété est également vérifiée en TPSC+SFM, puisque nous utilisons la susceptibilité  $\chi^{(1)}$  dans le calcul des susceptibilités de spin et de charge à fréquence de Matsubara non-nulle. Toutefois, ce n'est pas le cas en TPSC+ : la susceptibilité partiellement habillée  $\chi^{(2)}$  prend des valeurs non-nulles à  $\mathbf{q} = 0$  pour des fréquences de Matsubara non-nulles. Par exemple, nous avons obtenu à la section précédente le développement à haute fréquence de  $\chi^{(2)}$ . À  $\mathbf{q} = 0$ , ce développement prend la forme

$$\chi^{(2)}(\mathbf{q} = 0, iq_n) \underset{q_n \gg 1}{\simeq} \frac{1}{q_n^2} \left[ U \frac{n^2}{2} - 2U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \right]. \tag{6.83}$$

Ce terme n'est nul que dans le cas particulier où  $U = 0$ , et décroît lorsque la fréquence de Matsubara augmente.

Nous pouvons nous attendre à ce que la plus grande déviation soit observée pour la première fréquence de Matsubara non-nulle  $q_1$ . Ainsi, à la figure 6.9, nous montrons le ratio de la valeur de la susceptibilité partiellement habillée  $\chi^{(2)}(\mathbf{q} = 0, iq_n)$  évaluée aux fréquences de Matsubara  $q_1$  et  $q_0$  en fonction de la température. Les calculs ont été réalisés pour des forces d'interaction allant de  $U = 1$  à  $U = 4$ . La violation des lois de conservation par la TPSC+ augmente lorsque la température décroît et lorsque la valeur de l'interaction  $U$  augmente. Bien que la valeur de la susceptibilité partiellement habillée à la fréquence de Matsubara  $q_1$  soit petite pour  $U \leq 2$  (un ordre de grandeur plus petit que la valeur à la fréquence de Matsubara  $q_0$ ), elle atteint près de 20% de la valeur à la fréquence de Matsubara  $q_0$  à basse température pour  $U = 3$  et  $U = 4$ .



**FIGURE 6.9** Ratio de la susceptibilité partiellement habillée  $\chi^{(2)}(\mathbf{q} = 0, iq_1) / \chi^{(2)}(\mathbf{q} = 0, iq_0)$  en fonction de la température  $T$  obtenue par des calculs TPSC+. L'approche TPSC+ viole les lois de conservations du spin et de la charge, tel que montré par ce ratio non-nul. Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ . Figure tirée de la référence [3].

## 6.9 Comparaison à la théorie des perturbations au second ordre

Dans cette section, nous nous intéressons à la self-énergie obtenue par la théorie des perturbations au second ordre pour le modèle de Hubbard ( $\Sigma_{2PT}$ ). Le but de cette section est de montrer que les résultats obtenus par la TPSC, la TPSC+ et la TPSC+SFM ne sont pas triviaux, au sens où ces approches ne font pas que retrouver les résultats de la théorie des perturbations.

La self-énergie  $\Sigma_{2PT}$  est donnée par

$$\Sigma_{2PT}(\mathbf{r}, \tau) = U^2 \mathcal{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \tau)^2 \mathcal{G}^{(0)}(-\mathbf{r}, -\tau), \quad (6.84)$$

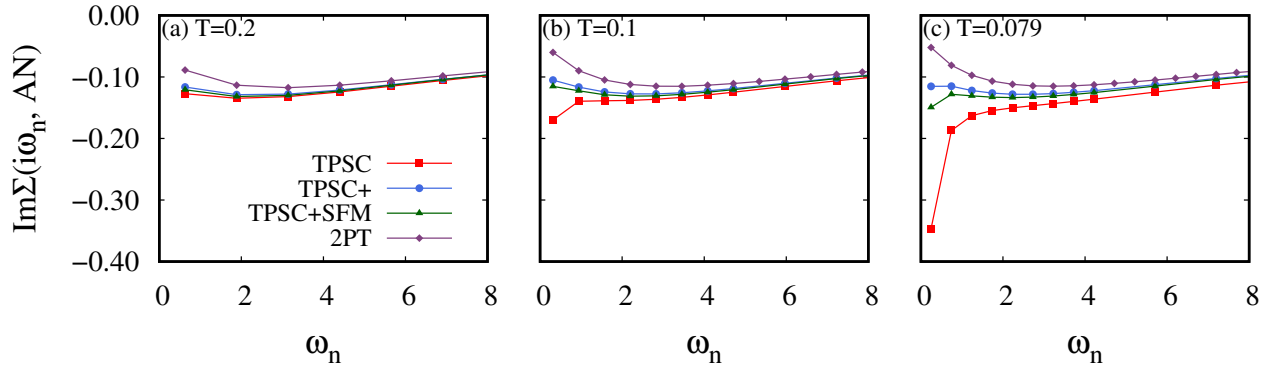
où  $\mathcal{G}^{(0)}$  est la fonction de Green non-interagissante. Notons que le produit de deux fonctions de Green correspond à la fonction de Lindhard

$$\chi^{(0)}(\mathbf{r}, \tau) = -2\mathcal{G}^{(0)}(\mathbf{r}, \tau)\mathcal{G}^{(0)}(-\mathbf{r}, -\tau). \quad (6.85)$$

La self-énergie obtenue par les trois approches TPSC a une forme qui peut à première vue sembler similaire à celle de  $\Sigma_{2PT}$

$$\Sigma_{TPSC}(\mathbf{r}, \tau) \sim U(U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{r}, \tau) + U_{ch}(\mathbf{r}, \tau)\chi_{ch}(\mathbf{r}, \tau))\mathcal{G}^{(0)}(-\mathbf{r}, -\tau). \quad (6.86)$$

Nous comparons la partie imaginaire de la self-énergie obtenue par la théorie des perturbations et celles qui sont obtenues par la TPSC, la TPSC+ et la TPSC+SFM à la figure 6.10 pour  $U = 2$  à

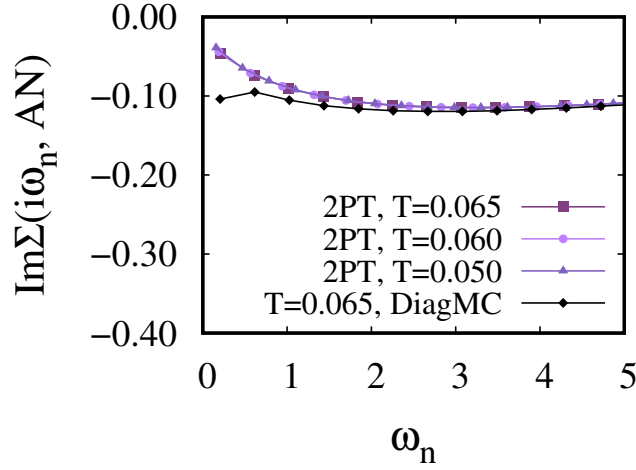


**FIGURE 6.10** Comparaison de la partie imaginaire de la self-énergie obtenue par les trois approches TPSC et par la théorie des perturbations au second ordre. Les résultats sont présentés pour l'antinode  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ , pour  $U = 2$ , aux températures (a)  $T=0.2$ , (b)  $T=0.1$  et (c)  $T=0.079$ . Les approches TPSC prédisent l'ouverture d'un pseudogap antiferromagnétique, phénomène qui n'est pas observé pour  $\Sigma_{2PT}$ . Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ .

trois températures différentes : (a)  $T = 0.2$ , (b)  $T = 0.1$  et (c)  $T = 0.079$ . Une telle comparaison permet de visualiser en quoi les approches TPSC se distinguent de l'approche perturbative. La plus grande différence entre ces résultats est que, tel que mentionné à la section 6.6, les trois approches TPSC prédisent l'ouverture d'un pseudogap antiferromagnétique (à différentes températures  $T^*$ ). Pour les trois températures présentées à la figure 6.10, la théorie des perturbations au second ordre ne retrouve pas ce phénomène.

Sachant que la température à laquelle le pseudogap antiferromagnétique doit apparaître dans ce modèle est  $T = 0.065$  selon des simulations en Monte Carlo diagrammatique (DiagMC) [22], nous comparons à la figure 6.11 la self-énergie obtenue par DiagMC à  $T = 0.065$  à celle obtenue par  $T = 0.065$ ,  $T = 0.06$  et  $T = 0.05$ . Même à ces basses valeurs de la température, la théorie des perturbations au second ordre ne retrouve pas la phénoménologie attendue. Nous pouvons ainsi conclure que la TPSC et ses améliorations TPSC+ et TPSC+SFM sont des approches qui, bien qu'elles puissent sembler analogues à une méthode perturbative, offrent un meilleur accès à la description de la physique du régime d'interaction faible du modèle de Hubbard en deux dimensions.

Notons toutefois que la self-énergie  $\Sigma_{2PT}$  converge vers la valeur exacte à grande fréquence [74]. Ce n'est pas le cas de la self-énergie obtenue par les trois approches TPSC.



**FIGURE 6.11** Partie imaginaire de la self-énergie obtenue par la théorie des perturbations au second ordre pour  $U = 2$ , à l'antinoeud  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ , aux températures  $T = 0.065$ ,  $T = 0.06$  et  $T = 0.05$ . Les points noirs sont obtenus par DiagMC [22]. La théorie des perturbations au second ordre ne permet pas de décrire le phénomène du pseudogap antiferromagnétique. Les calculs sont faits pour la densité  $n = 1$ .

## 6.10 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les approches TPSC+ et TPSC+SFM, deux variantes de la TPSC originale. Nous avons décrit les aspects théoriques de ces méthodes. Les études analytiques et numériques présentées dans ce chapitre ont pu montrer que les approches TPSC+ et TPSC+SFM sont valides dans le régime classique renormalisé du modèle de Hubbard en deux dimensions. Il s'agit d'une amélioration par rapport à la TPSC. Nous avons toutefois montré que la TPSC+ ne respecte pas les lois de conservation du spin et de la charge. Malgré cette limitation, la TPSC+, comme la TPSC et la TPSC+SFM, décrit l'apparition du pseudogap antiferromagnétique dans le modèle de Hubbard en deux dimensions.

Nous avons comparé les résultats des approches TPSC+ et TPSC+SFM à ceux obtenus par des méthodes numériquement exactes (DiagMC et CDet) dans la référence [3]. Ce travail d'étalonnage nous a permis de conclure que l'approche TPSC+SFM permet d'obtenir les résultats les plus précis pour les susceptibilités de spin et de charge, tandis que l'approche TPSC+ offre la meilleure approximation de la self-énergie. De façon générale, les approches TPSC+ et TPSC+SFM améliorent les résultats obtenus à basse température pour le modèle de Hubbard en deux dimensions.

## Chapitre 7

# Étude du modèle d'Emery par l'approche TPSC+DMFT

Dans les chapitres 4 et 5 de cette thèse, nous avons utilisé l'approche TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande afin de modéliser différents phénomènes physiques dans les cuprates dopés en électrons. Or, comme nous l'avons mentionné dans le chapitre 3, l'élément minimal des cuprates dopés en électrons est le plan d'oxyde de cuivre ( $\text{CuO}_2$ ). Certains phénomènes physiques observés dans les cuprates nécessitent la considération des orbitales  $p$  des atomes d'oxygène présents dans ces plans bidimensionnels. C'est le cas du dopage dans les cuprates dopés en trous, qui semble se produire sur les orbitales  $p$  de l'oxygène plutôt que sur les orbitales  $d$  du cuivre [214].

Dans ce chapitre, nous introduisons le modèle d'Emery-VSA [85, 86], un hamiltonien qui inclut deux orbitales non-corrélées et une orbitale corrélée par maille élémentaire. Nous débutons par la description du hamiltonien et de son application aux cuprates à la section 7.1. À la section 7.2, nous revisitons l'approche des dérivées fonctionnelles que nous avons introduite au chapitre 1, mais nous l'appliquons ici à un modèle multi-orbital simple. Nous appliquons ensuite le formalisme de la TPSC au modèle d'Emery à la section 7.3. Finalement, à la section 7.4, nous appliquons l'approche développée dans ce chapitre à une réalisation du modèle d'Emery.

Notons que des extensions de la TPSC au cas multi-orbital ont déjà été proposées [105, 118–120, 122], et l'une d'elle a même été appliquée au modèle d'Emery [105]. La distinction entre le travail présenté dans le cadre de cette thèse et les extensions proposées précédemment est que nous développons l'approche en conservant l'idée centrale d'un modèle où les orbitales sont non-dégénérées. Ce focus nous mènera à des conclusions différentes des travaux qui ont été réalisés par le passé.

Ce projet fait l'objet de l'article [4], soumis pour publication après le dépôt initial de cette thèse.

| Paramètre    | Définition                                              |
|--------------|---------------------------------------------------------|
| $t_{pd}$     | Saut entre les orbitales $p$ et $d$                     |
| $t_{pp}$     | Saut entre les orbitales $p_y$ et $p_x$ orbitals        |
| $t_{pp'}$    | Saut entre deux orbitales $p_x$ ou deux orbitales $p_y$ |
| $\epsilon_p$ | Énergie de site des orbitales $p_x$ et $p_y$            |
| $\epsilon_d$ | Énergie de site des orbitales $d$                       |

TABLEAU 7.1 Paramètres du hamiltonien sans interaction du modèle d'Emery.

## 7.1 Motivation : Modèle d'Emery et application aux cuprates

### 7.1.1 Hamiltonien

Dans le modèle d'Emery, nous considérons un réseau carré bidimensionnel où chaque cellule unité contient trois orbitales distinctes : une orbitale  $d$  corrélée, et deux orbitales non-corrélées  $p_x$  et  $p_y$ . Les opérateurs d'annihilation (de création) associés seront notés  $d_{i\sigma}^{(+)}$ ,  $p_{x,i\sigma}^{(+)}$  et  $p_{y,i\sigma}^{(+)}$  dans l'espace réel, où  $i$  est un indice de cellule unité et  $\sigma$  un indice de spin. Dans l'espace réciproque, l'indice de cellule unité  $i$  est remplacé par un indice de quantité de mouvement  $\mathbf{k}$ .

Le hamiltonien du modèle d'Emery est

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \mathbf{h}^{(0)}(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma} + U_d \sum_i n_{di\uparrow} n_{di\downarrow}, \quad (7.1)$$

où  $C_{\mathbf{k}\sigma}^{(+)} = (d_{\mathbf{k}\sigma}^{(+)}, p_{x,\mathbf{k}\sigma}^{(+)}, p_{y,\mathbf{k}\sigma}^{(+)})$  est un vecteur d'opérateurs d'annihilation (de création),  $n_{\alpha i\sigma}$  est l'opérateur nombre pour l'orbitale  $\alpha$  dans la cellule unité  $i$ , et  $\mathbf{h}^{(0)}(\mathbf{k})$  est une matrice de dimensions  $3 \times 3$  représentant la partie non-interagissante du hamiltonien. Ce hamiltonien sans interaction est, en unités où le pas du réseau est  $a = 1$ ,

$$\mathbf{h}^{(0)}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon_d & t_{pd}(1 - e^{-ik_x}) & t_{pd}(1 - e^{-ik_y}) \\ t_{pd}(1 - e^{ik_x}) & \epsilon_p + 2t_{pp'} \cos(k_x) & t_{pp}(1 - e^{ik_x})(1 - e^{-ik_y}) \\ t_{pd}(1 - e^{ik_y}) & t_{pp}(1 - e^{-ik_x})(1 - e^{ik_y}) & \epsilon_p + 2t_{pp'} \cos(k_y) \end{pmatrix}, \quad (7.2)$$

où les divers paramètres sont définis dans le Tableau 7.1.

Dans la figure 7.1, nous montrons une représentation schématique du modèle d'Emery [4, 215].



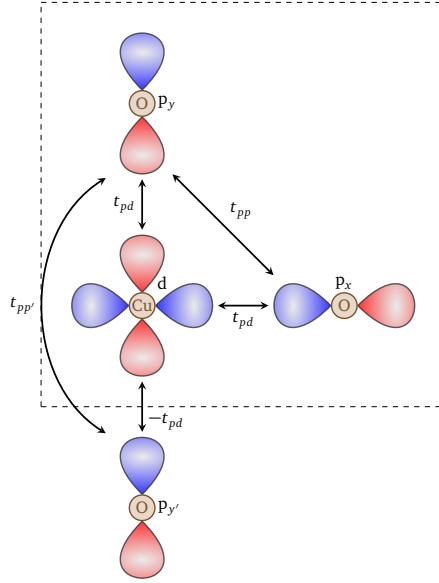


FIGURE 7.1 Représentation schématique du modèle d'Emery [4, 215].

### 7.1.2 Application aux cuprates et motivation

Le modèle d'Emery, parfois appelé modèle de Hubbard à trois bandes ou modèle d'Emery-VSA, a été introduit dans le cadre de l'étude de la supraconductivité dans les cuprates [85, 86]. Depuis, de nombreux aspects du modèle ont été étudiés par différentes techniques numériques et théoriques. Par exemple, la supraconductivité dans le modèle d'Emery a été étudiée par de nombreuses méthodes [216–223]. De plus, des études élargies du diagramme de phase [224, 225], de l'antiferromagnétisme [216], du pseudogap [218, 219] et de l'isolant de Mott [226] ont été réalisées. Le modèle d'Emery a permis d'étudier la force des corrélations électroniques dans les cuprates [204, 227, 228] ainsi que l'asymétrie entre les cuprates dopés en trous et en électrons [105, 204].

Certains aspects des cuprates semblent être bien décrits par le modèle de Hubbard à une bande. C'est le cas, comme nous l'avons vu lors de notre discussion des cuprates dopés en électrons, du pseudogap antiferromagnétique de ce côté du diagramme de phase. Toutefois, d'autres aspects de la physique de ces matériaux nécessitent de tenir compte de la présence des orbitales d'oxygène. Entre autres, une récente étude du modèle a établi un lien entre le dopage en trou sur les orbitales d'oxygène [229], le gap de transfert de charge [217, 230, 231] et la température critique optimale de la phase supraconductrice, validant aussi l'hypothèse du mécanisme de super-échange pour la supraconductivité dans les cuprates [221].

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au développement d'une approche TPSC construite spécifiquement pour ce modèle, à l'image de la formulation originale de la TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande. Nous nous intéressons au développement de cette approche pour plusieurs

raisons. La première est que, en l'absence d'une solution exacte, le développement de nouvelles méthodes numériques pour le modèle d'Emery permet de comparer les résultats et d'atteindre des conclusions concernant ses propriétés fondamentales. Ensuite, nous avons déjà vu que la TPSC a permis de comprendre des aspects importants du diagramme de phase des cuprates dopés en électrons à partir du modèle de Hubbard à une bande. Il serait important de déterminer si la même approche permet d'atteindre les mêmes conclusions pour le modèle d'Emery, notamment concernant le pseudogap antiferromagnétique.

Enfin, de façon générale, l'étude de modèles multi-orbitaux est nécessaire pour la compréhension de plusieurs autres matériaux, comme le ruthénate de strontium et les supraconducteurs à base de fer. Ces matériaux peuvent être décrits par des hamiltoniens plus compliqués que le modèle d'Emery, incluant par exemple le couplage de Hund. Plutôt que de développer une méthode universelle permettant d'étudier n'importe quel hamiltonien multi-orbital, nous nous concentrons ici sur le modèle d'Emery en raison de sa simplicité (une seule orbitale corrélée) et de la particularité suivante : dans ce modèle, les orbitales sont non-dégénérées. En étudiant le formalisme de la TPSC pour le modèle d'Emery, nous espérons pouvoir apprendre comment généraliser cette approche de façon robuste à d'autres types de hamiltoniens multi-orbitaux.

## 7.2 Approche des dérivées fonctionnelles pour un modèle de Hubbard multi-orbital simple

---

Le but de cette section est d'obtenir une équation définissant la self-énergie pour un hamiltonien ayant la forme

$$H = \sum_{ij} \sum_{\sigma} \sum_{\alpha\beta} t_{ij,\alpha\beta} c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\beta\sigma} + \sum_{i\alpha\beta} U_{\alpha\beta} n_{i\alpha\uparrow} n_{i\beta\downarrow}, \quad (7.3)$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des indices d'orbitales. Le modèle d'Emery correspond au cas particulier où l'interaction est uniquement sur les orbitales  $d$  :  $U_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha d} \delta_{\beta d} U_d$ . Nous définirons ainsi  $U_{dd} = U_d$ , et  $U_{\alpha\beta} = 0$  pour toutes les autres combinaisons d'indices d'orbitales.

Pour obtenir la self-énergie, nous utilisons le formalisme des dérivées fonctionnelles en présence d'un champ source [96, 97].

