# Guide d'utilisation des programmes de M. François Lemay

Jean-Sébastien Landry

11 décembre 2000

# 1 Introduction

Ce guide se veut un simple outil facilitant l'utilisation de certains programmes développés par M. François Lemay au cours de ses études de doctorat. Pour réellement comprendre ces programmes, il est nécessaire de se référer à la thèse de doctorat de M. Lemay, intitulée "Des propriétés de l'état normal du modèle de Hubbard bidimensionnel" et plus particulièrement aux chapitres 3, 4 5 et 6. Dans le présent travail, les équations sont donc en général présentées sans aucune justification.

## 1.1 Présentation générale des programmes

Les programmes que nous présentons ici sont divisés en deux classes. Les programmes "self" permettent de calculer, pour une bande de liaison forte, la partie imaginaire de la susceptibilité des électrons libres ainsi que les parties réelle et imaginaire de la self-énergie des électrons, ces derniers résultats étant obtenus à partir de la théorie des perturbations au second ordre. Les programmes "vt" permettent quant à eux de calculer les mêmes quantités que les programmes "self", ainsi que la partie réelle de la susceptibilité des électrons libres (encore une fois pour une bande de liaison forte). Cependant, la self-énergie est calculée en suivant une approche développée par MM. Yury Vilk et André-Marie Tremblay. Pour les deux classes de programmes, il existe deux versions: celle sans saut au second voisin ("self_tplf.f90" et "vt_self.f90") et celle avec saut au second voisin ("self_tplf2.f90" et "vt_self2.f90").

Pour tous ces programmes, il n'y a pas de fichier d'entrée. L'usager doit donc aller modifier les valeurs des différents paramètres dans le programme principal et recompiler le programme avant l'utilisation. Les différents paramètres ajustables sont la température, le remplissage, la valeur de l'interaction de Hubbard et la valeur du saut au second voisin (s'il y a lieu). Notez que l'utilisateur doit également choisir le vecteur d'onde pour lequel il veut obtenir la self-énergie des électrons. L'écriture des fichiers de résultats se fait directement dans le programme principal et l'usager est invité à modifier cette partie si besoin il y a.

Il y a cependant dans les programmes plusieurs quantités qui ont été déterminées à la suite d'une utilisation soutenue de ces derniers et auxquelles il est fortement recommandé de ne pas toucher (critère de tolérance pour décider de l'égalité numérique de deux résultats, valeur exacte de $\eta$ dans la limite $\eta \to 0$, etc.). Il est conseillé de prendre 120 fréquences réelles (variable "nbw") et 120 fréquences de Matsubara (variable "nbfmb") pour la susceptibilité, ainsi que 500 fréquences réelles (variable "snbw") pour la self-énergie et 240 vecteurs d'onde (variable "nbk"). Des valeurs plus grandes dépasseraient les ressources actuelles en mémoire de la grappe de calcul Linux, tandis que des valeurs plus petites conduiraient à des résultats moins représentatifs.

Il est important de réaliser que même si le modèle de Hubbard concerne un réseau discret, l'approche de M. Lemay n'est rigoureusement valide qu'à la limite thermodynamique. Ainsi, les doubles sommes sur $\mathbf{k}$ sont généralement remplacées par des intégrales doubles. Il est néanmoins nécessaire de choisir un certain nombre "nbk" de vecteurs d'onde pour procéder à l'évaluation numérique de ces intégrales doubles. De plus, les programmes de M. Lemay ne peuvent être utilisés que pour étudier des réseaux carrés.

## 1.2 Conventions et notations utilisées

Comme c'est généralement le cas lors d'études du modèle de Hubbard, on assigne par convention la valeur numérique "1" aux différentes constantes suivantes: a (le pas du réseau), $t$ (l'intégrale de saut du hamiltonien de Hubbard), $\hbar$ (la constante de Planck) et k$_B$ (la constante de Boltzmann).

La notation employée dans ce travail et dans la thèse de M. Lemay pour les différents paramètres est elle aussi habituelle. $U$ est l'interaction du hamiltonien de Hubbard, $n$ est le remplissage, $T$ est la température, $\mu$ est le potentiel chimique et $\mathbf{q}$=(q$_x$,q$_y$) de même que $\mathbf{k}$=(k$_x$,k$_y$) sont des vecteurs d'onde. De plus, lorsqu'un symbole est affublé d'un zéro en exposant (" $^0$ "), cela fait généralement référence au cas sans interaction, i.e. U=0. Le symbole " $'$ " fait référence à la partie réelle d'une quantité physique tandis que le symbole " $''$ " fait référence à sa partie imaginaire. Cela ne s'applique évidemment pas pour des variables comme la fréquence $\omega'$ ou le saut au second voisin $t'$. Les notations utilisées par M. Lemay dans ces programmes sont inspirées de celles que nous venons de présenter. La correspondance est donc très facile à établir. La seule différence est que dans les programmes, on travaille généralement avec B=1/temp (l'inverse de la température) plutôt qu'avec $T$.

# 2 Programme "self" sans saut au second voisin ($t'$=0)

Ce programme commence par calculer la partie imaginaire de la susceptibilité des électrons libres en fonction de la fréquence réelle pour un vecteur d'onde donné. À partir de ce résultat, on calcule pour ce même vecteur d'onde la partie imaginaire de la self-énergie des électrons en fonction de la fréquence. Finalement, on utilise ce dernier résultat pour calculer la partie réelle de la self-énergie des électrons en fonction de la fréquence, toujours pour le même vecteur d'onde.

## 2.1 Équations principales

La partie imaginaire de la self-énergie se calcule à l'aide de la formule suivante:

$$\Sigma''(\mathbf{k},\omega) = -\frac{U^2}{8\pi^2}\int d^2\mathbf{q}\chi^{0''}(\mathbf{q}, \xi^0_{\mathbf{k+q}} - \omega)[n_B(\xi^0_{\mathbf{k+q}} - \omega) + f(\xi^0_{\mathbf{k+q}})] \tag{1}$$

tandis que la partie réelle de la self-énergie se calcule à partir de:

$$\Sigma'(\mathbf{k},\omega) = \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\pi\omega'}[\Sigma''(\mathbf{k}, \omega + \omega') - \Sigma''(\mathbf{k}, \omega - \omega')] \tag{2}$$

qui s'obtient par un changement de variable à partir des relations de Kramers-Kronig. Notez en passant que le poids spectral A($\mathbf{k}$, $\omega$) s'obtient directement de ces deux quantités à l'aide de la relation:

$$A(\mathbf{k},\omega) = \frac{-2\Sigma''(\mathbf{k},\omega)}{(\omega - \xi_\mathbf{k} - \Sigma'(\mathbf{k},\omega))^2 + (\Sigma''(\mathbf{k},\omega))^2} \tag{3}$$

Dans l'équation (1) apparaît la partie imaginaire de la susceptibilité des électrons libres, qui est évaluée numériquement grâce à l'expression suivante:

$$\chi^{0''}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{8\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} \frac{[f(\xi^0_{\mathbf{k\text{-}q/2}}) - f(\xi^0_{\mathbf{k-q/2}} + \omega)]_{k_y=k_y^0}}{\sqrt{\sin^2(q_y/2) - (\omega/4 - \sin(k_x)\sin(