### 7.2.1 Équations du mouvement des opérateurs de création et d'annihilation

Nous calculons d'abord les équations du mouvement pour l'opérateur d'annihilation  $c_{l\gamma\sigma}(\tau)$ , où  $l$  est un indice de cellule unité,  $\gamma$  un indice d'orbitale, et  $\tau$  le temps imaginaire. Cette dérivée est calculée grâce au commutateur

$$\frac{\partial c_{l\gamma\sigma}(\tau)}{\partial \tau} = \left[ \left( H - \mu \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} \right), c_{l\gamma\sigma}(\tau) \right]. \quad (7.4)$$

Nous évaluons ce commutateur grâce aux identités

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B, \quad (7.5)$$

$$\Rightarrow [c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma}, c_{l\gamma\sigma'}] = -\delta_{il}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\sigma\sigma'}c_{j\beta\sigma}. \quad (7.6)$$

Nous évaluons l'équation 7.4 et obtenons, pour chacun des termes du hamiltonien,

$$\sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\sigma} t_{ij,\alpha\beta} [c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma}, c_{l\gamma\sigma'}] = - \sum_{j\beta} t_{lj,\gamma\beta} c_{j\beta\sigma'}, \quad (7.7)$$

$$- \mu \sum_i \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} [c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma}, c_{l\gamma\sigma'}] = \mu c_{l\gamma\sigma'}, \quad (7.8)$$

$$\sum_i \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha\beta} [n_{i\alpha\uparrow} n_{i\beta\downarrow}, c_{l\gamma\sigma'}] = \sum_i \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha\beta} (n_{i\alpha\uparrow} [n_{i\beta\downarrow}, c_{l\gamma\sigma'}] + [n_{i\alpha\uparrow}, c_{l\gamma\sigma'}] n_{i\beta\downarrow}), \quad (7.9)$$

$$= - \sum_{\alpha} U_{\alpha\gamma} n_{l\alpha-\sigma'} c_{l\gamma\sigma'}. \quad (7.10)$$

Ainsi, le résultat final pour la dérivée temporelle de l'opérateur d'annihilation est, en utilisant la notation  $\bar{a} = \sum_a$ ,

$$\frac{\partial c_{l\gamma\sigma'}(\tau)}{\partial \tau} = -t_{l\bar{j},\bar{\beta}\gamma} c_{j\bar{\beta}\sigma'}(\tau) + \mu c_{l\gamma\sigma'}(\tau) - U_{\bar{\beta}\gamma} n_{l\bar{\beta}-\sigma'}(\tau) c_{l\gamma\sigma'}(\tau). \quad (7.11)$$

Nous procédons maintenant au calcul de la dérivée temporelle de l'opérateur de création

$$\frac{\partial c_{l\gamma\sigma'}^\dagger(\tau)}{\partial \tau} = \left[ \left( H - \mu \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} \right), c_{l\gamma\sigma'}^\dagger(\tau) \right]. \quad (7.12)$$

Cette fois, les identités que nous utiliserons sont

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B, \quad (7.13)$$

$$\Rightarrow [c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma}, c_{l\gamma\sigma'}^\dagger] = \delta_{jl}\delta_{\beta\gamma}\delta_{\sigma\sigma'}c_{i\alpha\sigma}^\dagger. \quad (7.14)$$

L'évaluation du commutateur nous permet d'obtenir les équations suivantes

$$\sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\sigma} t_{ij,\alpha\beta} [c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\beta\sigma}, c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}] = \sum_{i\alpha} t_{il,\alpha\gamma} c_{i\alpha\sigma'}^{\dagger}, \quad (7.15)$$

$$- \mu \sum_i \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} [c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i\alpha\sigma}, c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}] = -\mu c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}, \quad (7.16)$$

$$\sum_i \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha\beta} [n_{i\alpha\uparrow} n_{i\beta\downarrow}, c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}] = \sum_i \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha\beta} \left( n_{i\alpha\uparrow} [n_{i\beta\downarrow}, c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}] + [n_{i\alpha\uparrow}, c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}] n_{i\beta\downarrow} \right), \quad (7.17)$$

$$= \sum_{\alpha} U_{\alpha\gamma} n_{l\alpha-\sigma'} c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}. \quad (7.18)$$

Finalement, la dérivée temporelle de l'opérateur de création est, en rétablissant la notation où l'on somme les symboles surmontés d'une barre,

$$\frac{\partial c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}(\tau)}{\partial \tau} = t_{l\bar{j},\bar{\beta}\gamma} c_{j\bar{\beta}\sigma'}^{\dagger}(\tau) - \mu c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}(\tau) + U_{\bar{\beta}\gamma} n_{l\bar{\beta}-\sigma'}(\tau) c_{l\gamma\sigma'}^{\dagger}(\tau). \quad (7.19)$$

## 7.2.2 Équations du mouvement pour la fonction de Green

Nous calculons maintenant la fonction de Green en présence d'un champ source  $\phi$ . Les étapes présentées ici sont analogues au développement de la TPSC pour le modèle à une bande détaillé au chapitre 2. Nous introduisons d'abord la fonction de partition  $Z$  en présence d'un champ source  $\phi$

$$Z[\phi] = \left\langle T_{\tau} \exp [-c_{\bar{\alpha}\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\beta}\bar{\sigma}}(\bar{2})] \right\rangle, \quad (7.20)$$

à partir de laquelle nous définissons également, dans le but d'alléger la notation,

$$S[\phi] = \exp [-c_{\bar{\alpha}\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\beta}\bar{\sigma}}(\bar{2})]. \quad (7.21)$$

À partir de ces définitions, la fonction de Green en fonction d'un champ source  $\phi$  est définie par

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1, 2)_{\phi} = -\frac{\delta \ln(Z[\phi])}{\delta \phi_{\beta\alpha\sigma}(2, 1)}, \quad (7.22)$$

$$= -\left\langle T_{\tau} c_{\alpha\sigma}(1) c_{\beta\sigma}^{\dagger}(2) \right\rangle_{\phi}, \quad (7.23)$$

où la valeur moyenne d'un opérateur  $O(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N)$  en présence d'un champ source est définie par

$$\langle O(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) \rangle_{\phi} \equiv \frac{1}{Z[\phi]} \langle T_{\tau} O(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) S[\phi] \rangle. \quad (7.24)$$

Afin d'obtenir une expression pour la self-énergie, nous calculons d'abord la dérivée temporelle de la fonction de Green par rapport au temps imaginaire  $\tau_1$  :  $\frac{\partial \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi}{\partial \tau_1}$ . Cette dérivée mène à plusieurs termes : un terme provenant de la dérivée de l'opérateur d'annihilation par rapport au temps imaginaire  $\tau_1$ , un terme provenant de la dérivée des fonctions de Heaviside associées à l'opérateur d'ordre dans le temps, ainsi qu'un terme provenant de la dérivée des bornes de l'intégrale dans  $S[\phi]$  dû à l'action de l'opérateur de l'ordre dans le temps. Nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi}{\partial \tau_1} = & -t_{\bar{j}x_1\alpha\bar{\gamma}} \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{x}_j, \tau_1, 2)_\phi + \mu \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi + U_{\alpha\bar{\gamma}} \left\langle T_\tau c_{\bar{\gamma}-\sigma}^\dagger(1^+) c_{\bar{\gamma}-\sigma}(1) c_{\alpha\sigma}(1) c_{\beta\sigma}^\dagger(2) \right\rangle_\phi \\ & - \delta_{\alpha\beta} \delta(1-2) - \phi_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1, \bar{3}) \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3}, 2)_\phi. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Nous réarrangeons les termes dans l'équation précédente afin de définir le produit d'une fonction de Green non-interagissante  $\mathcal{G}^{(0)}$  et d'une fonction de Green avec interaction  $\mathcal{G}$

$$\begin{aligned} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial \tau_1} - \mu \right) \delta(\bar{x}_j - x_1) \delta_{\alpha\bar{\gamma}} + t_{\bar{j}x_1\alpha\bar{\gamma}} \right] \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{x}_j, \tau_1, 2)_\phi = & -\delta_{\alpha\beta} \delta(1-2) - \phi_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1, \bar{3}) \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3}, 2)_\phi \\ & + U_{\alpha\bar{\gamma}} \left\langle T_\tau c_{\bar{\gamma}-\sigma}^\dagger(1^+) c_{\bar{\gamma}-\sigma}(1) c_{\alpha\sigma}(1) c_{\beta\sigma}^\dagger(2) \right\rangle_\phi, \end{aligned} \quad (7.26)$$

$$\equiv -\mathcal{G}_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}^{(0)}(1, \bar{3})^{-1} \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3}, 2)_\phi. \quad (7.27)$$

La fonction de Green satisfait à l'équation de Dyson en présence d'un champ source

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi^{-1} = \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}^{(0)}(1,2)^{-1} - \phi_{\alpha\beta\sigma}(1,2) - \Sigma_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi, \quad (7.28)$$

ce qui nous permet d'identifier la self-énergie dans l'équation 7.26

$$\Sigma_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1, \bar{3})_\phi \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3}, 2)_\phi = -U_{\alpha\bar{\gamma}} \left\langle T_\tau c_{\bar{\gamma}-\sigma}^\dagger(1^+) c_{\bar{\gamma}-\sigma}(1) c_{\alpha\sigma}(1) c_{\beta\sigma}^\dagger(2) \right\rangle_\phi. \quad (7.29)$$

Nous constatons ainsi que la self-énergie est obtenue à partir du commutateur entre le terme d'interaction du hamiltonien et l'opérateur d'annihilation.

Il est également possible de reproduire cette démarche en considérant la dérivée par rapport au temps imaginaire  $\tau_2$  plutôt que  $\tau_1$ . Dans ce cas, la self-énergie provient du commutateur entre le hamiltonien d'interaction et l'opérateur de création. La seconde expression implicite pour la self-énergie est

$$\mathcal{G}_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1, \bar{3})_\phi \Sigma_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3}, 2)_\phi = -U_{\bar{\gamma}\beta} \left\langle T_\tau c_{\bar{\gamma}-\sigma}^\dagger(2^+) c_{\bar{\gamma}-\sigma}(2) c_{\alpha\sigma}(1) c_{\beta\sigma}^\dagger(2) \right\rangle_\phi. \quad (7.30)$$

Les deux équations pour la self-énergie, 7.29 et 7.30, doivent être satisfaites simultanément.

### 7.2.3 Susceptibilités et vertex

Dans cette section, nous définissons les susceptibilités de spin et de charge dans un modèle multi-orbital.

Nous définissons d'abord quelques opérateurs utiles, soit les opérateurs densités généralisés

$$n_{\alpha\beta\sigma}(1,2) \equiv c_{\beta\sigma}^\dagger(2)c_{\alpha\sigma}(1), \quad (7.31)$$

$$n_{\alpha\beta}(1,2) \equiv n_{\alpha\beta\uparrow}(1,2) + n_{\alpha\beta\downarrow}(1,2), \quad (7.32)$$

et l'opérateur de spin généralisé

$$S_{\alpha\beta}^z(1,2) \equiv n_{\alpha\beta\uparrow}(1,2) - n_{\alpha\beta\downarrow}(1,2). \quad (7.33)$$

Ensuite, nous définissons les susceptibilités généralisées

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^+(1,2;3,4)_\phi \equiv \langle T_\tau n_{\alpha\beta}(1,2)n_{\delta\gamma}(3,4) \rangle_\phi - \langle T_\tau n_{\alpha\beta}(1,2) \rangle_\phi \langle T_\tau n_{\delta\gamma}(3,4) \rangle_\phi, \quad (7.34)$$

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^-(1,2;3,4)_\phi \equiv \langle T_\tau S_{\alpha\beta}^z(1,2)S_{\delta\gamma}^z(3,4) \rangle_\phi - \langle T_\tau S_{\alpha\beta}^z(1,2) \rangle_\phi \langle T_\tau S_{\delta\gamma}^z(3,4) \rangle_\phi. \quad (7.35)$$

Nous notons  $\chi^{(0)}$  la susceptibilité qui n'est calculée que par le produit de deux fonctions de Green, c'est-à-dire qui n'inclut pas de vertex

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(0)}(1,2;3,4)_\phi \equiv -2\mathcal{G}_{\alpha\gamma\sigma}(1,4)_\phi \mathcal{G}_{\delta\beta\sigma}(3,2)_\phi. \quad (7.36)$$

En présence d'un champ source, les susceptibilités généralisées peuvent être écrites en fonction de dérivées fonctionnelles de la fonction de Green

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^+(1,2;3,4)_\phi = - \sum_{\sigma\sigma'} \frac{\delta \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi}{\delta \phi_{\gamma\delta\sigma'}(4,3)}, \quad (7.37)$$

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^-(1,2;3,4)_\phi = - \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \frac{\delta \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi}{\delta \phi_{\gamma\delta\sigma'}(4,3)}. \quad (7.38)$$

Ces équations peuvent être réécrites grâce à l'équation de Dyson, à partir de laquelle nous obtenons une expression pour la dérivée fonctionnelle de la fonction de Green

$$\frac{\delta \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_\phi}{\delta \phi_{\gamma\delta\sigma'}(4,3)} = -\mathcal{G}_{\alpha\eta\sigma}(1,\bar{5})_\phi \frac{\delta \mathcal{G}_{\bar{\eta}\bar{\xi}\sigma}(\bar{5},\bar{6})_\phi^{-1}}{\delta \phi_{\gamma\delta\sigma'}(4,3)} \mathcal{G}_{\bar{\xi}\beta\sigma}(\bar{6},2)_\phi, \quad (7.39)$$

$$\frac{\delta \mathcal{G}_{\bar{\eta}\bar{\xi}\sigma}(\bar{5},\bar{6})_\phi^{-1}}{\delta \phi_{\gamma\delta\sigma'}(4,3)} = -\delta_{\bar{\eta}\gamma}\delta_{\bar{\xi}\delta}\delta(\bar{5}-4)\delta(\bar{6}-3)\delta_{\sigma\sigma'} - \frac{\delta \Sigma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\sigma}(\bar{5},\bar{6})_\phi}{\delta \mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\bar{\sigma}}(\bar{7},\bar{8})_\phi} \frac{\delta \mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\bar{\sigma}}(\bar{7},\bar{8})_\phi}{\delta \phi_{\gamma\delta\sigma'}(4,3)}. \quad (7.40)$$

En utilisant cette relation dans les équations 7.37 et 7.38, nous obtenons de nouvelles expressions pour les susceptibilités généralisées

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{\pm}(1,2;3,4)_{\phi} = \chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(0)}(1,2;3,4)_{\phi} \mp \frac{1}{2}\chi_{\alpha\beta\bar{\xi}\bar{\eta}}^{(0)}(1,2;\bar{6},\bar{5})_{\phi}\Gamma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\bar{\nu}\bar{\mu}}^{\pm}(\bar{5},\bar{6},\bar{8},\bar{7})_{\phi}\chi_{\bar{\mu}\bar{\nu}\delta\gamma}^{\pm}(\bar{7},\bar{8};3,4)_{\phi}, \quad (7.41)$$

où les vertex  $\Gamma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\bar{\nu}\bar{\mu}}^{\pm}(\bar{5},\bar{6},\bar{8},\bar{7})_{\phi}$  sont définis par l'équation

$$\Gamma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\bar{\nu}\bar{\mu}}^{\pm}(\bar{5},\bar{6},\bar{8},\bar{7})_{\phi} = \frac{\delta\Sigma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\downarrow}(\bar{5},\bar{6})_{\phi}}{\delta\mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\uparrow}(\bar{7},\bar{8})_{\phi}} \pm \frac{\delta\Sigma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\uparrow}(\bar{5},\bar{6})_{\phi}}{\delta\mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\uparrow}(\bar{7},\bar{8})_{\phi}}. \quad (7.42)$$

## 7.2.4 Application au modèle d'Emery

Dans le modèle d'Emery, l'interaction locale prend la forme

$$U_{\alpha\beta} = U_d\delta_{d\alpha}\delta_{d\beta}. \quad (7.43)$$

Utilisant cette forme pour l'interaction locale dans les équations 7.29 et 7.30 pour la self-energie, nous obtenons

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1,\bar{3})_{\phi}\mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3},2)_{\phi} &= -U_d\delta_{d\alpha}\delta_{d\bar{\gamma}} \left\langle T_{\tau}c_{\bar{\gamma}-\sigma}^{\dagger}(1^{+})c_{\bar{\gamma}-\sigma}(1)c_{\alpha\sigma}(1)c_{\beta\sigma}^{\dagger}(2) \right\rangle_{\phi}, \\ \Rightarrow \Sigma_{\alpha\beta}(1,2)_{\phi} &= -U_d\delta_{d\alpha} \left\langle T_{\tau}c_{\alpha-\sigma}^{\dagger}(1^{+})c_{\alpha-\sigma}(1)c_{\alpha\sigma}(1)c_{\bar{\gamma}\sigma}^{\dagger}(\bar{4}) \right\rangle_{\phi} \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{4},2)_{\phi}^{-1}, \end{aligned} \quad (7.44)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1,\bar{3})_{\phi}\Sigma_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3},2)_{\phi} &= -U_d\delta_{d\beta}\delta_{d\bar{\gamma}} \left\langle T_{\tau}c_{\bar{\gamma}-\sigma}^{\dagger}(2^{+})c_{\bar{\gamma}-\sigma}(2)c_{\alpha\sigma}(1)c_{\beta\sigma}^{\dagger}(2) \right\rangle_{\phi}, \\ \Rightarrow \Sigma_{\alpha\beta}(1,2)_{\phi} &= -U_d\delta_{d\beta}\mathcal{G}_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1,\bar{4})_{\phi}^{-1} \left\langle T_{\tau}c_{\alpha-\sigma}^{\dagger}(2^{+})c_{\alpha-\sigma}(2)c_{\alpha\sigma}(\bar{4})c_{\bar{\gamma}\sigma}^{\dagger}(2) \right\rangle_{\phi}. \end{aligned} \quad (7.45)$$

Comme les équations 7.44 et 7.45 doivent être satisfaites simultanément, notre premier résultat pour le modèle d'Emery est que le seul élément non-nul de la matrice de la self-énergie est celui qui correspond aux orbitales  $d$  :

$$\Sigma_{\alpha\beta\sigma}(1,2)_{\phi} \propto \delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha d}. \quad (7.46)$$

Les vertex introduits à la sous-section précédente prennent ainsi une forme simplifiée, soit

$$\begin{aligned} \Gamma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\bar{\nu}\bar{\mu}}^{\pm}(\bar{5},\bar{6},\bar{8},\bar{7})_{\phi} &= \frac{\delta\Sigma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\downarrow}(\bar{5},\bar{6})_{\phi}}{\delta\mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\uparrow}(\bar{7},\bar{8})_{\phi}} \pm \frac{\delta\Sigma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\uparrow}(\bar{5},\bar{6})_{\phi}}{\delta\mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\uparrow}(\bar{7},\bar{8})_{\phi}}, \\ &= \delta_{\bar{\eta}d}\delta_{\bar{\xi}d} \left( \frac{\delta\Sigma_{dd\downarrow}(\bar{5},\bar{6})_{\phi}}{\delta\mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\uparrow}(\bar{7},\bar{8})_{\phi}} \pm \frac{\delta\Sigma_{dd\uparrow}(\bar{5},\bar{6})_{\phi}}{\delta\mathcal{G}_{\bar{\mu}\bar{\nu}\uparrow}(\bar{7},\bar{8})_{\phi}} \right). \end{aligned} \quad (7.47)$$

### 7.2.5 Modèle à une bande effectif

Puisque seules les orbitales  $d$  sont corrélées dans le modèle d'Emery, il est possible de transposer ce problème en un modèle à une bande effectif. Nous écrivons d'abord l'équation de Dyson sous forme matricielle

$$\mathbf{G}(k)^{-1} = \mathbf{G}^{(0)}(k)^{-1} - \Sigma(k). \quad (7.48)$$

Nous utilisons la notation suivante pour définir les éléments des matrices

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{dd} & A_{dp_x} & A_{dp_y} \\ A_{p_x d} & A_{p_x p_x} & A_{p_x p_y} \\ A_{p_y d} & A_{p_y p_x} & A_{p_y p_y} \end{pmatrix}, \quad (7.49)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} A_d & \mathbf{A}_{dp} \\ \mathbf{A}_{pd} & \mathbf{A}_p \end{pmatrix}. \quad (7.50)$$

Suivant cette notation, les matrices de la fonction de Green sans interaction, de la self-énergie et de la fonction de Green avec interaction sont définies par

$$\mathbf{G}^{(0)}(k)^{-1} = (ik_n + \mu)\mathbf{1} - \mathbf{h}^{(0)}(\mathbf{k}), \quad (7.51)$$

$$\Sigma(k) = \begin{pmatrix} \Sigma_d(k) & \Sigma_{dp}(k) \\ \Sigma_{pd}(k) & \Sigma_p(k) \end{pmatrix}, \quad (7.52)$$

$$\mathbf{G}(k)^{-1} = \begin{pmatrix} ik_n + \mu - h_d^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma_d(k) & -\mathbf{h}_{dp}^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma_{dp}(k), \\ -\mathbf{h}_{pd}^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma_{pd}(k) & ik_n + \mu - \mathbf{h}_p^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma_p(k) \end{pmatrix}. \quad (7.53)$$

Afin de reformuler le modèle d'Emery comme un problème à une bande effectif, nous utilisons l'identité

$$\mathbf{G}(k)^{-1} \mathbf{G}(k) = \mathbf{1}. \quad (7.54)$$

Nous utilisons également le fait que la self-énergie n'a qu'un seul élément non-nul, soit

$$\Sigma(k) = \begin{pmatrix} \Sigma_d(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.55)$$



Le produit matriciel  $\mathbf{G}(k)^{-1}\mathbf{G}(k)$  mène à un système d'équations à partir duquel nous pouvons obtenir une expression pour  $\mathcal{G}_d$ . Plus précisément, nous utilisons les équations

$$\left(ik_n + \mu - h_d^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma_d(k)\right) \mathcal{G}_d(k) - \mathbf{h}_{dp}^{(0)}(\mathbf{k}) \mathbf{G}_{pd}(k) = 1, \quad (7.56)$$

$$-\mathbf{h}_{pd}^{(0)}(\mathbf{k}) \mathcal{G}_d(k) + \left(ik_n + \mu - \mathbf{h}_p^{(0)}(\mathbf{k})\right) \mathbf{G}_{pd}(k) = 0, \quad (7.57)$$

où  $\mathbf{h}_{dp}^{(0)}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}_{pd}^{(0)\dagger}(\mathbf{k})$ . À partir de ces deux équations, nous obtenons

$$\mathcal{G}_d(k) = \left[ ik_n + \mu - h_d^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma_d(k) - \mathbf{h}_{dp}^{(0)}(\mathbf{k}) \left( ik_n + \mu - \mathbf{h}_p^{(0)}(\mathbf{k}) \right)^{-1} \mathbf{h}_{pd}^{(0)}(\mathbf{k}) \right]^{-1}. \quad (7.58)$$

Ainsi, la fonction de Green pour les orbitales  $d$  contient la self-énergie des orbitales  $d$   $\Sigma_d$  ainsi qu'une fonction d'hybridation entre les orbitales  $p$  et  $d$ ,  $\Delta$ , que nous définissons par

$$\Delta(\mathbf{k}, ik_n) \equiv -\mathbf{h}_{dp}^{(0)}(\mathbf{k}) \left( ik_n + \mu - \mathbf{h}_p^{(0)}(\mathbf{k}) \right)^{-1} \mathbf{h}_{pd}^{(0)}(\mathbf{k}). \quad (7.59)$$

La forme de la fonction de Green pour les orbitales  $d$  est analogue à la fonction de Green qui aurait été obtenue dans un modèle à une bande, si ce n'est de la contribution des orbitales  $p$  qui se retrouve dans la fonction d'hybridation. Il doit ainsi être possible de résoudre le modèle d'Emery par les méthodes usuelles du modèle de Hubbard à une bande, qui doivent tout de même être adaptées via l'inclusion de la fonction d'hybridation.

## 7.3 TPSC pour le modèle d'Emery

### 7.3.1 Premier niveau d'approximation pour la self-énergie

Suivant la formulation originale de l'approche TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande, nous rappelons d'abord la forme de la self-énergie obtenue pour le modèle d'Emery. Nous considérons l'équation obtenue à partir de la dérivée par rapport au temps imaginaire  $\tau_1$  :

$$\Sigma_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1, \bar{3})_{\phi} \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3}, 2)_{\phi} = -U_d \delta_{d\alpha} \left\langle T_{\tau} c_{\alpha-\sigma}^{\dagger}(1^{+}) c_{\alpha-\sigma}(1) c_{\alpha\sigma}(1) c_{\beta\sigma}^{\dagger}(2) \right\rangle_{\phi}. \quad (7.60)$$

Le premier niveau d'approximation, en TPSC, est obtenu en postulant un découplage de type Hartree-Fock dans l'équation précédente, soit

$$\Sigma_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}^{(1)}(1, \bar{3})_{\phi} \mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}^{(1)}(\bar{3}, 2 \neq 1)_{\phi} = A_{\phi}^{\alpha\beta} \delta_{d\alpha} \mathcal{G}_{\alpha\alpha-\sigma}^{(1)}(1, 1^{+})_{\phi} \mathcal{G}_{\alpha\beta\sigma}^{(1)}(1, 2)_{\phi}, \quad (7.61)$$

où l'exposant (1) dénote le premier niveau d'approximation. En multipliant de chaque côté de l'équation par une fonction de Green inverse, nous obtenons

$$\Sigma_{\alpha\beta\sigma}^{(1)}(1,2)_\phi = A_\phi^{\alpha\beta} \delta_{d\alpha} \mathcal{G}_{\alpha\alpha-\sigma}^{(1)}(1,1^+)_\phi \delta_{\alpha\beta} \delta(1-2). \quad (7.62)$$

Nous pouvons maintenant obtenir une équation pour le vertex généralisé  $\Gamma^-$  au premier niveau d'approximation, en posant que la dérivée fonctionnelle de  $A_\phi^{\alpha\beta}$  par rapport à la fonction de Green est nulle. Nous obtenons

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^-(1,2,4,3)_\phi = \frac{\delta\Sigma_{\alpha\beta\sigma}^{(1)}(1,2)_\phi}{\delta\mathcal{G}_{\delta\gamma-\sigma}^{(1)}(3,4)_\phi} - \frac{\delta\Sigma_{\alpha\beta\sigma}^{(1)}(1,2)_\phi}{\delta\mathcal{G}_{\delta\gamma\sigma}^{(1)}(3,4)_\phi}, \quad (7.63)$$

$$= A_\phi^{\alpha\beta} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\alpha\gamma} \delta(3-1) \delta(4-1) \delta_{\alpha\beta} \delta(1-2) \delta_{d\alpha}. \quad (7.64)$$

Nous constatons ainsi que le vertex est local, et que le seul élément non-nul est celui pour lequel tous les indices d'orbitales sont  $d$ . Nous définissons le vertex de spin en posant le champ source égal à 0 dans l'équation précédente, soit

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^{sp}(1,2,4,3) = U_d^{sp} \delta_{\alpha d} \delta_{\beta d} \delta_{\delta d} \delta_{\gamma d} \delta(3-1) \delta(4-1) \delta(1-2). \quad (7.65)$$

Comme dans le cas de l'approche TPSC pour le modèle à une bande, nous obtenons la valeur du vertex de spin en nous assurant que la règle de somme pour la susceptibilité de spin est satisfaite.

Nous calculons ainsi les susceptibilités  $\chi^\pm$  obtenues à la section 7.2.3 avec le premier niveau d'approximation de la fonction de Green, de la self-énergie et des vertex. Nous venons de déterminer que, dans l'approche TPSC, le vertex de spin est local. Nous étendons cette propriété au vertex de charge, notant qu'il s'agit d'un postulat plutôt que d'une dérivation formelle,

$$\Gamma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\bar{\nu}\bar{\mu}}^\pm(\bar{5},\bar{6},\bar{8},\bar{7}) = \Gamma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\bar{\nu}\bar{\mu}}^{ch,sp} \delta(\bar{5}-\bar{6}) \delta(\bar{5}-\bar{7}) \delta(\bar{5}-\bar{8}). \quad (7.66)$$

Dans ce cas, l'équation 7.41 pour les susceptibilités généralisées devient

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^\pm(1,2;3,4) = \chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(1)}(1,2;3,4) \mp \frac{1}{2} \chi_{\alpha\beta\bar{\xi}\bar{\eta}}^{(1)}(1,2;\bar{5},\bar{5}^+) \Gamma_{\bar{\eta}\bar{\xi}\bar{\nu}\bar{\mu}}^{ch,sp} \chi_{\bar{\mu}\bar{\nu}\delta\gamma}^\pm(\bar{5},\bar{5}^+;3,4). \quad (7.67)$$

Dans l'équation précédente, et dans ce qui suit, nous utilisons la notation  $\chi^{(1)}$  pour spécifier que les fonctions de Green utilisées dans le calcul de cette susceptibilité sans vertex, provenant du produit direct de deux fonctions de Green, sont évaluées au premier niveau d'approximation de l'approche TPSC :

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(1)}(1,2;3,4) \equiv -2\mathcal{G}_{\alpha\gamma\sigma}^{(1)}(1,4)\mathcal{G}_{\delta\beta\sigma}^{(1)}(3,2). \quad (7.68)$$

Les susceptibilités de spin et de charges sont obtenues en prenant les limites  $2 \rightarrow 1^+$  et  $4 \rightarrow 3^+$

dans l'équation 7.67. De plus, nous simplifions l'écriture avec les définitions suivantes :

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{\pm}(1, 1^+; 2, 2^+) \equiv \chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{ch,sp}(1, 2), \quad (7.69)$$

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(1)}(1, 1^+; 2, 2^+) \equiv \chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(1)}(1, 2). \quad (7.70)$$

Par conséquent, les susceptibilités de spin et de charge sont

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{ch,sp}(1, 2) = \chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(1)}(1, 2) \mp \frac{1}{2} \chi_{\alpha\beta\zeta\bar{\eta}}^{(1)}(1, \bar{3}) \Gamma_{\bar{\eta}\zeta\bar{\nu}\bar{\mu}}^{ch,sp} \chi_{\bar{\mu}\bar{\nu}\delta\gamma}^{ch,sp}(\bar{3}, 2). \quad (7.71)$$

Nous pouvons effectuer les transformées de Fourier vers l'espace des quantités de mouvement et des fréquences de Matsubara. Nous obtenons, utilisant la notation  $q \equiv (\mathbf{q}, iq_n)$ ,

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{ch,sp}(q) = \chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(1)}(q) \mp \frac{1}{2} \chi_{\alpha\beta\zeta\bar{\eta}}^{(1)}(q) \Gamma_{\bar{\eta}\zeta\bar{\nu}\bar{\mu}}^{ch,sp} \chi_{\bar{\mu}\bar{\nu}\delta\gamma}^{ch,sp}(q). \quad (7.72)$$

Enfin, nous avons obtenu que le seul élément non-nul du vertex de spin pour le modèle d'Emery dans l'approche TPSC est celui des orbitales  $d$ . Nous posons une forme identique pour le vertex de charge, ce qui nous permet d'obtenir

$$\chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{ch,sp}(q) = \chi_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(1)}(q) \mp \frac{1}{2} \chi_{\alpha\beta dd}^{(1)}(q) U_d^{ch,sp} \chi_{dd\delta\gamma}^{ch,sp}(q). \quad (7.73)$$

Les susceptibilités de charge et de spin pour les orbitales  $d$  sont ainsi complètement découplées des autres éléments des matrices, soit

$$\chi_d^{ch,sp}(q) = \chi_d^{(1)}(q) \mp \frac{1}{2} \chi_d^{(1)}(q) U_d^{ch,sp} \chi_d^{ch,sp}(q), \quad (7.74)$$

$$\Rightarrow \chi_d^{ch,sp}(q) = \frac{\chi_d^{(1)}(q)}{1 \pm \frac{1}{2} U_d^{ch,sp} \chi_d^{(1)}(q)}. \quad (7.75)$$

À partir de cette dernière équation, nous pouvons écrire les règles de somme pour les susceptibilités de spin et de charge locales

$$\frac{T}{N} \sum_q \frac{\chi_d^{(1)}(q)}{1 - \frac{U_d^{sp}}{2} \chi_d^{(1)}(q)} = \langle n_d \rangle - 2 \langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle, \quad (7.76)$$

$$\frac{T}{N} \sum_q \frac{\chi_d^{(1)}(q)}{1 + \frac{U_d^{ch}}{2} \chi_d^{(1)}(q)} = \langle n_d \rangle + 2 \langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle - \langle n_d \rangle^2. \quad (7.77)$$

Maintenant que nous avons obtenu les équations des règles de somme pour les susceptibilités locales, nous pouvons les utiliser afin de calculer les valeurs des vertex de spin et de charge. La

première option est d'utiliser l'ansatz de la TPSC original, qui est de poser que le découplage menant au premier niveau d'approximation pour la self-énergie (équation 7.61) doit satisfaire le résultat exact à temps égal ( $\tau_2 = \tau_1^+$ ). Ce résultat exact est

$$\Sigma_{\alpha\bar{\gamma}\sigma}(1, \bar{3})\mathcal{G}_{\bar{\gamma}\beta\sigma}(\bar{3}, 1^+) = U_d\delta_{d\alpha} \langle T_{\tau}n_{\alpha\alpha-\sigma}(1)n_{\alpha\beta\sigma}(1) \rangle. \quad (7.78)$$

Afin que cette équation soit satisfaite, le vertex de spin doit prendre la forme

$$U_d^{sp} = U_d \frac{\langle n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} \rangle}{\langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle}. \quad (7.79)$$

Il est alors possible d'obtenir une solution pour le vertex de spin ainsi que pour la double occupation de façon auto-cohérente, en résolvant de façon simultanée l'équation précédente et la règle de somme pour la susceptibilité de spin.

La seconde option est d'utiliser l'approche TPSC+DMFT introduite dans la référence [5]. Dans cette approche, les valeurs des vertex de spin et de charge sont toujours obtenues en satisfaisant les règles de somme. Toutefois, plutôt que d'utiliser l'ansatz TPSC reliant la double occupation à la valeur du vertex de spin, la double occupation utilisée pour le calcul des règles de somme est obtenue par un calcul DMFT. Cette méthode peut également être utilisée dans le cas du modèle d'Emery puisque, tel que mentionné auparavant, ce modèle peut être résolu de façon effective comme un problème à une bande par différentes méthodes, incluant la DMFT. Il suffit alors d'inclure la fonction d'hybridation 7.59 dans la fonction de Green du réseau entrant dans la relation d'auto-cohérence de la DMFT à un site.

### 7.3.2 Problématiques : potentiel chimique et densités

Puisque nous avons obtenu un modèle à une bande effectif, il est tentant de suivre le formalisme de la TPSC développé pour le modèle de Hubbard à une bande. Les étapes menant à la résolution du premier niveau d'approximation sont :

- Calculer la fonction de Green sans interaction à partir d'une densité choisie
- Calculer la fonction de corrélation sans interaction  $\chi^{(1)}$
- Calculer le vertex de spin  $U_d^{sp}$  à partir de la règle de somme pour la susceptibilité de spin et de l'ansatz TPSC ou de la double occupation DMFT
- Calculer le vertex de charge  $U_d^{ch}$  à partir de la règle de somme pour la susceptibilité de charge et de l'ansatz TPSC ou de la double occupation DMFT.

La première difficulté que nous rencontrons en tentant de suivre cette étape concerne les règles

de somme, qui prennent les formes

$$\frac{T}{N} \sum_q \frac{\chi_d^{(1)}(q)}{1 - \frac{U_d^{sp}}{2} \chi_d^{(1)}(q)} = \langle n_d \rangle - 2\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle, \quad (7.80)$$

$$\frac{T}{N} \sum_q \frac{\chi_d^{(1)}(q)}{1 + \frac{U_d^{ch}}{2} \chi_d^{(1)}(q)} = \langle n_d \rangle + 2\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle - \langle n_d \rangle^2. \quad (7.81)$$

Dans le cas du modèle à une bande, nous prenons la densité comme un paramètre d'entrée et calculons le potentiel chimique de sorte que la fonction de Green au premier niveau d'approximation retourne la densité voulue. La self-énergie au premier niveau d'approximation étant une constante, elle peut être absorbée dans le potentiel chimique de cette fonction de Green. Les extensions de la TPSC au cas multi-orbital ont conservé cette méthodologie, calculant les règles de somme avec des densités orbitales  $\langle n_\alpha \rangle_0$  qui sont obtenues à partir d'une densité totale  $n$  choisie comme paramètre. Ainsi, dans ces formulations, la densité *totale* est maintenue constante et est utilisée pour calculer le potentiel chimique d'une fonction de Green non-interagissante  $\mathcal{G}^{(0)}$ . C'est à partir de ce potentiel chimique que les densités orbitales sont déduites. Ensuite, la fonction de Green non-interagissante  $\mathcal{G}^{(0)}$  est utilisée pour le calcul des susceptibilités. Cette approche est valide dans le cas spécifique où toutes les orbitales du problème sont dégénérées. Toutefois, cette approximation n'est pas valide de façon générale en raison de deux facteurs reliés :

**1 - Premier niveau d'approximation vs problème sans interaction** Dans l'approche TPSC pour le modèle de Hubbard à une bande, la self-énergie au premier niveau d'approximation est une constante qui est normalement absorbée dans la définition du potentiel chimique. Dans la section précédente, nous avons vu que, pour le modèle d'Emery (et pour les modèles multi-orbitaux en général), la self-énergie  $\Sigma_{\alpha\beta}^{(1)}$  est une constante dans le sens où elle ne dépend ni de la fréquence ni de la quantité de mouvement. Toutefois, cette self-énergie dépend des indices d'orbitales. La façon habituelle pour la TPSC de calculer les susceptibilités avec des fonctions de Green sans interaction qui contiennent un potentiel chimique ajusté ne devrait ainsi plus être valide, à l'exception du cas des orbitales dégénérées. Ces considérations sont traduites mathématiquement par

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n)^{-1} = ik_n + \mu^{(1)} - h_{\alpha\alpha}^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma_{\alpha\alpha}^{(1)}, \quad (7.82)$$

$$\mathcal{G}_{\alpha\alpha}^{(0)}(\mathbf{k}, ik_n)^{-1} = ik_n + \mu^{(0)} - h_{\alpha\alpha}^{(0)}(\mathbf{k}), \quad (7.83)$$

$$\neq \mathcal{G}_{\alpha\alpha}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n)^{-1}. \quad (7.84)$$

Ainsi, formuler la TPSC pour un modèle multi-orbital à partir d'une densité totale et d'un potentiel chimique unique au niveau "zéro" correspond à poser une self-énergie au premier niveau d'approximation identique pour toutes les orbitales :  $\Sigma_{\alpha\alpha}^{(1)} = C \forall \alpha$ . Cette approximation n'est certainement

pas valide pour le modèle d'Emery, où la self-énergie est non-nulle pour les orbitales  $d$ , et nulle pour les orbitales  $p$ .

**2 - Densités avec ou sans interaction** Les densités qui apparaissent dans les règles de somme pour les susceptibilités de charge et de spin devraient être calculées en présence d'interactions. Dans le cas du modèle à une bande, encore une fois, il n'y a qu'une seule densité et elle est maintenue constante tout au long du calcul :  $\langle n \rangle_0 = \langle n \rangle = n$ . Une propriété similaire peut être attendue des problèmes dans lesquels toutes les orbitales sont dégénérées, soit  $\langle n_\alpha \rangle_0 = \langle n_\alpha \rangle$ . Ce n'est toutefois pas le cas du modèle d'Emery, tel que montré par des calculs de la théorie du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) pour le modèle d'Emery [218]. La figure 2 (a) de la référence [218] montre les densités des orbitales  $p$  et  $d$  obtenues avec et sans interaction. Les densités sont modifiées de façon significative par la présence d'interactions. Par exemple, pour une densité totale  $n = 5$ , la densité orbitale  $\langle n_d \rangle$  avec interactions est de l'ordre de 1.9, alors qu'elle est de 1.2 sans interaction.

Ainsi, la méthode suggérée au début de cette section ne semble pas adaptée pour effectuer un calcul TPSC pour le modèle d'Emery. Nous présentons à la section suivante l'alternative que nous avons développée afin de résoudre les problèmes mentionnés ici.

### 7.3.3 Approche TPSC+DMFT

Afin de résoudre les problèmes soulevés à la section précédente concernant le potentiel chimique, la self-énergie au premier niveau d'interaction et le choix de densité, nous utilisons la méthode TPSC+DMFT développée par Nicolas Martin [5] pour le modèle à une bande. Nous étendons cette approche en utilisant comme paramètres d'entrée du calcul TPSC trois quantités obtenues d'un calcul DMFT :

- Les densités des orbitales  $p$  et  $d$ ,  $\langle n_p \rangle_{\text{DMFT}}$  et  $\langle n_d \rangle_{\text{DMFT}}$ ,
- La double occupation des orbitales  $d$ ,  $\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle_{\text{DMFT}}$ .

Avec les densités  $\langle n_p \rangle_{\text{DMFT}}$  et  $\langle n_d \rangle_{\text{DMFT}}$  provenant de la DMFT, qui sont calculées *avec interactions*, nous pouvons fixer le potentiel chimique et la self-énergie au premier niveau d'approximation dans un calcul TPSC. Il suffit de résoudre les deux équations suivantes de façon simultanée

$$2\mathcal{G}_{d\sigma}^{(1)}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0^-) = \langle n_d \rangle_{\text{DMFT}} = \frac{2T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \mathcal{G}_{d\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) e^{-ik_n 0^-}, \quad (7.85)$$

$$2\mathcal{G}_{p_x\sigma}^{(1)}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0^-) = \langle n_p \rangle_{\text{DMFT}} = \frac{2T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \mathcal{G}_{p_x\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) e^{-ik_n 0^-}. \quad (7.86)$$

Les fonctions de Green au premier niveau d'approximation TPSC sont évaluées avec les équations suivantes

$$\mathcal{G}_{d\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) = [\mathbf{G}^{(1)}]_{dd}, \quad (7.87)$$

$$\mathcal{G}_{p_x\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) = [\mathbf{G}^{(1)}]_{p_x p_x}, \quad (7.88)$$

$$\mathbf{G}^{(1)} = (ik_n + \mu^{(1)})\mathbb{1} - \mathbf{h}_0(\mathbf{k}) - \Sigma^{(1)}, \quad (7.89)$$

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{(1)} = \Sigma_d^{(1)} \delta_{\alpha d} \delta_{\beta d}. \quad (7.90)$$

Les deux inconnues à déterminer sont ainsi le potentiel chimique au premier niveau d'approximation  $\mu^{(1)}$  et la self-énergie au premier niveau d'approximation  $\Sigma_d^{(1)}$  des orbitales  $d$ , qui est une constante.

Les densités et la double occupation provenant du calcul DMFT peuvent ensuite être utilisées pour calculer les règles de somme, et ainsi obtenir les vertex de spin et de charge. Notons que la référence [127] propose une approche TPSC+DMFT pour un modèle multi-orbital. Cette référence ne discute toutefois pas la nécessité de réaliser les calculs avec les densités avec interaction, et aborde plutôt des modèles avec des orbitales dégénérées ou quasi-dégénérées.

Enfin, la self-énergie obtenue au second niveau d'approximation pour les orbitales  $d$  peut être calculée par l'équation 2.43 puisque, à ce stade, le problème est formulé sous la forme d'un modèle à une bande effectif. Pour les orbitales  $p$ , la self-énergie est toujours nulle. Les self-énergies des orbitales  $d$  et  $p$  au deuxième niveau d'approximation sont ainsi

$$\Sigma_{d\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = U_d \frac{\langle n_d \rangle}{2} + \frac{U}{8} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \left( 3U_d^{sp} \chi_d^{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_d^{ch} \chi_d^{ch}(\mathbf{q}, iq_n) \right) \mathcal{G}_{d\sigma}^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n), \quad (7.91)$$

$$\Sigma_{p_x\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \Sigma_{p_y\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = 0. \quad (7.92)$$

## 7.4 Résultats

Dans cette section, nous appliquons la méthode détaillée plus haut à un modèle spécifique. Notre but ici n'est pas de produire de nouveaux résultats permettant d'approfondir la compréhension du modèle d'Emery, mais plutôt de comparer les résultats obtenus par les approches TPSC et TPSC+DMFT pour ce modèle. Nous considérons le modèle d'Emery introduit à la section 7.1.1. Nous prenons le paramètre de saut  $t_{pp} = 1$  en tant qu'unité d'énergie. Les autres paramètres de sauts sont  $t_{pd} = 2.15$ ,  $t_{pp'} = 0.2$ , et les énergies de site sont  $\epsilon_d = -5.92$  et  $\epsilon_p = 0$ . Ces paramètres sont inspirés des paramètres de sauts obtenus par des calculs de théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour le cuprate dopé en électrons  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (NCCO) [204]. La valeur du paramètre  $t_{pp'}$  est inspirée de travaux ultérieurs sur les cuprates dopés en trous [217] et NCCO [105]. Dans ce qui suit, nous fixons la valeur de l'interaction de Hubbard sur les orbitales  $d$  à  $U_d = 10$ , ce qui est plus faible que la valeur suggérée dans la référence [204] ( $U_d \simeq 14.82$ ). Nous choisissons cette valeur afin de nous éloigner de la transition de Mott qui se produit à une valeur plus forte de l'interaction. Tous les calculs présentés ici sont réalisés à la température  $T = 0.1$ .

Nous commençons cette section par une discussion de la différence entre les densités orbitales calculées avec et sans interactions dans la sous-section 7.4.1. Ensuite, nous étudions la double occupation et le vertex irréductible de spin  $U_d^{sp}$  à la sous-section 7.4.2, et la self-énergie à la sous-section 7.4.3. Dans notre discussion de la self-énergie, nous incluons un commentaire sur une étape additionnelle de l'approche TPSC+DMFT qui est de substituer la partie locale de la self-énergie obtenue par la TPSC par la self-énergie locale obtenue par la DMFT.

Les calculs de DMFT sont réalisés avec la bibliothèque TRIQS [232, 233], et avec le solveur d'impureté Monte Carlo quantique en temps continu CT-HYB [234, 235]. Les calculs TPSC sont réalisés avec la bibliothèque sparse-ir [236–238].

### 7.4.1 Densités avec et sans interactions

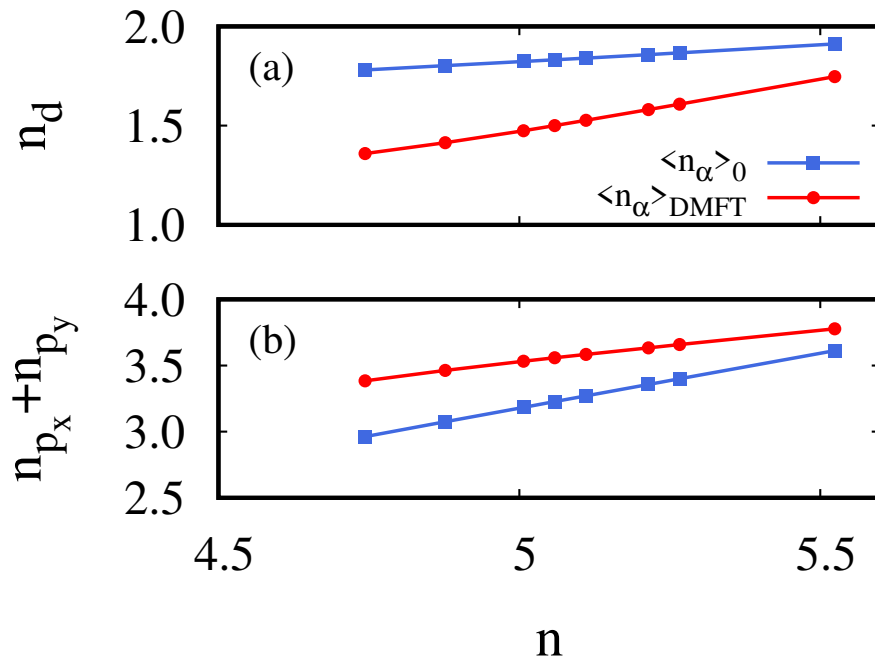
Nous calculons d'abord les densités avec ( $U_d = 10$ ) et sans ( $U_d = 0$ ) interactions avec la DMFT sur un site. Pour les calculs DMFT, nous choisissons un potentiel chimique et nous obtenons les densités orbitales correspondantes à la fin du calcul. Nous prenons ensuite la densité totale associée à ces densités orbitales, et nous calculons les densités orbitales du problème sans interaction correspondant.

Nous montrons nos résultats à la figure 7.2, où nous illustrons la densité sur les orbitales  $d$  en (a) et celles sur les orbitales  $p_x$  et  $p_y$  en (b) en fonction de la densité totale  $n$ . Nous montrons que la densité sur les orbitales  $d$  décroît lorsque l'interaction  $U_d$  est introduite, alors que la densité sur les orbitales  $p$  augmente. Ce changement est dû à l'asymétrie des énergies de site  $\epsilon_d \neq \epsilon_p$ , ainsi qu'à l'interaction électron-électron  $U_d$ . Sans cette interaction, la densité sur une orbitale  $p$  est plus petite que sur une orbitale  $d$  puisque l'énergie de site de ces dernières est plus petite que celle des orbitales  $p$ . Lorsque l'interaction  $U_d$  est prise en compte, la double occupation sur les orbitales  $d$  décroît, ce qui implique une diminution de la densité sur ces orbitales. Nous pouvons prendre l'exemple spécifique du cas non-dopé avec une densité totale  $n = 5.0069 \simeq 5$ . Dans le cas sans interaction, les densités orbitales sont  $\langle n_d \rangle_0 \simeq 1.82$  et  $\langle n_{p_x} + n_{p_y} \rangle_0 \simeq 3.18$ . Avec interaction, les densités orbitales sont plutôt  $\langle n_d \rangle_{\text{DMFT}} \simeq 1.47$  et  $\langle n_{p_x} + n_{p_y} \rangle_{\text{DMFT}} \simeq 3.53$ . Il devient évident que de réaliser un calcul TPSC basé sur la densité sans interaction  $\langle n_d \rangle_0 \simeq 1.82$  devrait produire des résultats incorrects et drastiquement différents de ceux obtenus par un calcul TPSC basé sur la densité avec interaction  $\langle n_d \rangle_{\text{DMFT}} \simeq 1.47$ .

### 7.4.2 Double occupation et vertex de spin

Nous calculons maintenant la double occupation sur les orbitales  $d$ , notée  $D = \langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle$ . Tel que mentionné dans la section 7.3.1, la double occupation peut être obtenue soit par l'ansatz TPSC,





**FIGURE 7.2** Densités (a) sur les orbitales  $d$   $\langle n_d \rangle$  et (b) sur les orbitales  $p$   $\langle n_{p_x} + n_{p_y} \rangle$  en fonction de la densité totale  $n$ . Les densités orbitales sont calculées à partir du hamiltonien sans interaction (carrés bleus) ou par un calcul DMFT avec le hamiltonien interagissant (cercles rouges). La densité sur l'orbitale  $d$  décroît lorsque les interactions sont présentes, tandis que la densité sur l'orbitale  $p$  augmente. Les paramètres de calcul sont définis au début de la section 7.4. Cette figure a été incluse dans la référence [4] après le dépôt initial de cette thèse.

|     | Type de calcul                                     | Notation                            | Couleur dans les graphiques |
|-----|----------------------------------------------------|-------------------------------------|-----------------------------|
| (1) | Densité sans interaction et ansatz TPSC            | $\langle n_d \rangle_0$             | Bleu                        |
| (2) | Densité avec interaction et ansatz TPSC            | $\langle n_d \rangle_{\text{DMFT}}$ | Rouge                       |
| (3) | Densité avec interaction et double occupation DMFT | $D_{\text{DMFT}}$                   | Vert                        |

**TABLEAU 7.2** Types de calculs TPSC pour le modèle d'Emery.

ou alors peut être calculée par une autre méthode, comme la DMFT. Ainsi, nous faisons les calculs TPSC de trois façons différentes : (1) par la densité sans interaction  $\langle n_d \rangle_0$  et l'ansatz TPSC, (2) par la densité avec interaction obtenue par DMFT  $\langle n_d \rangle_{\text{DMFT}}$  et l'ansatz TPSC, et (3) par la densité avec interaction et la double occupation obtenues par la DMFT, que nous noterons  $D_{\text{DMFT}}$ . Les trois types de calculs sont résumés au tableau 7.2 pour référence future.

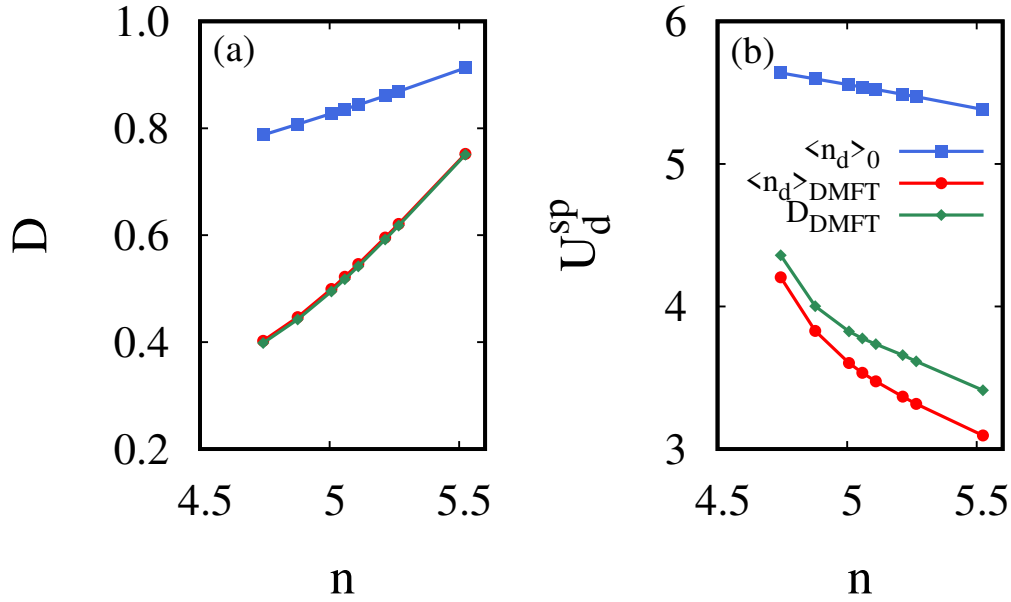
À la figure 7.3 (a), nous montrons la double occupation obtenue par les trois types de calculs mentionnés ci-haut en fonction de la densité totale  $n$ . La double occupation obtenue par la densité sans interaction  $\langle n_d \rangle_0$  est beaucoup plus élevée que celles obtenues par la densité interagissante  $\langle n_d \rangle_{\text{DMFT}}$ . Ce résultat n'est pas surprenant, considérant que la densité sur les orbitales  $d$  est plus élevée sans interaction qu'avec interaction. Nous notons que la double occupation obtenue par l'ansatz TPSC et la densité interagissante est très similaire à celle que l'on obtient par la DMFT,  $D_{\text{DMFT}}$ .

Nous nous intéressons maintenant au vertex irréductible de spin  $U_d^{sp}$  obtenu par les trois types de calculs. Nous montrons nos résultats à la figure 7.3 (b). Malgré les valeurs très similaires de la double occupation obtenue par la densité avec interaction de la DMFT avec l'ansatz TPSC et de la double occupation obtenue par la DMFT, nous observons que les valeurs résultantes de  $U_d^{sp}$  sont distinctes. La valeur de  $U_d^{sp}$  obtenue par la densité avec interaction et l'ansatz TPSC est systématiquement inférieure à la valeur obtenue par la densité avec interaction et la double occupation de la TPSC, bien que les résultats des deux méthodes suivent la même tendance qualitative. Encore une fois, les résultats obtenus par la densité sans interaction sont drastiquement différents des autres.

Ainsi, dans le modèle que nous considérons ici, l'impact d'utiliser la densité sans interaction plutôt que la densité avec interaction dans le calcul de TPSC est plus grand que celui dû à l'utilisation de l'ansatz TPSC ou de la double occupation de la DMFT.

### 7.4.3 Self-Énergie

Dans cette section, nous calculons la self-énergie au second niveau d'approximation de la TPSC à partir de l'équation 2.43. Nous présentons d'abord l'impact de l'utilisation de la densité avec ou sans interaction. Ensuite, nous étudions l'anisotropie de la self-énergie sur la surface de Fermi.



**FIGURE 7.3** Effet de la densité orbitale sur (a) la double occupation et (b) le vertex irréductible de spin. Pour les carrés bleus, le calcul TPSC est fait à partir de la densité sans interaction. Pour les cercles rouges, il est fait avec la densité avec interaction de la DMFT et l'ansatz TPSC. Pour les losanges verts, il est fait avec la densité avec interaction et la double occupation de la DMFT. Les paramètres de calcul sont définis au début de la section 7.4. Cette figure a été incluse dans la référence [4] après le dépôt initial de cette thèse.

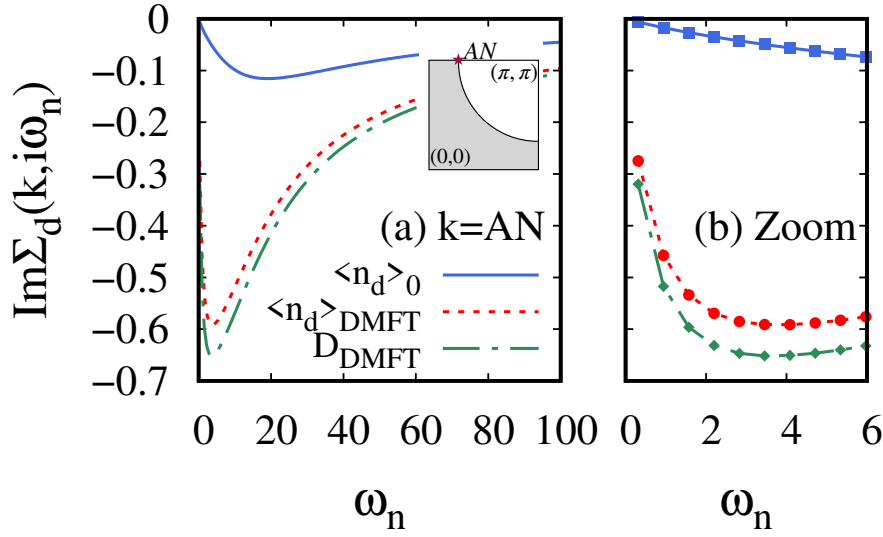
Enfin, nous considérons une étape additionnelle à l'approche TPSC+DMFT, soit la substitution de la self-énergie locale de la TPSC par celle de la DMFT.

### Impact de la densité avec ou sans interaction

Comme nous l'avons fait pour le calcul de la double occupation et du vertex irréductible de spin, nous débutons notre discussion de la self-énergie en comparant les résultats obtenus par les trois types de calculs résumés au tableau 7.2. Afin d'illustrer l'impact du type de calcul sur la self-énergie, nous considérons un cas spécifique, soit celui de la densité totale  $n = 5.0069$ . Nous étudions la self-énergie calculée au point antinodal sur la surface de Fermi en fonction des fréquences de Matsubara. Le point antinodal est représenté schématiquement dans l'encart de la figure 7.4 (a) par une étoile rose.

Comme c'était le cas pour le calcul de la double occupation et du vertex de spin, le choix de la densité d'entrée, soit avec ou sans interaction, a l'effet le plus important sur la self-énergie. Qualitativement, les résultats obtenus par les deux types de calculs avec la densité avec interaction, soit avec l'ansatz TPSC et avec la double occupation de la DMFT, ont un comportement analogue.

Nous pouvons étudier la différence quantitative entre les trois méthodes de calcul par le calcul du poids de quasiparticule défini par  $Z_k = \left(1 - \frac{\partial \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0}\right)^{-1}$ . Nous utilisons ici une méthode



**FIGURE 7.4** Effet du type de calcul TPSC sur la self-énergie, illustré ici pour le vecteur d’onde antinodal. La figure (a) montre la dépendance en fréquences de Matsubara de la self-énergie, et la figure (b) montre un zoom sur les premières fréquences de Matsubara. Ces résultats sont obtenus pour une densité totale  $n = 5.0069$ . En bleu, le calcul TPSC est réalisé avec les densités orbitales sans interaction. En rouge, il est réalisé avec les densités orbitales avec interaction obtenues par la DMFT. En vert, le calcul TPSC est fait avec les densités avec interaction et la double occupation de la DMFT. Les paramètres de calcul sont définis au début de la section 7.4. Cette figure a été incluse dans la référence [4] après le dépôt initial de cette thèse.

qui, bien que moins robuste que l’approche détaillée au chapitre 5, permet tout de même d’obtenir une évaluation approximative du poids de quasiparticule. Nous obtenons ces valeurs par un lissage polynomial de degré 2 de la self-énergie sur les trois premières fréquences de Matsubara

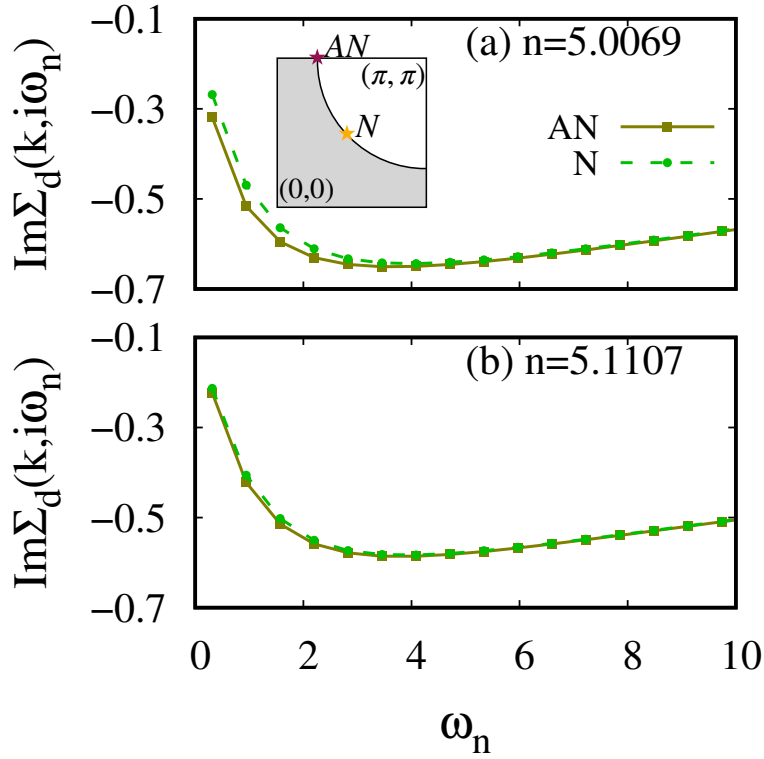
$$\text{Im}\Sigma_d(\mathbf{k}, i\omega_n) \simeq \alpha_0(T) + \alpha_1\omega_n + \alpha_2\omega_n^2, \quad (7.93)$$

$$Z_{\mathbf{k}} \simeq \frac{1}{1 - \alpha_1}. \quad (7.94)$$

Cette approximation est justifiée lorsque la self-énergie a une forme liquide de Fermi à basse fréquence. Nous obtenons les poids de quasiparticule  $Z_{AN} \simeq 0.98$  pour le calcul avec la densité sans interaction,  $Z_{AN} \simeq 0.68$  pour le calcul avec la densité avec interaction et l’ansatz TPSC, et  $Z_{AN} \simeq 0.66$  pour le calcul avec la densité avec interaction et la double occupation de la DMFT.

### Anisotropie : noeud vs antinoeud

La self-énergie obtenue par la TPSC dépend du vecteur d’onde, contrairement à la self-énergie purement locale de la DMFT. L’approche TPSC peut ainsi être utilisée pour étudier l’anisotropie de la self-énergie à différents vecteurs d’onde sur la surface de Fermi. L’anisotropie entre la self-énergie au noeud et à l’antinoeud est un thème que nous avons déjà abordé au chapitre 5, et est un concept

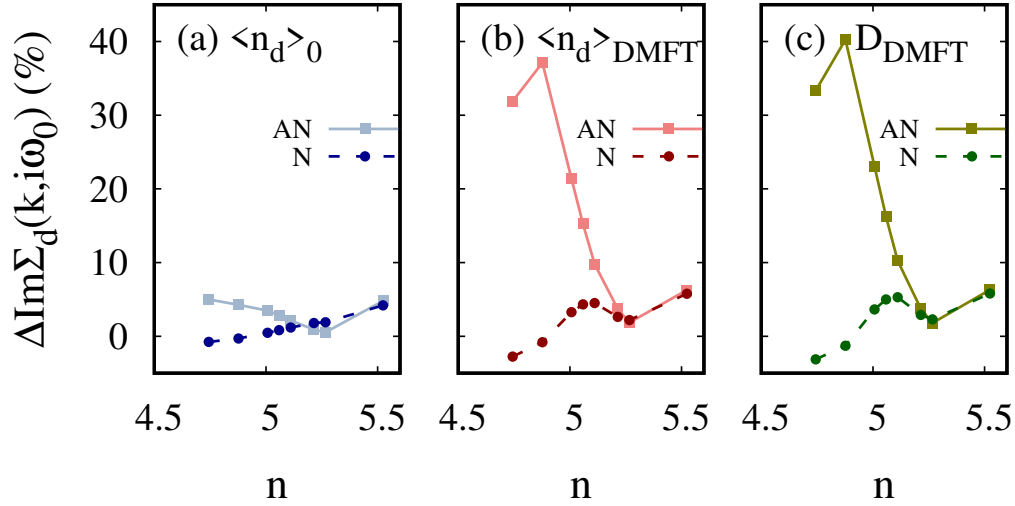


**FIGURE 7.5** Partie imaginaire de la self-énergie en fonction des fréquences de Matsubara. Les résultats sont obtenus à l’antinoeud (carrés, ligne pleine) et au noeud (cercles, ligne hachurée), pour les densités totales (a)  $n = 5.0069$  et (b)  $n = 5.1107$ . Les calculs TPSC présentés ici sont réalisés avec les densités avec interaction et la double occupation obtenues par la DMFT. Les paramètres de calcul sont définis au début de la section 7.4. Cette figure a été incluse dans la référence [4] après le dépôt initial de cette thèse.

clé pour l’étude de phénomènes comme le pseudogap dans les cuprates.

À la figure 7.5, nous illustrons ce phénomène en comparant la self-énergie obtenue aux points antinodal et nodal sur la surface de Fermi. Ces points (vecteurs d’onde) sont indiqués dans l’encart de la figure 7.5 (a) par des étoiles rose et jaune respectivement. Les résultats montrés dans la figure sont obtenus par le calcul TPSC utilisant tant la densité avec interaction que la double occupation de la DMFT. En (a), nous montrons les résultats pour la densité totale  $n = 5.0069$ , et en (b), pour  $n = 5.1107$ . Pour ces deux densités, les self-énergies nodale et antinodale coïncident à haute fréquence, tel qu’attendu d’après des calculs théoriques précédents [74]. Toutefois, nous remarquons une anisotropie entre les self-énergies nodale et antinodale à basse fréquence ( $\omega_n < 4$ ) pour la densité  $n = 5.0069$ . Une telle anisotropie est également présente pour la densité  $n = 5.1107$ , mais dans une moindre mesure.

Nous obtenons une description quantitative de l’anisotropie entre les self-énergies nodale et antinodale en étudiant leur comportement à la première fréquence de Matsubara,  $\omega_0 = \pi T$ , où l’écart entre les résultats aux deux vecteurs d’onde est le plus grand. À la figure 7.6, nous montrons



**FIGURE 7.6** Déviation relative entre la self-énergie locale et la self-énergie calculée au noeud (N, cercles et lignes pointillées) et à l’antinoeud (AN, carrés et lignes pleines), à la première fréquence de Matsubara, en fonction de la densité totale  $n$ . Les déviations sont calculées en utilisant l’équation 7.95. Les calculs TPSC sont réalisés (a) avec les densités orbitales sans interaction, (b) avec les densités orbitales avec interaction et l’ansatz TPSC et (c) avec les densités orbitales avec interaction et la double occupation de la DMFT. Les paramètres de calcul sont définis au début de la section 7.4. Cette figure a été incluse dans la référence [4] après le dépôt initial de cette thèse.

la déviation relative entre la self-énergie locale et la self-énergie obtenue aux points antinodal et nodal sur la surface de Fermi. La déviation est calculée selon

$$\Delta \text{Im}\Sigma_d(\mathbf{k}, i\omega_0) = \frac{\text{Im}\Sigma_d(\mathbf{k}, i\omega_0) - \text{Im}\Sigma_{d,\text{loc}}(i\omega_0)}{\text{Im}\Sigma_{d,\text{loc}}(i\omega_0)}. \quad (7.95)$$

Nous illustrons la déviation relative à la figure 7.6 en fonction de la densité totale  $n$  pour les calculs TPSC réalisés par les trois types de calculs résumés au tableau 7.2 : (a) avec la densité sans interaction et l’ansatz TPSC, (b) avec la densité avec interaction obtenue par la DMFT et l’ansatz TPSC, et (c) avec la densité avec interaction et la double occupation obtenues par la DMFT.

Dans les calculs avec la densité sans interaction, la déviation est de l’ordre de  $-1$  à  $5\%$  en valeur absolue et très similaire au noeud et à l’antinoeud. Ces résultats indiquent que la self-énergie est quasi-isotrope le long de la surface de Fermi. Pour les deux autres types de calculs TPSC réalisés avec la densité avec interaction, les déviations atteignent  $\simeq 40\%$ . De plus, pour ces deux méthodes, les déviations au noeud et à l’antinoeud sont distinctes, indiquant une anisotropie de la self-énergie le long de la surface de Fermi.

En somme, utiliser l’approche TPSC pour le modèle d’Emery mène à l’obtention d’une self-énergie anisotrope le long de la surface de Fermi. Cette physique n’est pas accessible par la DMFT sur un site.

### Étape TPSC+DMFT additionnelle : substitution de la self-énergie locale de la DMFT

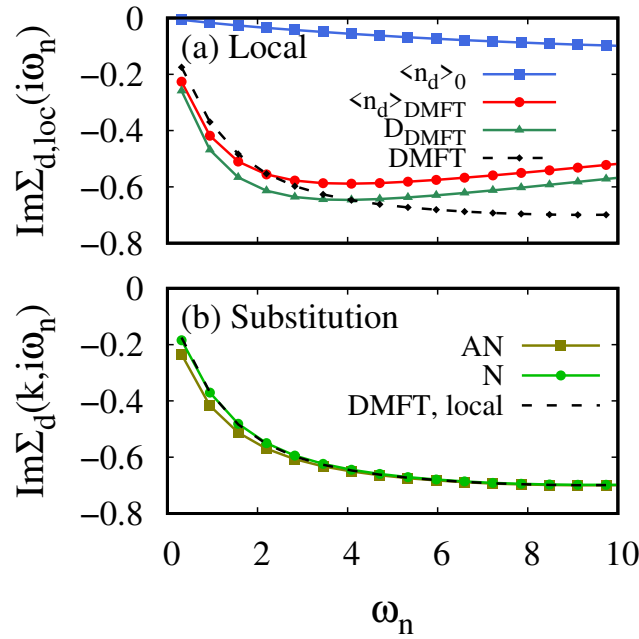
Dans la référence [5], l'approche TPSC+DMFT pour le modèle de Hubbard à une bande a été introduite en deux étapes distinctes. La première étape, que nous avons considérée jusqu'à présent, est d'utiliser la double occupation de la DMFT pour obtenir le vertex de spin  $U_d^{sp}$  plutôt que d'utiliser l'ansatz TPSC. Nous considérons maintenant la seconde étape, qui est de substituer la self-énergie locale obtenue par le calcul TPSC par celle que l'on obtient avec la DMFT

$$\Sigma_d(\mathbf{k}, i\omega_n) \rightarrow \Sigma_d^{\text{TPSC}}(\mathbf{k}, i\omega_n) - \Sigma_{d,\text{loc}}^{\text{TPSC}}(i\omega_n) + \Sigma_{d,\text{loc}}^{\text{DMFT}}(i\omega_n). \quad (7.96)$$

Pour le modèle de Hubbard à une bande, la substitution de la self-énergie locale de la DMFT permet d'obtenir de meilleurs résultats lorsque nous les comparons aux résultats exacts obtenus par la méthode Monte Carlo diagrammatique [5]. Nous explorons ainsi cette approche pour le modèle d'Emery, bien que nous n'ayons pas de résultats exacts auxquels comparer ceux que nous obtenons ici. Nous illustrons le processus de substitution de la self-énergie locale à la figure 7.7 pour le cas de la densité totale  $n = 5.0069$ .

À la figure 7.7 (a), nous comparons la self-énergie locale obtenue par la DMFT à la self-énergie locale obtenue par la TPSC. À nouveau, nous illustrons les résultats de la TPSC pour les trois types de calculs résumés au tableau 7.2. La comparaison à la self-énergie locale de la DMFT montre clairement que l'utilisation de la densité avec interaction dans les calculs TPSC est nécessaire afin d'obtenir une self-énergie locale qualitativement adéquate.

À la figure 7.7 (b), nous montrons la self-énergie au noeud et à l'antinoeud après la substitution de la self-énergie locale de la DMFT (équation 7.96). Cette substitution corrige le comportement à haute fréquence de la self-énergie tout en préservant l'anisotropie entre le noeud et l'antinoeud à basse fréquence. Puisqu'il a été montré que cette substitution permet d'obtenir des résultats plus précis pour le modèle de Hubbard à une bande [5], au moins dans la limite de validité de l'approche TPSC, elle devrait également être une façon adéquate d'inclure des fluctuations non-locales à la DMFT pour le modèle d'Emery.



**FIGURE 7.7** Substitution de la self-énergie locale de la DMFT pour la densité  $n = 5.0069$ . (a) Partie locale de la self-énergie obtenue par les calculs TPSC (lignes pleines) et par la DMFT (ligne noire pointillée). Les calculs TPSC sont faits avec la densité sans interaction et l'ansatz TPSC (carrés bleus), avec la densité avec interaction et l'ansatz TPSC (cercles rouges) et avec la densité avec interaction et la double occupation de la DMFT (losanges verts). (b) Partie imaginaire de la self-énergie calculée au noeud (N, cercles) et à l'antinoeud (AN, carrés) après la substitution de la self-énergie locale de la DMFT (équation 7.96). Les paramètres de calcul sont définis au début de la section 7.4. Cette figure a été incluse dans la référence [4] après le dépôt initial de cette thèse.



## 7.5 Conclusion

---

Dans ce chapitre, nous avons utilisé l'approche des dérivées fonctionnelles et des fonctions de Green en champ source pour obtenir deux équations pour la self-énergie dans le modèle d'Emery. Nous avons ensuite utilisé ce formalisme pour définir les équations du premier niveau d'approximation de la TPSC pour le modèle d'Emery. Cette étude nous a permis de conclure que, dans les modèles multi-orbitaux où les orbitales sont non-dégénérées, les étapes de calcul habituelles de la TPSC ne sont pas directement applicables : la self-énergie au premier niveau d'approximation n'est pas identique pour les orbitales différentes, et les densités avec interaction doivent être utilisées dans le calcul des règles de somme.

Nous avons ensuite appliqué le formalisme TPSC+DMFT au modèle d'Emery afin de vérifier numériquement l'importance des points soulevés ci-haut. Nous avons constaté que les résultats obtenus par la densité sans interaction, soit en suivant les étapes habituelles d'un calcul TPSC pour le modèle à une bande, sont physiquement incorrects.

Nous concluons cette section avec une mention brève des cuprates dopés en électrons dont il était question aux chapitres 3, 4 et 5 de cette thèse. L'un des grands succès de la TPSC est sa prédiction qualitative et quantitative du pseudogap antiferromagnétique. Dans le modèle d'Emery, puisque la self-énergie des orbitales  $d$  au second niveau d'approximation de la TPSC est identique à celle que l'on obtient pour le modèle de Hubbard à une bande, nous pouvons nous attendre à ce que le critère de Vilk soit également applicable. Nous pouvons ainsi imaginer de futurs travaux entourant l'étude du *crossover* et du pseudogap antiferromagnétique dans un modèle de Emery représentant un cuprate dopé en électrons comme NCCO. Cette étude dépasse le cadre de cette thèse, où nous avons plutôt mis l'effort sur le développement d'une méthode robuste pour l'étude du modèle.

# Conclusion

Dans cette thèse, nous avons présenté les résultats de quatre projets distincts. Les quatre projets dont il était question ici se rejoignent autour de la question de l'approche auto-cohérente à deux particules (TPSC), une méthode pour le modèle de Hubbard que nous avons présentée en détail.

Nous avons d'abord appliqué la TPSC au modèle de Hubbard sur un réseau carré afin d'étudier des questions liées aux cuprates dopés en électrons. Nous avons d'abord inclus le désordre dans nos calculs. Cela nous a permis d'étudier l'effet combiné du désordre et des fluctuations antiferromagnétiques sur le pseudogap dans les cuprates dopés en électrons. Ce projet, qui a fait l'objet de l'article [2], a également été présenté dans quelques conférences : la conférence de l'Association Canadienne des Physiciens et Physiciennes en 2022, le March Meeting de l'American Physical Society en 2022, et le colloque de l'Institut quantique en 2023. Ensuite, nous avons présenté un projet portant sur l'étude de la résilience des quasiparticules du liquide de Fermi et sur la mesure de la force des interactions par un ratio accessible avec des mesures d'ARPES. Ce projet a été inspiré par des discussions avec le groupe expérimental du professeur Johan Chang. Les résultats du projet ont mené à la publication de l'article [1], et ont été présentés à la conférence du March Meeting en 2021 ainsi qu'à la conférence M2S en 2022.

Dans la dernière partie de cette thèse, nous avons introduit des extensions de la TPSC. Nous avons d'abord abordé les méthodes TPSC+ et TPSC+SFM. Ces améliorations de la TPSC permettent d'accéder au régime classique renormalisé du modèle de Hubbard. Le travail présenté dans cette thèse entourant la TPSC+ et la TPSC+SFM a mené à la rédaction de l'article [3], ainsi qu'à des présentations au March Meeting en 2023 et à l'atelier en ligne Two-Particle Correlation Functions of Many-Particle Systems en 2022. Finalement, nous avons présenté une extension de la TPSC au modèle multi-orbital d'Emery. Ce travail nous a permis de conclure que l'approche TPSC+DMFT pour les modèles multi-orbitaux non-dégénérés comporte des avantages non-négligeables, pourvu que les calculs TPSC soient réalisés avec les densités avec interaction obtenues par la DMFT.

Les applications et extensions de la TPSC réalisées dans cette thèse ont été grandement accélérées par l'introduction récente de la bibliothèque sparse-ir pour les calculs en fréquences de Matsubara [237]. Notre propre implémentation de la TPSC disponible en ligne est basée sur cette

bibliothèque [126]. Nous avons maintenant accès à des programmes numériquement efficaces et dont l'implémentation et l'utilisation sont très simples. Pour ces raisons, il nous est possible d'imaginer plusieurs futurs axes de recherche concernant la TPSC. Entre autres, l'application de l'approche TPSC+DMFT pour le modèle d'Emery pourrait être utilisée pour étudier des modèles réalistes des cuprates dopés en électrons, et plus précisément leur pseudogap antiferromagnétique. Une approche similaire pourrait être utilisée pour l'étude des supraconducteurs à base de nickel (nickelates), dont le hamiltonien minimal ne contient également qu'une orbitale corrélée. Ce travail ouvre également la voie vers l'application de l'approche TPSC+DMFT à des calculs de structure électronique réalistes (DFT). Enfin, les approches TPSC+ et TPSC+SFM peuvent être utilisées pour étudier le régime classique renormalisé du modèle de Hubbard. Dans cette thèse, nous avons présenté les fondements de ces méthodes nouvelles sans les appliquer à des systèmes réalistes. Le régime classique renormalisé du modèle de Hubbard demeure une région du diagramme de phase difficilement accessible par les approches numériques disponibles, ce qui fait de la TPSC+ et de la TPSC+SFM des approches prometteuses.

# Bibliographie

- [1] C. Gauvin-Ndiaye, M. Setrakian et A.-M. S. Tremblay. Resilient Fermi liquid and strength of correlations near an antiferromagnetic quantum critical point. *Physical Review Letters* **128**(8), 087001 (2022). doi :10.1103/PhysRevLett.128.087001. xii, 23, 65, 66, 67, 70, 72, 74, 76, 79, 80, 86, 147
- [2] C. Gauvin-Ndiaye, P.-A. Graham et A.-M. S. Tremblay. Disorder effects on hot spots in electron-doped cuprates. *Physical Review B* **105**(23), 235133 (2022). doi :10.1103/PhysRevB.105.235133. xii, 23, 43, 44, 51, 52, 56, 57, 61, 147
- [3] C. Gauvin-Ndiaye, C. Lahaie, Y. M. Vilk et A.-M. S. Tremblay. Improved two-particle self-consistent approach for the single-band hubbard model in two dimensions. *Phys. Rev. B* **108**, 075144 (2023). doi :10.1103/PhysRevB.108.075144. xii, 24, 88, 98, 102, 105, 107, 113, 117, 119, 147
- [4] C. Gauvin-Ndiaye, J. Leblanc, S. Marin, N. Martin, D. Lessnich et A.-M. S. Tremblay. The two-particle self-consistent approach for multiorbital models : application to the emery model. (arXiv :2308.14091) (2023). [http ://arxiv.org/abs/2308.14091](http://arxiv.org/abs/2308.14091). arXiv :2308.14091 [cond-mat]. xiii, 120, 121, 122, 138, 140, 141, 142, 143, 145
- [5] N. Martin, C. Gauvin-Ndiaye et A.-M. S. Tremblay. Nonlocal corrections to dynamical mean-field theory from the two-particle self-consistent method. *Physical Review B* **107**(7), 075158 (2023). doi :10.1103/PhysRevB.107.075158. xiii, 23, 24, 133, 135, 144
- [6] Sékou-Oumar Kaba, Benjamin Groleau-Paré, Marc-Antoine Gauthier, A.-M. S. Tremblay, Simon Verret et Chloé Gauvin-Ndiaye. Prediction of large magnetic moment materials with graph neural networks and random forests. *Physical Review Materials* **7**(4), 044407 (2023). doi :10.1103/PhysRevMaterials.7.044407. xiii
- [7] Chloé Gauvin-Ndiaye, Joseph Tindall, Javier Robledo Moreno et Antoine Georges. Mott transition and volume law entanglement with neural quantum states. En préparation. xiii
- [8] Junjiro Kanamori. Electron correlation and ferromagnetism of transition metals. *Progress of Theoretical Physics* **30**(3), 275–289 (1963). doi :10.1143/PTP.30.275. 1, 4, 7
- [9] Martin C. Gutzwiller. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Physical Review Letters* **10**(5), 159–162 (1963). doi :10.1103/PhysRevLett.10.159. 1, 7
- [10] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**(1365), 238–257 (1963). doi :10.1098/rspa.1963.0204. 1, 7

- [11] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. ii. the degenerate band case. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **277**(1369), 237–259 (1964). doi :10.1098/rspa.1964.0019. 1, 7
- [12] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands iii. an improved solution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **281**(1386), 401–419 (1964). doi :10.1098/rspa.1964.0190. 1, 7
- [13] Elbio Dagotto. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Reviews of Modern Physics* **66**(3), 763–840 (1994). doi :10.1103/RevModPhys.66.763. 1
- [14] A.-M. S. Tremblay, B. Kyung et D. Sénéchal. Pseudogap and high-temperature superconductivity from weak to strong coupling. towards a quantitative theory (review article). *Low Temperature Physics* **32**(4), 424–451 (2006). doi :10.1063/1.2199446. 1
- [15] D. J. Scalapino. *Numerical Studies of the 2D Hubbard Model*, 495–526. Springer, New York, NY (2007). 1
- [16] Mingpu Qin, Thomas Schäfer, Sabine Andergassen, Philippe Corboz et Emanuel Gull. The Hubbard model : A computational perspective. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **13**(1), annurev-conmatphys-090921-033948 (2022). doi :10.1146/annurev-conmatphys-090921-033948. 1
- [17] Daniel P Arovas, Erez Berg, Steven A Kivelson et Srinivas Raghu. The Hubbard model. **13**(1), 239–74 (2022). 1
- [18] J. G. Bednorz et K. A. Müller. Possible high T<sub>c</sub> superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64**(2), 189–193 (1986). doi :10.1007/BF01303701. 1, 37
- [19] P. W. Anderson. The resonating valence bond state in La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> and superconductivity. *Science* **235**(4793), 1196–1198 (1987). doi :10.1126/science.235.4793.1196. 1
- [20] David Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. Hot spots and pseudogaps for hole- and electron-doped high-temperature superconductors. *Physical Review Letters* **92**(12), 126401 (2004). doi :10.1103/PhysRevLett.92.126401. 1, 79, 85
- [21] B. Kyung, V. Hankevych, A.-M. Daré et A.-M. S. Tremblay. Pseudogap and spin fluctuations in the normal state of the electron-doped cuprates. *Physical Review Letters* **93**(14), 147004 (2004). doi :10.1103/PhysRevLett.93.147004. 1, 23, 41, 45, 49, 66, 105
- [22] Thomas Schäfer, Nils Wentzell, Fedor Šimkovic, Yuan-Yao He, Cornelia Hille, Marcel Klett, Christian J. Eckhardt, Behnam Arzhang, Viktor Harkov, François-Marie Le Régent et al. Tracking the footprints of spin fluctuations : A multimethod, multimessenger study of the two-dimensional Hubbard model. *Physical Review X* **11**(1), 011058 (2021). doi :10.1103/PhysRevX.11.011058. 1, 3, 23, 24, 41, 56, 75, 91, 101, 105, 106, 118, 119
- [23] Thomas Maier, Mark Jarrell, Thomas Pruschke et Matthias H. Hettler. Quantum cluster theories. *Reviews of Modern Physics* **77**(3), 1027–1080 (2005). doi :10.1103/RevModPhys.77.1027. 1, 3
- [24] B. Kyung, S. S. Kancharla, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay, M. Civelli et G. Kotliar. Pseudogap induced by short-range spin correlations in a doped Mott insulator. *Physical Review B* **73**(16), 165114 (2006). doi :10.1103/PhysRevB.73.165114. 1
- [25] Alexandru Macridin, M. Jarrell, Thomas Maier, P. R. C. Kent et Eduardo D’Azevedo. Pseudogap and antiferromagnetic correlations in the Hubbard model. *Physical Review Letters* **97**(3), 036401 (2006). doi :10.1103/PhysRevLett.97.036401. 1

- [26] E. Gull, M. Ferrero, O. Parcollet, A. Georges et A. J. Millis. Momentum-space anisotropy and pseudogaps : A comparative cluster dynamical mean-field analysis of the doping-driven metal-insulator transition in the two-dimensional Hubbard model. *Physical Review B* **82**(15), 155101 (2010). doi :10.1103/PhysRevB.82.155101. 1
- [27] O. Gunnarsson, T. Schäfer, J. P. F. LeBlanc, E. Gull, J. Merino, G. Sangiovanni, G. Rohringer et A. Toschi. Fluctuation diagnostics of the electron self-energy : Origin of the pseudogap physics. *Phys. Rev. Lett.* **114**, 236402 (2015). doi :10.1103/PhysRevLett.114.236402. 1
- [28] G. Rohringer et A. Toschi. Impact of nonlocal correlations over different energy scales : A dynamical vertex approximation study. *Physical Review B* **94**(12), 125144 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.94.125144. 1
- [29] Wei Wu, Mathias S. Scheurer, Shubhayu Chatterjee, Subir Sachdev, Antoine Georges et Michel Ferrero. Pseudogap and Fermi-surface topology in the two-dimensional Hubbard model. *Physical Review X* **8**(2), 021048 (2018). doi :10.1103/PhysRevX.8.021048. 1
- [30] Friedrich Krien, Paul Worm, Patrick Chalupa-Gantner, Alessandro Toschi et Karsten Held. Explaining the pseudogap through damping and antidamping on the Fermi surface by imaginary spin scattering. *Communications Physics* **5**(11), 1–7 (2022). doi :10.1038/s42005-022-01117-5. 1
- [31] Fedor Simkovic, Riccardo Rossi, Antoine Georges et Michel Ferrero. Origin and fate of the pseudogap in the doped Hubbard model. (arXiv :2209.09237) (2022). [http ://arxiv.org/abs/2209.09237](http://arxiv.org/abs/2209.09237). arXiv :2209.09237 [cond-mat]. 1
- [32] Mingpu Qin, Chia-Min Chung, Hao Shi, Ettore Vitali, Claudius Hubig, Ulrich Schollwöck, Steven R. White, Shiwei Zhang et Simons Collaboration on the Many-Electron Problem. Absence of superconductivity in the pure two-dimensional Hubbard model. *Physical Review X* **10**(3), 031016 (2020). doi :10.1103/PhysRevX.10.031016. 1
- [33] Hao Xu, Chia-Min Chung, Mingpu Qin, Ulrich Schollwöck, Steven R. White et Shiwei Zhang. Coexistence of superconductivity with partially filled stripes in the Hubbard model. (arXiv :2303.08376) (2023). doi :10.48550/arXiv.2303.08376. arXiv :2303.08376 [cond-mat, physics :physics]. 1
- [34] J. H. de Boer et E. J. W. Verwey. Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands. *Proceedings of the Physical Society* **49**(4S), 59 (1937). doi :10.1088/0959-5309/49/4S/307. 2
- [35] N. F. Mott et R. Peierls. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. *Proceedings of the Physical Society* **49**(4S), 72 (1937). doi :10.1088/0959-5309/49/4S/308. 2
- [36] N. F. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A* **62**(7), 416 (1949). doi :10.1088/0370-1298/62/7/303. 2
- [37] N. F. Mott. On the transition to metallic conduction in semiconductors. *Canadian Journal of Physics* **34**(12A), 1356–1368 (1956). doi :10.1139/p56-151. 2
- [38] N.F. Mott. *Metal Insulator Transitions*. Taylor and Francis, London, (1990). 2
- [39] Masatoshi Imada, Atsushi Fujimori et Yoshinori Tokura. Metal-insulator transitions. *Reviews of Modern Physics* **70**(4), 1039–1263 (1998). doi :10.1103/RevModPhys.70.1039. 2
- [40] N. Bulut, W. Koshibae et S. Maekawa. Magnetic correlations in the Hubbard model on triangular and kagome lattices. *Physical Review Letters* **95**(3), 037001 (2005). doi :10.1103/PhysRevLett.95.037001. 2



- [41] B. Kyung et A.-M. S. Tremblay. Mott transition, antiferromagnetism, and d -wave superconductivity in two-dimensional organic conductors. *Physical Review Letters* **97**(4), 046402 (2006). doi :10.1103/PhysRevLett.97.046402. 2
- [42] Kazushi Kanoda et Reizo Kato. Mott physics in organic conductors with triangular lattices. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **2**(1), 167–188 (2011). doi :10.1146/annurev-conmatphys-062910-140521. 2
- [43] Alexander Wietek, Riccardo Rossi, Fedor Šimkovic, Marcel Klett, Philipp Hansmann, Michel Ferrero, E. Miles Stoudenmire, Thomas Schäfer et Antoine Georges. Mott insulating states with competing orders in the triangular lattice Hubbard model. *Physical Review X* **11**(4), 041013 (2021). doi :10.1103/PhysRevX.11.041013. 2
- [44] P.-O. Downey, O. Gingras, J. Fournier, C.-D. Hébert, M. Charlebois et A.-M. S. Tremblay. Mott transition, Widom line, and pseudogap in the half-filled triangular lattice Hubbard model. *Phys. Rev. B* **107**, 125159 (2023). doi :10.1103/PhysRevB.107.125159. 2
- [45] S. Sorella et E. Tosatti. Semi-metal-insulator transition of the Hubbard model in the honeycomb lattice. *Europhysics Letters* **19**(8), 699 (1992). doi :10.1209/0295-5075/19/8/007. 2
- [46] Sandro Sorella, Yuichi Otsuka et Seiji Yunoki. Absence of a spin liquid phase in the Hubbard model on the honeycomb lattice. *Scientific Reports* **2**(11), 992 (2012). doi :10.1038/srep00992. 2
- [47] Rahul Nandkishore, L. S. Levitov et A. V. Chubukov. Chiral superconductivity from repulsive interactions in doped graphene. *Nature Physics* **8**(22), 158–163 (2012). doi :10.1038/nphys2208. 2
- [48] Fakher F. Assaad et Igor F. Herbut. Pinning the order : The nature of quantum criticality in the Hubbard model on honeycomb lattice. *Physical Review X* **3**(3), 031010 (2013). doi :10.1103/PhysRevX.3.031010. 2
- [49] S. R. Hassan et David Sénéchal. Absence of spin liquid in nonfrustrated correlated systems. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 096402 (2013). doi :10.1103/PhysRevLett.110.096402. 2
- [50] J. P. L. Faye, P. Sahebsara et D. Sénéchal. Chiral triplet superconductivity on the graphene lattice. *Phys. Rev. B* **92**, 085121 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.92.085121. 2
- [51] J. P. L. Faye, M. N. Diarra et D. Sénéchal. Kekulé superconductivity and antiferromagnetism on the graphene lattice. *Phys. Rev. B* **93**, 155149 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.93.155149. 2
- [52] Jingxiang Wu, Jean Paul Latyr Faye, David Sénéchal et Joseph Maciejko. Quantum cluster approach to the spinful haldane-hubbard model. *Phys. Rev. B* **93**, 075131 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.93.075131. 2
- [53] Yoshiki Imai, Norio Kawakami et Hirokazu Tsunetsugu. Low-energy excitations of the Hubbard model on the kagome lattice. *Physical Review B* **68**(19), 195103 (2003). doi :10.1103/PhysRevB.68.195103. 2
- [54] Takuma Ohashi, Norio Kawakami et Hirokazu Tsunetsugu. Mott transition in kagome lattice Hubbard model. *Physical Review Letters* **97**(6), 066401 (2006). doi :10.1103/PhysRevLett.97.066401. 2
- [55] Josef Kaufmann, Klaus Steiner, Richard T. Scalettar, Karsten Held et Oleg Janson. How correlations change the magnetic structure factor of the kagome Hubbard model. *Physical Review B* **104**(16), 165127 (2021). doi :10.1103/PhysRevB.104.165127. 2

- [56] Elliott H. Lieb et F. Y. Wu. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Physical Review Letters* **20**(25), 1445–1448 (1968). doi :10.1103/PhysRevLett.20.1445. 2
- [57] Walter Metzner et Dieter Vollhardt. Correlated lattice fermions in  $d = \infty$  dimensions. *Physical Review Letters* **62**(3), 324–327 (1989). doi :10.1103/PhysRevLett.62.324. 3, 12
- [58] Antoine Georges et Gabriel Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Physical Review B* **45**(12), 6479–6483 (1992). doi :10.1103/PhysRevB.45.6479. 3, 12
- [59] M. Jarrell. Hubbard model in infinite dimensions : A quantum Monte Carlo study. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 168–171 (1992). doi :10.1103/PhysRevLett.69.168. 3, 12
- [60] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth et Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics* **68**(1), 13–125 (1996). doi :10.1103/RevModPhys.68.13. Publisher : American Physical Society. 3, 12
- [61] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke et H. R. Krishnamurthy. Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems. *Physical Review B* **58**(12), R7475–R7479 (1998). doi :10.1103/PhysRevB.58.R7475. 3
- [62] A. I. Lichtenstein et M. I. Katsnelson. Antiferromagnetism and d-wave superconductivity in cuprates : A cluster dynamical mean-field theory. *Physical Review B* **62**(14), R9283–R9286 (2000). doi :10.1103/PhysRevB.62.R9283. 3
- [63] Gabriel Kotliar, Sergej Y. Savrasov, Gunnar Pálsson et Giulio Biroli. Cellular dynamical mean field approach to strongly correlated systems. *Physical Review Letters* **87**(18), 186401 (2001). doi :10.1103/PhysRevLett.87.186401. 3
- [64] G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A.A. Katanin, A.E. Antipov, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein, A.N. Rubtsov et K. Held. Diagrammatic routes to nonlocal correlations beyond dynamical mean field theory. *Reviews of Modern Physics* **90**(2), 025003 (2018). doi :10.1103/RevModPhys.90.025003. 3
- [65] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino et R. L. Sugar. Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. i. *Physical Review D* **24**(8), 2278–2286 (1981). doi :10.1103/PhysRevD.24.2278. 3
- [66] Nikolai V. Prokof'ev et Boris V. Svistunov. Polaron problem by diagrammatic quantum Monte Carlo. *Physical Review Letters* **81**(12), 2514–2517 (1998). doi :10.1103/PhysRevLett.81.2514. 3
- [67] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs et G. Rajagopal. Quantum Monte Carlo simulations of solids. *Reviews of Modern Physics* **73**(1), 33–83 (2001). doi :10.1103/RevModPhys.73.33. 3
- [68] Kris Van Houcke, Evgeny Kozik, N. Prokof'ev et B. Svistunov. Diagrammatic Monte Carlo. *Physics Procedia* **6**, 95–105 (2010). doi :10.1016/j.phpro.2010.09.034. 3
- [69] Riccardo Rossi. Determinant diagrammatic Monte Carlo algorithm in the thermodynamic limit. *Physical Review Letters* **119**(4), 045701 (2017). doi :10.1103/PhysRevLett.119.045701. 3
- [70] Matthias Troyer et Uwe-Jens Wiese. Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum Monte Carlo simulations. *Physical Review Letters* **94**(17), 170201 (2005). doi :10.1103/PhysRevLett.94.170201. 3
- [71] Y. M. Vilk, Liang Chen et A.-M. S. Tremblay. Theory of spin and charge fluctuations in the Hubbard model. *Phys. Rev. B* **49**, 13267–13270 (1994). doi :10.1103/PhysRevB.49.13267. 3, 22, 23



- [72] Alain F. Veilleux, Anne-Marie Daré, Liang Chen, Y. M. Vilk et A.-M. S. Tremblay. Magnetic and pair correlations of the Hubbard model with next-nearest-neighbor hopping. *Phys. Rev. B* **52**, 16255–16263 (1995). doi :10.1103/PhysRevB.52.16255. 3, 22, 23
- [73] Y. M. Vilk et A.-M. S. Tremblay. Destruction of Fermi-liquid quasiparticles in two dimensions by critical fluctuations. *EPL (Europhysics Letters)* **33**(2), 159 (1996). <http://stacks.iop.org/0295-5075/33/i=2/a=159>. 3, 22, 23, 71
- [74] Y. M. Vilk et A.-M. S. Tremblay. Non-perturbative many-body approach to the Hubbard model and single-particle pseudogap. *Journal de Physique I* **7**(11), 1309–1368 (1997). doi :10.1051/jp1 :1997135. arXiv : cond-mat/9702188. 3, 22, 23, 28, 41, 54, 57, 70, 92, 95, 104, 105, 106, 108, 110, 118, 142
- [75] J. P. F. LeBlanc, Andrey E. Antipov, Federico Becca, Ireneusz W. Bulik, Garnet Kin-Lic Chan, Chia-Min Chung, Youjin Deng, Michel Ferrero, Thomas M. Henderson, Carlos A. Jiménez-Hoyos, E. Kozik, Xuan-Wen Liu, Andrew J. Millis, N. V. Prokof'ev, Mingpu Qin, Gustavo E. Scuseria, Hao Shi, B. V. Svistunov, Luca F. Tocchio, I. S. Tupitsyn, Steven R. White, Shiwei Zhang, Bo-Xiao Zheng, Zhenyue Zhu et Emanuel Gull. Solutions of the two-dimensional Hubbard model : Benchmarks and results from a wide range of numerical algorithms. *Phys. Rev. X* **5**, 041041 (2015). doi :10.1103/PhysRevX.5.041041. 3
- [76] Michael Köhl, Henning Moritz, Thilo Stöferle, Kenneth Günter et Tilman Esslinger. Fermionic atoms in a three dimensional optical lattice : Observing Fermi surfaces, dynamics, and interactions. *Physical Review Letters* **94**(8), 080403 (2005). doi :10.1103/PhysRevLett.94.080403. 3
- [77] Eugenio Cocchi, Luke A. Miller, Jan H. Drewes, Marco Koschorreck, Daniel Pertot, Ferdinand Brennecke et Michael Köhl. Equation of state of the two-dimensional Hubbard model. *Physical Review Letters* **116**(17), 175301 (2016). doi :10.1103/PhysRevLett.116.175301. 3
- [78] Leticia Tarruell et Laurent Sanchez-Palencia. Quantum simulation of the Hubbard model with ultracold fermions in optical lattices. *Comptes Rendus Physique* **19**(6), 365–393 (2018). doi :10.1016/j.crhy.2018.10.013. 3
- [79] Russell A. Hart, Pedro M. Duarte, Tsung-Lin Yang, Xinxing Liu, Thereza Paiva, Ehsan Khatami, Richard T. Scalettar, Nandini Trivedi, David A. Huse et Randall G. Hulet. Observation of anti-ferromagnetic correlations in the Hubbard model with ultracold atoms. *Nature* **519**(75427542), 211–214 (2015). doi :10.1038/nature14223. 4
- [80] J. H. Drewes, L. A. Miller, E. Cocchi, C. F. Chan, N. Wurz, M. Gall, D. Pertot, F. Brennecke et M. Köhl. Antiferromagnetic correlations in two-dimensional fermionic Mott-insulating and metallic phases. *Phys. Rev. Lett.* **118**, 170401 (2017). doi :10.1103/PhysRevLett.118.170401. 4
- [81] Anton Mazurenko, Christie S. Chiu, Geoffrey Ji, Maxwell F. Parsons, Márton Kanász-Nagy, Richard Schmidt, Fabian Grusdt, Eugene Demler, Daniel Greif et Markus Greiner. A cold-atom Fermi–Hubbard antiferromagnet. *Nature* **545**(76557655), 462–466 (2017). doi :10.1038/nature22362. 4
- [82] U. Schneider, L. Hackermüller, S. Will, Th. Best, I. Bloch, T. A. Costi, R. W. Helmes, D. Rasch et A. Rosch. Metallic and insulating phases of repulsively interacting fermions in a 3D optical lattice. *Science* **322**(5907), 1520–1525 (2008). doi :10.1126/science.1165449. 4
- [83] Robert Jördens, Niels Strohmaier, Kenneth Günter, Henning Moritz et Tilman Esslinger. A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature* **455**(72107210), 204–207 (2008). doi :10.1038/nature07244. 4

- [84] Peter T. Brown, Debayan Mitra, Elmer Guardado-Sanchez, Reza Nourafkan, Alexis Reymbaut, Charles-David Hébert, Simon Bergeron, A.-M. S. Tremblay, Jure Kokalj, David A. Huse, Peter Schauß et Waseem S. Bakr. Bad metallic transport in a cold atom Fermi-Hubbard system. *Science* **363**(6425), 379–382 (2019). doi :10.1126/science.aat4134. 4
- [85] V. J. Emery. Theory of high- $T_c$  superconductivity in oxides. *Physical Review Letters* **58**(26), 2794–2797 (1987). doi :10.1103/PhysRevLett.58.2794. 4, 7, 120, 122
- [86] C. M. Varma, S. Schmitt-Rink et Elihu Abrahams. Charge transfer excitations and superconductivity in “ionic” metals. *Solid State Communications* **62**(10), 681–685 (1987). doi :10.1016/0038-1098(87)90407-8. 4, 7, 120, 122
- [87] Antoine Georges, Luca De’ Medici et Jernej Mravlje. Strong correlations from Hund’s coupling. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **4**(1), 137–178 (2013). doi :10.1146/annurev-conmatphys-020911-125045. 4
- [88] S. Acharya, M. S. Laad, Dibyendu Dey, T. Maitra et A. Taraphder. First-principles correlated approach to the normal state of strontium ruthenate. *Scientific Reports* **7**(11), 43033 (2017). doi :10.1038/srep43033. 4
- [89] Karsten Held, Liang Si, Paul Worm, Oleg Janson, Ryotaro Arita, Zhicheng Zhong, Jan M. Tomczak et Motoharu Kitatani. Phase diagram of nickelate superconductors calculated by dynamical vertex approximation. *Frontiers in Physics* **9**, 810394 (2022). doi :10.3389/fphy.2021.810394. 4
- [90] Z. P. Yin, K. Haule et G. Kotliar. Kinetic frustration and the nature of the magnetic and paramagnetic states in iron pnictides and iron chalcogenides. *Nature Materials* **10**(1212), 932–935 (2011). doi :10.1038/nmat3120. 4
- [91] Qimiao Si et Nigel E. Hussey. Iron-based superconductors : Teenage, complex, challenging. *Physics Today* **76**(5), 34 (2023). doi :10.1063/PT.3.5235. 4
- [92] R.D. Mattuck. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-body Problem*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, (1992). <https://books.google.de/books?id=pe-v8zfxE68C>. 8
- [93] PHY-892 Quantum Materials Theory, from perturbation theory to dynamical-mean field theory (lecture notes). <https://www.physique.usherbrooke.ca/tremblay/cours/phy-892/N-corps.pdf>. En ligne, accès le 6 juin 2023. 8, 12
- [94] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Springer New York, NY, (2000). doi :10.1007/978-1-4757-5714-9. 8
- [95] Piers Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, (2015). doi :10.1017/CBO9781139020916. 8
- [96] Paul C. Martin et Julian Schwinger. Theory of many-particle systems. i. *Physical Review* **115**(6), 1342–1373 (1959). doi :10.1103/PhysRev.115.1342. 16, 123
- [97] Leo P. Kadanoff et Gordon Baym. *Quantum statistical mechanics*. W.A. Benjamins, New York, (1962). 16, 123
- [98] S. Allen, A.-M. S. Tremblay et Y. M. Vilk. Conserving approximations vs two-particle self-consistent approach. Dans *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*, D. Sénéchal, C. Bourbonnais et A.-M. S. Tremblay, (2003). Also available on arXiv :cond-mat/0110130. 22, 24, 34
- [99] A. M. S. Tremblay. Two-particle-self-consistent approach for the Hubbard model. Dans *Strongly Correlated Systems : Theoretical Methods*, F. Mancini et A. Avella, chapitre 13, 409–455. Springer series (2011). 22, 23, 24

- [100] S. Moukouri, S. Allen, F. Lemay, B. Kyung, D. Poulin, Y. M. Vilk et A.-M. S. Tremblay. Many-body theory versus simulations for the pseudogap in the Hubbard model. *Phys. Rev. B* **61**, 7887–7892 (2000). doi :10.1103/PhysRevB.61.7887. 23
- [101] B. Kyung, S. Allen et A.-M. S. Tremblay. Pairing fluctuations and pseudogaps in the attractive Hubbard model. *Physical Review B* **64**(7), 075116 (2001). doi :10.1103/PhysRevB.64.075116. 23
- [102] E. M. Motoyama, G. Yu, I. M. Vishik, O. P. Vajk, P. K. Mang et M. Greven. Spin correlations in the electron-doped high-transition-temperature superconductor  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . *Nature* **445**(7124), 186–189 (2007). doi :10.1038/nature05437. 23, 39, 40, 41, 42, 43, 64, 66
- [103] B. Kyung, J.-S. Landry et A. M. S. Tremblay. Antiferromagnetic fluctuations and  $d$ -wave superconductivity in electron-doped high-temperature superconductors. *Phys. Rev. B* **68**, 174502 (2003). [http ://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.174502](http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.174502). 23
- [104] S. R. Hassan, B. Davoudi, B. Kyung et A.-M. S. Tremblay. Conditions for magnetically induced singlet  $d$ -wave superconductivity on the square lattice. *Phys. Rev. B* **77**(9), 094501 (2008). doi :10.1103/PhysRevB.77.094501. 23
- [105] Daisuke Ogura et Kazuhiko Kuroki. Asymmetry of superconductivity in hole- and electron-doped cuprates : Explanation within two-particle self-consistent analysis for the three-band model. *Physical Review B* **92**(14), 144511 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.92.144511. 23, 120, 122, 136
- [106] Karim Zantout, Michaela Altmeyer, Steffen Backes et Roser Valentí. Superconductivity in correlated BEDT-TTF molecular conductors : Critical temperatures and gap symmetries. *Physical Review B* **97**(1), 014530 (2018). doi :10.1103/PhysRevB.97.014530. 23
- [107] Junya Otsuki. Two-particle self-consistent approach to unconventional superconductivity. *Phys. Rev. B* **85**, 104513 (2012). doi :10.1103/PhysRevB.85.104513. 23
- [108] V. Hankevych, B. Kyung et A.-M. S. Tremblay. Weak ferromagnetism and other instabilities of the two-dimensional  $t - t'$  Hubbard model at van Hove fillings. *Phys. Rev. B* **68**, 214405 – 1 (2003). [https ://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.214405](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.214405). 23
- [109] Anne-Marie Daré, Y. M. Vilk et A. M. S. Tremblay. Crossover from two- to three-dimensional critical behavior for nearly antiferromagnetic itinerant electrons. *Physical Review B* **53**(21), 14236–14251 (1996). doi :10.1103/PhysRevB.53.14236. 23, 96
- [110] Anne-Marie Daré et Gilbert Albinet. Magnetic properties of the three-dimensional Hubbard model at half filling. *Phys. Rev. B* **61**(7), 4567–4575 (2000). doi :10.1103/PhysRevB.61.4567. 23
- [111] Ryotaro Arita, Shigeki Onoda, Kazuhiko Kuroki et Hideo Aoki. Magnetic properties of the Hubbard model on three-dimensional lattices : Fluctuation-exchange and two-particle self-consistent studies. *Journal of the Physical Society of Japan* **69**(3), 785–795 (2000). doi :10.1143/JPSJ.69.785. 23
- [112] S. Allen et A.-M. S. Tremblay. Nonperturbative approach to the attractive Hubbard model. *Physical Review B* **64**(7), 075115 (2001). doi :10.1103/PhysRevB.64.075115. 23
- [113] Dominic Bergeron, Vasyl Hankevych, Bumsoo Kyung et A.-M. S. Tremblay. Optical and dc conductivity of the two-dimensional Hubbard model in the pseudogap regime and across the antiferromagnetic quantum critical point including vertex corrections. *Phys. Rev. B* **84**(8), 085128 (2011). doi :10.1103/PhysRevB.84.085128. 23, 28, 108

- [114] A.-M. Daré, L. Raymond, G. Albinet et A.-M. S. Tremblay. Interaction-induced adiabatic cooling for antiferromagnetism in optical lattices. *Phys. Rev. B* **76**(6), 064402 (2007). doi :10.1103/PhysRevB.76.064402. 23
- [115] B. Davoudi et A.-M. S. Tremblay. Nearest-neighbor repulsion and competing charge and spin order in the extended Hubbard model. *Phys. Rev. B* **74**(3), 035113 (2006). doi :10.1103/PhysRevB.74.035113. 23
- [116] B. Davoudi et A.-M. S. Tremblay. Non-perturbative treatment of charge and spin fluctuations in the two-dimensional extended Hubbard model : Extended two-particle self-consistent approach. *Phys. Rev. B* **76**, 085115 (2007). doi :10.1103/PhysRevB.76.085115. 23
- [117] B. Davoudi, S. R. Hassan et A.-M. S. Tremblay. Competition between charge and spin order in the  $t - U - V$  extended Hubbard model on the triangular lattice. *Phys. Rev. B* **77**(21), 214408 (2008). doi :10.1103/PhysRevB.77.214408. 23
- [118] Hideyuki Miyahara, Ryotaro Arita et Hiroaki Ikeda. Development of a two-particle self-consistent method for multiorbital systems and its application to unconventional superconductors. *Physical Review B* **87**(4), 045113 (2013). doi :10.1103/PhysRevB.87.045113. 23, 120
- [119] Karim Zantout, Steffen Backes et Roser Valentí. Effect of nonlocal correlations on the electronic structure of LiFeAs. *Physical Review Letters* **123**(25), 256401 (2019). doi :10.1103/PhysRevLett.123.256401. 23, 28, 120
- [120] Karim Zantout, Steffen Backes et Roser Valentí. Two-particle self-consistent method for the multi-orbital Hubbard model. *Annalen der Physik* **533**(2), 2000399 (2021). doi :10.1002/andp.202000399. 23, 28, 120
- [121] Hirohito Aizawa, Kazuhiko Kuroki et Jun-ichi Yamada. Enhancement of electron correlation due to the molecular dimerization in organic superconductors  $\beta - (\text{BDA-TTP})_2\text{X}$  ( $\text{X} = \text{I}_3, \text{SbF}_6$ ). *Phys. Rev. B* **92**, 155108 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.92.155108. 23
- [122] S. Arya, P. V. Sriluckshmy, S. R. Hassan et A.-M. S. Tremblay. Antiferromagnetism in the Hubbard model on the honeycomb lattice : A two-particle self-consistent study. *Physical Review B* **92**(4), 045111 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.92.045111. 23, 120
- [123] José M Pizarro, Severino Adler, Karim Zantout, Thomas Mertz, Paolo Barone, Roser Valentí, Giorgio Sangiovanni et Tim O Wehling. Deconfinement of Mott localized electrons into topological and spin-orbit-coupled Dirac fermions. *npj Quantum Materials* **5**(1), 1–7 (2020). doi :https://doi.org/10.1038/s41535-020-00277-3. 23
- [124] Olivier Simard et Philipp Werner. Nonequilibrium two-particle self-consistent approach. *Phys. Rev. B* **106**, L241110 (2022). doi :10.1103/PhysRevB.106.L241110. 23
- [125] Shinibali Bhattacharyya, Kristofer Björnson, Karim Zantout, Daniel Steffensen, Laura Fanfarillo, Andreas Kreisel, Roser Valentí, Brian M. Andersen et P. J. Hirschfeld. Nonlocal correlations in iron pnictides and chalcogenides. *Physical Review B* **102**(3), 035109 (2020). doi :10.1103/PhysRevB.102.035109. 23
- [126] Programme TPSC développé dans le groupe. <https://github.com/amstremblay/TPSC>. En ligne, en cours de développement en date du 26 juin 2023. 24, 148
- [127] Karim Zantout, Steffen Backes, Aleksandar Razpopov, Dominik Lessnich et Roser Valentí. Improved effective vertices in the multiorbital two-particle self-consistent method from dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B* **107**, 235101 (2023). doi :10.1103/PhysRevB.107.235101. 24, 136



- [128] Olivier Simard et Philipp Werner. Dynamical mean field theory extension to the nonequilibrium two-particle self-consistent approach. (arXiv :2302.14134) (2023). doi :10.48550/arXiv.2302.14134. arXiv :2302.14134 [cond-mat]. 24
- [129] KS Singwi et MP Tosi. Solid state physics : Advances in research and applications. (1981). 25
- [130] Setsuo Ichimaru. Strongly coupled plasmas : high-density classical plasmas and degenerate electron liquids. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1017–1059 (1982). doi :10.1103/RevModPhys.54.1017. 25
- [131] M. R. Hedayati et G. Vignale. Ground-state energy of the one- and two-dimensional Hubbard model calculated by the method of Singwi, Tosi, Land, and Sjölander. *Phys. Rev. B* **40**, 9044–9051 (1989). doi :10.1103/PhysRevB.40.9044. 25
- [132] Fedor Šimkovic IV, Riccardo Rossi et Michel Ferrero. Two-dimensional Hubbard model at finite temperature : Weak, strong, and long correlation regimes. *Phys. Rev. Res.* **4**, 043201 (2022). doi :10.1103/PhysRevResearch.4.043201. 30
- [133] Jan Gukelberger, Li Huang et Philipp Werner. On the dangers of partial diagrammatic summations : Benchmarks for the two-dimensional Hubbard model in the weak-coupling regime. *Physical Review B* **91**(23), 235114 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.91.235114. 31
- [134] Neven Barišić, Mun K. Chan, Yuan Li, Guichuan Yu, Xudong Zhao, Martin Dressel, Ana Smontara et Martin Greven. Universal sheet resistance and revised phase diagram of the cuprate high-temperature superconductors. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **110**(30), 12235–12240 (2013). doi :10.1073/pnas.1301989110. 38
- [135] P. G. Radaelli, J. D. Jorgensen, A. J. Schultz, J. L. Peng et R. L. Greene. Evidence of apical oxygen in  $\text{Nd}_2\text{CuO}_y$  determined by single-crystal neutron diffraction. *Physical Review B* **49**(21), 15322–15326 (1994). doi :10.1103/PhysRevB.49.15322. 38, 44
- [136] Richard L. Greene, Pampa R. Mandal, Nicholas R. Poniatowski et Tarapada Sarkar. The strange metal state of the electron-doped cuprates. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **11**(1), 213–229 (2020). doi :10.1146/annurev-conmatphys-031119-050558. 38
- [137] Cyril Proust et Louis Taillefer. The remarkable underlying ground states of cuprate superconductors. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **10**(1), 409–429 (2019). doi :10.1146/annurev-conmatphys-031218-013210. 38, 40
- [138] N. P. Armitage, P. Fournier et R. L. Greene. Progress and perspectives on electron-doped cuprates. *Rev. Mod. Phys.* **82**(3), 2421–2487 (2010). doi :10.1103/RevModPhys.82.2421. 38, 66
- [139] P. Fournier.  $T'$  and infinite-layer electron-doped cuprates. *Physica C : Superconductivity and its Applications* **514**, 314–338 (2015). doi :10.1016/j.physc.2015.02.036. 38, 50
- [140] J. S. Higgins, Y. Dagan, M. C. Barr, B. D. Weaver et R. L. Greene. Role of oxygen in the electron-doped superconducting cuprates. *Physical Review B* **73**(10), 104510 (2006). doi :10.1103/PhysRevB.73.104510. 39
- [141] T. Helm, M. V. Kartsovnik, M. Bartkowiak, N. Bittner, M. Lambacher, A. Erb, J. Wosnitza et R. Gross. Evolution of the Fermi surface of the electron-doped high-temperature superconductor  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  revealed by Shubnikov–de Haas oscillations. *Physical Review Letters* **103**(15), 157002 (2009). doi :10.1103/PhysRevLett.103.157002. 39
- [142] T. Helm, M. V. Kartsovnik, I. Sheikin, M. Bartkowiak, F. Wolff-Fabris, N. Bittner, W. Biberacher, M. Lambacher, A. Erb, J. Wosnitza et R. Gross. Magnetic breakdown in the electron-doped cuprate superconductor  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  : The reconstructed Fermi surface

- survives in the strongly overdoped regime. *Physical Review Letters* **105**(24), 247002 (2010). doi :10.1103/PhysRevLett.105.247002. 39
- [143] M V Kartsovnik, T Helm, C Putzke, F Wolff-Fabris, I Sheikin, S Lepault, C Proust, D Vignolles, N Bittner, W Biberacher, A Erb, J Wosnitza et R Gross. Fermi surface of the electron-doped cuprate superconductor  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  probed by high-field magnetotransport. *New Journal of Physics* **13**(1), 015001 (2011). doi :10.1088/1367-2630/13/1/015001. 39
- [144] N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, D. L. Feng, H. Eisaki, Z.-X. Shen, P. K. Mang et al. Doping dependence of an n-type cuprate superconductor investigated by angle-resolved photoemission spectroscopy. *Physical Review Letters* **88**(25), 257001 (2002). doi :10.1103/PhysRevLett.88.257001. 40, 66
- [145] H. Matsui, K. Terashima, T. Sato, T. Takahashi, S.-C. Wang, H.-B. Yang, H. Ding, T. Uefuji et K. Yamada. Angle-resolved photoemission spectroscopy of the antiferromagnetic superconductor  $\text{Nd}_{1.87}\text{Ce}_{0.13}\text{CuO}_4$  : Anisotropic spin-correlation gap, pseudogap, and the induced quasiparticle mass enhancement. *Physical Review Letters* **94**(4), 047005 (2005). doi :10.1103/PhysRevLett.94.047005. 40
- [146] H. Matsui, T. Takahashi, T. Sato, K. Terashima, H. Ding, T. Uefuji et K. Yamada. Evolution of the pseudogap across the magnet-superconductor phase boundary of  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . *Phys. Rev. B* **75**, 224514 (2007). doi :10.1103/PhysRevB.75.224514. 40
- [147] M. Horio, T. Adachi, Y. Mori, A. Takahashi, T. Yoshida, H. Suzuki, L. C. C. Ambolode, K. Okazaki, K. Ono, H. Kumigashira, H. Anzai, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, D. Ootsuki, K. Sawada, M. Takahashi, T. Mizokawa, Y. Koike et A. Fujimori. Suppression of the antiferromagnetic pseudogap in the electron-doped high-temperature superconductor by protect annealing. *Nature Communications* **7**(1), 10567 (2016). doi :10.1038/ncomms10567. 40, 41, 71
- [148] Junfeng He, Costel R. Rotundu, Mathias S. Scheurer, Yu He, Makoto Hashimoto, Ke-Jun Xu, Yao Wang, Edwin W. Huang, Tao Jia, Sudi Chen et al. Fermi surface reconstruction in electron-doped cuprates without antiferromagnetic long-range order. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **116**(9), 3449–3453 (2019). doi :10.1073/pnas.1816121116. 40, 42
- [149] Y. Onose, Y. Taguchi, K. Ishizaka et Y. Tokura. Charge dynamics in underdoped  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  : pseudogap and related phenomena. *Physical Review B* **69**(2), 024504 (2004). doi :10.1103/PhysRevB.69.024504. 40
- [150] A Zimmers, J. M Tomczak, R. P. S. M Lobo, N Bontemps, C. P Hill, M. C Barr, Y Dagan, R. L Greene, A. J Millis et C. C Homes. Infrared properties of electron-doped cuprates : Tracking normal-state gaps and quantum critical behavior in  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . *Europhysics Letters (EPL)* **70**(2), 225–231 (2005). doi :10.1209/epl/i2004-10480-2. 40
- [151] Fabio Boschini, Marta Zonno, Elia Razzoli, Ryan P. Day, Matteo Michiardi, Berend Zwartsenberg, Pascal Nigge, Michael Schneider, Eduardo H. da Silva Neto, Andreas Erb et al. Emergence of pseudogap from short-range spin-correlations in electron-doped cuprates. *npj Quantum Materials* **5**(1), 6 (2020). doi :10.1038/s41535-020-0208-6. 41
- [152] Y. M. Vilks. Shadow features and shadow bands in the paramagnetic state of cuprate superconductors. *Physical Review B* **55**(6), 3870–3875 (1997). doi :10.1103/PhysRevB.55.3870. 41
- [153] Y. M. Vilks et A.-M. S. Tremblay. Destruction of the Fermi liquid by spin fluctuations in two dimensions. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **56**(12), 1769–1771 (1995). doi :https://doi.org/10.1016/0022-3697(95)00168-9. 41

- [154] Francesco Sperandini, Andrea Di Cicco et Maria Gazda. Short-range structural properties of  $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$  and  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$  studied by multiple-scattering EXAFS data analysis. *Physical Review B* **57**(10), 6067–6076 (1998). doi :10.1103/PhysRevB.57.6067. 43
- [155] Y. Tokura, H. Takagi et S. Uchida. A superconducting copper oxide compound with electrons as the charge carriers. *Nature* **337**(6205), 345–347 (1989). doi :10.1038/337345a0. 44
- [156] A. J. Schultz, J. D. Jorgensen, J. L. Peng et R. L. Greene. Single-crystal neutron-diffraction structures of reduced and oxygenated  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_y$ . *Physical Review B* **53**(9), 5157–5159 (1996). doi :10.1103/PhysRevB.53.5157. 44
- [157] G. Riou, P. Richard, S. Jandl, M. Poirier, P. Fournier, V. Nekvasil, S. N. Barilo et L. A. Kurnevich.  $\text{Pr}^{3+}$  crystal-field excitation study of apical oxygen and reduction processes in  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . *Physical Review B* **69**(2), 024511 (2004). doi :10.1103/PhysRevB.69.024511. 44
- [158] P. Richard, G. Riou, I. Hetel, S. Jandl, M. Poirier et P. Fournier. Role of oxygen nonstoichiometry and the reduction process on the local structure of  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . *Physical Review B* **70**(6), 064513 (2004). doi :10.1103/PhysRevB.70.064513. 44
- [159] P. Richard, G. Riou, S. Jandl, M. Poirier, P. Fournier, V. Nekvasil et M. Diviš. Role of apical oxygen in 2-1-4 electron-doped superconductors. *Physica C : Superconductivity* **408–410**, 830–831 (2004). doi :10.1016/j.physc.2004.03.150. 44
- [160] Marie-Eve Boulanger, Gaël Grissonnanche, Étienne Lefrançois, Adrien Gourgout, Ke-Jun Xu, Zhi-Xun Shen, Richard L. Greene et Louis Taillefer. Thermal Hall conductivity of electron-doped cuprates. *Phys. Rev. B* **105**, 115101 (2022). doi :10.1103/PhysRevB.105.115101. 44
- [161] Jie Lin et A. J. Millis. Optical and Hall conductivities of a thermally disordered two-dimensional spin-density wave : Two-particle response in the pseudogap regime of electron-doped high-Tc superconductors. *Physical Review B* **83**(12), 125108 (2011). doi :10.1103/PhysRevB.83.125108. 44, 49, 60
- [162] P. A. Lee, T. M. Rice et P. W. Anderson. Fluctuation effects at a Peierls transition. *Physical Review Letters* **31**(7), 462–465 (1973). doi :10.1103/PhysRevLett.31.462. 44
- [163] MV Sadovskii. Exact solution for the density of electronic states in a model of a disordered system. *Soviet Physics-JETP* **50**(5), 989–994 (1979). 44
- [164] Jörg Schmalian, David Pines et Branko Stojković. Microscopic theory of weak pseudogap behavior in the underdoped cuprate superconductors : General theory and quasiparticle properties. *Physical Review B* **60**(1), 667–686 (1999). doi :10.1103/PhysRevB.60.667. 44
- [165] Oleg Tchernyshyov. Pseudogap in one dimension. *Physical Review B* **59**(2), 1358–1368 (1999). doi :10.1103/PhysRevB.59.1358. 44
- [166] H. Alloul, J. Bobroff, M. Gabay et P. J. Hirschfeld. Defects in correlated metals and superconductors. *Reviews of Modern Physics* **81**(1), 45–108 (2009). doi :10.1103/RevModPhys.81.45. 44
- [167] V. Janis, M. Ulmke et D. Vollhardt. Disorder vs. interaction in the Hubbard model : Phase diagram in infinite dimensions. *Europhysics Letters (EPL)* **24**(4), 287–292 (1993). doi :10.1209/0295-5075/24/4/009. 44
- [168] Avinash Singh, Martin Ulmke et Dieter Vollhardt. Disorder-enhanced delocalization and local-moment quenching in a disordered antiferromagnet. *Physical Review B* **58**(13), 8683–8693 (1998). doi :10.1103/PhysRevB.58.8683. 44

- [169] K. Byczuk, W. Hofstetter, U. Yu et D. Vollhardt. Correlated electrons in the presence of disorder. *The European Physical Journal Special Topics* **180**(1), 135–151 (2009). doi :10.1140/epjst/e2010-01215-2. 44
- [170] N Trivedi, P J H Denteneer, D Heidarian et R T Scalettar. Effect of interactions, disorder and magnetic field in the Hubbard model in two dimensions. *Pramana* **64**(6), 1051–1061 (2005). doi :10.1007/BF02704167. 44
- [171] W. Chen, Brian M. Andersen et P. J. Hirschfeld. Theory of resistivity upturns in metallic cuprates. *Physical Review B* **80**(13), 134518 (2009). doi :10.1103/PhysRevB.80.134518. 44
- [172] Hiroshi Kontani et Masanori Ohno. Effect of a nonmagnetic impurity in a nearly antiferromagnetic Fermi liquid : Magnetic correlations and transport phenomena. *Physical Review B* **74**(1), 014406 (2006). doi :10.1103/PhysRevB.74.014406. 44
- [173] Hiroshi Kontani. Anomalous transport phenomena in Fermi liquids with strong magnetic fluctuations. *Reports on Progress in Physics* **71**(2), 026501 (2008). doi :10.1088/0034-4885/71/2/026501. 44
- [174] A. Rosch. Interplay of disorder and spin fluctuations in the resistivity near a quantum critical point. *Phys. Rev. Lett.* **82**(21), 4280–4283 (1999). doi :10.1103/PhysRevLett.82.4280. 44, 56
- [175] M. T. Béal-Monod. Paramagnon versus lowest-order Hartree-Fock contributions in disordered nearly magnetic two- and three-dimensional itinerant fermion systems and the renormalization of the Stoner enhancement by disorder. *Physical Review B* **33**(11), 7600–7607 (1986). doi :10.1103/PhysRevB.33.7600. 44
- [176] B. L. Altshuler, A. G. Aronov et P. A. Lee. Interaction effects in disordered Fermi systems in two dimensions. *Physical Review Letters* **44**(19), 1288–1291 (1980). doi :10.1103/PhysRevLett.44.1288. 44
- [177] M. T. Béal-Monod. Important modifications near a magnetic instability in the particle-hole propagator of weakly localized two-dimensional fermion systems. *Physical Review B* **31**(5), 2764–2772 (1985). doi :10.1103/PhysRevB.31.2764. 44
- [178] G. Rickayzen. *Green's Functions and Condensed Matter*. Materials Science Series. Academic Press, (1980). <https://books.google.ca/books?id=cZnvAAAAMAAJ>. 45, 46
- [179] Pypade. [https://www.physique.usherbrooke.ca/code\\_source/published\\_source\\_codes.html](https://www.physique.usherbrooke.ca/code_source/published_source_codes.html). En ligne, accès le 21 juin 2023. 49
- [180] H. J. Vidberg et J. W. Serene. Solving the Eliashberg equations by means of N-point Padé approximants. *Journal of Low Temperature Physics* **29**(3), 179–192 (1977). doi :10.1007/BF00655090. 49
- [181] Toni Helm. *Electronic Properties of Electron-Doped Cuprate Superconductors Probed by High-Field Magnetotransport*. Thèse de Doctorat, Technische Universität München, (2013). 49
- [182] P. Fournier, P. Mohanty, E. Maiser, S. Darzens, T. Venkatesan, C. J. Lobb, G. Czjzek, R. A. Webb et R. L. Greene. Insulator-metal crossover near optimal doping in  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  : Anomalous normal-state low temperature resistivity. *Physical Review Letters* **81**(21), 4720–4723 (1998). doi :10.1103/PhysRevLett.81.4720. 50
- [183] M. Horio, K. P. Kramer, Q. Wang, A. Zaidan, K. von Arx, D. Sutter, C. E. Matt, Y. Sassa, N. C. Plumb, M. Shi, A. Hanff, S. K. Mahatha, H. Bentmann, F. Reinert, S. Rohlf, F. K. Diekmann, J. Buck, M. Kalläne, K. Rossnagel, E. Rienks, V. Granata, R. Fittipaldi, A. Vecchione, T. Ohgi, T. Kawamata, T. Adachi, Y. Koike, A. Fujimori, M. Hoesch et J. Chang. Oxide



- Fermi liquid universality revealed by electron spectroscopy. *Phys. Rev. B* **102**, 245153 (2020). doi :10.1103/PhysRevB.102.245153. 50, 66, 68, 71, 77, 79, 80, 85
- [184] Sebastien Roy. *Le modele de Hubbard a faible couplage - thermodynamique et phenomenes critiques*. Thèse de Doctorat, Universite de Sherbrooke, (2007). 53
- [185] Dominic Bergeron, Debanjan Chowdhury, Matthias Punk, Subir Sachdev et A.-M. S. Tremblay. Breakdown of Fermi liquid behavior at the  $(\pi, \pi) = 2k_F$  spin-density wave quantum-critical point : The case of electron-doped cuprates. *Physical Review B* **86**(15), 155123 (2012). doi :10.1103/PhysRevB.86.155123. 57, 66
- [186] C. Bourbonnais et A. Sedeki. Link between antiferromagnetism and superconductivity probed by nuclear spin relaxation in organic conductors. *Phys. Rev. B* **80**, 085105 (2009). doi :10.1103/PhysRevB.80.085105. 64
- [187] J. A. N. Bruin, H. Sakai, R. S. Perry et A. P. Mackenzie. Similarity of scattering rates in metals showing T-linear resistivity. *Science* **339**(6121), 804–807 (2013). doi :10.1126/science.1227612. 65
- [188] A. Legros, S. Benhabib, W. Tabis, F. Laliberté, M. Dion, M. Lizaire, B. Vignolle, D. Vignolles, H. Raffy, Z. Z. Li et et al. Universal T-linear resistivity and planckian dissipation in overdoped cuprates. *Nature Physics* **15**(2), 142–147 (2019). doi :10.1038/s41567-018-0334-2. 65
- [189] Patrick A. Lee, Naoto Nagaosa et Xiao-Gang Wen. Doping a Mott insulator : Physics of high-temperature superconductivity. *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17–85 (2006). doi :10.1103/RevModPhys.78.17. 65
- [190] Hilbert v. Löhneysen, Achim Rosch, Matthias Vojta et Peter Wölfle. Fermi-liquid instabilities at magnetic quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.* **79**(3), 1015–1075 (2007). doi :10.1103/RevModPhys.79.1015. 65
- [191] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams et A. E. Ruckenstein. Phenomenology of the normal state of Cu-O high-temperature superconductors. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1996–1999 (1989). doi :10.1103/PhysRevLett.63.1996. 65
- [192] N. J. C. Ingle, K. M. Shen, F. Baumberger, W. Meevasana, D. H. Lu, Z.-X. Shen, A. Damascelli, S. Nakatsuji, Z. Q. Mao, Y. Maeno et et al. Quantitative analysis of Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> angle-resolved photoemission spectra : Many-body interactions in a model Fermi liquid. *Physical Review B* **72**(20), 205114 (2005). doi :10.1103/PhysRevB.72.205114. 66
- [193] T. Kiss, A. Chainani, H.M. Yamamoto, T. Miyazaki, T. Akimoto, T. Shimojima, K. Ishizaka, S. Watanabe, C.-T. Chen, A. Fukaya et et al. Quasiparticles and Fermi liquid behaviour in an organic metal. *Nature Communications* **3**(1), 1089 (2012). doi :10.1038/ncomms2079. 66
- [194] T. J. Reber, X. Zhou, N. C. Plumb, S. Parham, J. A. Waugh, Y. Cao, Z. Sun, H. Li, Q. Wang, J. S. Wen et et al. A unified form of low-energy nodal electronic interactions in hole-doped cuprate superconductors. *Nature Communications* **10**(1), 5737 (2019). doi :10.1038/s41467-019-13497-4. 66
- [195] J. Chang, M. Mansson, S. Pailhès, T. Claesson, O. J. Lipscombe, S. M. Hayden, L. Patthey, O. Tjernberg et J. Mesot. Anisotropic breakdown of Fermi liquid quasiparticle excitations in overdoped La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub>. *Nature Communications* **4**(1), 2559 (2013). doi :10.1038/ncomms3559. 66, 68, 71, 79, 85
- [196] Erez Berg, Samuel Lederer, Yoni Schattner et Simon Trebst. Monte Carlo Studies of Quantum Critical Metals. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **10**(1), 63–84 (2019). doi :10.1146/annurev-conmatphys-031218-013339. 66

- [197] Avraham Klein, Andrey V. Chubukov, Yoni Schattner et Erez Berg. Normal state properties of quantum critical metals at finite temperature. *Phys. Rev. X* **10**, 031053 (2020). doi :10.1103/PhysRevX.10.031053. 66
- [198] Subir Sachdev, Andrey V. Chubukov et Alexander Sokol. Crossover and scaling in a nearly antiferromagnetic Fermi liquid in two dimensions. *Phys. Rev. B* **51**, 14874–14891 (1995). doi :10.1103/PhysRevB.51.14874. 66
- [199] R. Hlubina et T. M. Rice. Erratum : Resistivity as a function of temperature for models with hot spots on the Fermi surface. *Phys. Rev. B* **52**, 13043–13043 (1995). doi :10.1103/PhysRevB.52.13043.3. 66
- [200] Hilbert v. Löhneysen, Achim Rosch, Matthias Vojta et Peter Wölfle. Fermi-liquid instabilities at magnetic quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1015–1075 (2007). doi :10.1103/RevModPhys.79.1015. 66
- [201] D. N. Basov, Richard D. Averitt, Dirk van der Marel, Martin Dressel et Kristjan Haule. Electrodynamics of correlated electron materials. *Reviews of Modern Physics* **83**(2), 471–541 (2011). doi :10.1103/RevModPhys.83.471. 66
- [202] Christopher Hodges, Henrik Smith et J. W. Wilkins. Effect of Fermi surface geometry on electron-electron scattering. *Physical Review B* **4**(2), 302–311 (1971). doi :10.1103/PhysRevB.4.302. 69
- [203] V. Hankevych, B. Kyung, A.-M. Daré, D. Sénéchal et A.-M.S. Tremblay. Strong- and weak-coupling mechanisms for pseudogap in electron-doped cuprates. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **67**(1–3), 189–192 (2006). doi :10.1016/j.jpcs.2005.10.121. 79, 85
- [204] Cédric Weber, Kristjan Haule et Gabriel Kotliar. Apical oxygens and correlation strength in electron- and hole-doped copper oxides. *Physical Review B* **82**(12), 125107 (2010). doi :10.1103/PhysRevB.82.125107. 79, 85, 122, 136
- [205] M. J. Rice. Electron-electron scattering in transition metals. *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1439–1441 (1968). doi :10.1103/PhysRevLett.20.1439. 79
- [206] K. Kadowaki et S. B. Woods. Universal relationship of the resistivity and specific heat in heavy-fermion compounds. *Solid State Communications* **58**(8), 507–509 (1986). doi :10.1016/0038-1098(86)90785-4. 79
- [207] A. C. Jacko, J. O. Fjærestad et B. J. Powell. A unified explanation of the Kadowaki–Woods ratio in strongly correlated metals. *Nature Physics* **5**(6), 422–425 (2009). doi :10.1038/nphys1249. 79, 80, 82, 84
- [208] Leo P. Kadanoff et Paul C. Martin. Theory of many-particle systems. ii. superconductivity. *Physical Review* **124**(3), 670–697 (1961). doi :10.1103/PhysRev.124.670. 91
- [209] Qijin Chen, Jelena Stajic, Shina Tan et K. Levin. BCS–BEC crossover : From high temperature superconductors to ultracold superfluids. *Physics Reports* **412**(1), 1–88 (2005). doi :10.1016/j.physrep.2005.02.005. 91
- [210] Rufus Boyack, Qijin Chen, A. A. Varlamov et K. Levin. Cuprate diamagnetism in the presence of a pseudogap : Beyond the standard fluctuation formalism. *Physical Review B* **97**(6), 064503 (2018). doi :10.1103/PhysRevB.97.064503. 91
- [211] Pierre Bénard, Liang Chen et A.-M. S. Tremblay. Magnetic neutron scattering from two-dimensional lattice electrons : The case of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . *Physical Review B* **47**(22), 15217–15241 (1993). doi :10.1103/PhysRevB.47.15217. 97

- [212] Thereza Paiva, Carey Huscroft, A K McMahan et R T Scalettar. Local moment and specific heat in the Hubbard model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 3 (2001). 101
- [213] C Kusko, R S Markiewicz, M Lindroos et A Bansil. Fermi surface evolution and collapse of the Mott pseudogap in  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ . *Physical Review B*, 4 (2002). 103
- [214] J. M. Tranquada, S. M. Heald, A. Moodenbaugh et M. Suenaga. X-ray absorption studies of  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba},\text{Sr})_x\text{CuO}_4$  superconductors. *Physical Review B* 35(13), 7187–7190 (1987). doi :10.1103/PhysRevB.35.7187. 120
- [215] Jérôme Leblanc. Modèle de Hubbard à 3 bandes via TPSC, (2022). Rapport de stage. 121, 122
- [216] Takashi Yanagisawa, Mitake Miyazaki et Kunihiro Yamaji. Incommensurate antiferromagnetism coexisting with superconductivity in two-dimensional d-p model. *Journal of the Physical Society of Japan* 78(1), 013706 (2009). doi :10.1143/JPSJ.78.013706. 122
- [217] C. Weber, C. Yee, K. Haule et G. Kotliar. Scaling of the transition temperature of hole-doped cuprate superconductors with the charge-transfer energy. *EPL (Europhysics Letters)* 100(3), 37001 (2012). doi :10.1209/0295-5075/100/37001. 122, 136
- [218] L. Fratino, P. Sémon, G. Sordi et A.-M. S. Tremblay. Pseudogap and superconductivity in two-dimensional doped charge-transfer insulators. *Physical Review B* 93(24), 245147 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.93.245147. 122, 135
- [219] S. S. Dash et D. Sénéchal. Pseudogap transition within the superconducting phase in the three-band Hubbard model. *Physical Review B* 100(21), 214509 (2019). doi :10.1103/PhysRevB.100.214509. 122
- [220] M. Zegrodnik, A. Biborski, M. Fidrysiak et J. Spalek. Superconductivity in the three-band model of cuprates : Variational wave function study and relation to the single-band case. *Physical Review B* 99(10), 104511 (2019). doi :10.1103/PhysRevB.99.104511. 122
- [221] Nicolas Kowalski, Sidhartha Shankar Dash, Patrick Sémon, David Sénéchal et André-Marie Tremblay. Oxygen hole content, charge-transfer gap, covalency, and cuprate superconductivity. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 118(40), e2106476118 (2021). doi :10.1073/pnas.2106476118. 122
- [222] M. Zegrodnik, A. Biborski, M. Fidrysiak et J. Spalek. Superconductivity in the three-band model of cuprates : nodal direction characteristics and influence of intersite interactions. *Journal of Physics : Condensed Matter* 33(41), 415601 (2021). doi :10.1088/1361-648X/abcff6. 122
- [223] Peizhi Mai, Giovanni Balduzzi, Steven Johnston et Thomas A. Maier. Orbital structure of the effective pairing interaction in the high-temperature superconducting cuprates. *npj Quantum Materials* 6(11), 1–5 (2021). doi :10.1038/s41535-021-00326-5. 122
- [224] Y. F. Kung, C.-C. Chen, Yao Wang, E. W. Huang, E. A. Nowadnick, B. Moritz, R. T. Scalettar, S. Johnston et T. P. Devereaux. Characterizing the three-orbital Hubbard model with determinant quantum Monte Carlo. *Physical Review B* 93(15), 155166 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.93.155166. 122
- [225] Zhi-Hao Cui, Chong Sun, Ushnish Ray, Bo-Xiao Zheng, Qiming Sun et Garnet Kin-Lic Chan. Ground-state phase diagram of the three-band Hubbard model from density matrix embedding theory. *Physical Review Research* 2(4), 043259 (2020). doi :10.1103/PhysRevResearch.2.043259. arXiv : 2001.04951. 122

- [226] Ara Go et Andrew J. Millis. Spatial correlations and the insulating phase of the high- $T_c$  cuprates : Insights from a configuration-interaction-based solver for dynamical mean field theory. *Physical Review Letters* **114**(1), 016402 (2015). doi :[10.1103/PhysRevLett.114.016402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.016402). 122
- [227] Luca de' Medici, Xin Wang, Massimo Capone et Andrew J. Millis. Correlation strength, gaps, and particle-hole asymmetry in high- $T_c$  cuprates : A dynamical mean field study of the three-band copper-oxide model. *Physical Review B* **80**(5), 054501 (2009). doi :[10.1103/PhysRevB.80.054501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.054501). 122
- [228] Xin Wang, Luca de' Medici et Andrew J. Millis. Role of oxygen-oxygen hopping in the three-band copper-oxide model : Quasiparticle weight, metal insulator and magnetic phase boundaries, gap values, and optical conductivity. *Physical Review B* **83**(9), 094501 (2011). doi :[10.1103/PhysRevB.83.094501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.094501). 122
- [229] Damian Rybicki, Michael Jurkutat, Steven Reichardt, Czeslaw Kapusta et Jürgen Haase. Perspective on the phase diagram of cuprate high-temperature superconductors. *Nature Communications* **7**(11), 11413 (2016). doi :[10.1038/ncomms11413](https://doi.org/10.1038/ncomms11413). 122
- [230] Wei Ruan, Cheng Hu, Jianfa Zhao, Peng Cai, Yingying Peng, Cun Ye, Runze Yu, Xintong Li, Zhenqi Hao, Changqing Jin, Xingjiang Zhou, Zheng-Yu Weng et Yayu Wang. Relationship between the parent charge transfer gap and maximum transition temperature in cuprates. *Science Bulletin* **61**(23), 1826–1832 (2016). doi :<https://doi.org/10.1007/s11434-016-1204-x>. 122
- [231] Shane M. O'Mahony, Wangping Ren, Weijiong Chen, Yi Xue Chong, Xiaolong Liu, H. Eisaki, S. Uchida, M. H. Hamidian et J. C. Séamus Davis. On the electron pairing mechanism of copper-oxide high temperature superconductivity. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **119**(37), e2207449119 (2022). doi :[10.1073/pnas.2207449119](https://doi.org/10.1073/pnas.2207449119). 122
- [232] Olivier Parcollet, Michel Ferrero, Thomas Ayrat, Hartmut Hafermann, Igor Krivenko, Laura Messio et Priyanka Seth. TRIQS : A toolbox for research on interacting quantum systems. *Computer Physics Communications* **196**, 398 – 415 (2015). doi :[10.1016/j.cpc.2015.04.023](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.04.023). 137
- [233] Priyanka Seth, Igor Krivenko, Michel Ferrero et Olivier Parcollet. TRIQS/CTHYB : A continuous-time quantum Monte Carlo hybridisation expansion solver for quantum impurity problems. *Computer Physics Communications* **200**, 274 – 284 (2016). doi :[10.1016/j.cpc.2015.10.023](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.10.023). 137
- [234] Philipp Werner, Armin Comanac, Luca de Medici, Matthias Troyer et Andrew J. Millis. Continuous-time solver for quantum impurity models. *Phys. Rev. Lett.* **97**(7), 076405 (2006). doi :[10.1103/PhysRevLett.97.076405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.076405). 137
- [235] Emanuel Gull, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer et Philipp Werner. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349–404 (2011). doi :[10.1103/RevModPhys.83.349](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.349). 137
- [236] Hiroshi Shinaoka, Junya Otsuki, Masayuki Ohzeki et Kazuyoshi Yoshimi. Compressing Green's function using intermediate representation between imaginary-time and real-frequency domains. *Phys. Rev. B* **96**, 035147 (2017). doi :[10.1103/PhysRevB.96.035147](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.035147). 137
- [237] Jia Li, Markus Wallerberger, Naoya Chikano, Chia-Nan Yeh, Emanuel Gull et Hiroshi Shinaoka. Sparse sampling approach to efficient ab initio calculations at finite temperature. *Phys. Rev. B* **101**, 035144 (2020). doi :[10.1103/PhysRevB.101.035144](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.035144). 137, 147

- [238] Markus Wallerberger, Samuel Badr, Shintaro Hoshino, Sebastian Huber, Fumiya Kakizawa, Takashi Koretsune, Yuki Nagai, Kosuke Nogaki, Takuya Nomoto, Hitoshi Mori, Junya Otsuki, Soshun Ozaki, Thomas Plaikner, Rihito Sakurai, Constanze Vogel, Niklas Witt, Kazuyoshi Yoshimi et Hiroshi Shinaoka. sparse-ir : Optimal compression and sparse sampling of many-body propagators. *SoftwareX* **21**, 101266 (2023). doi :[10.1016/j.softx.2022.101266](https://doi.org/10.1016/j.softx.2022.101266). 137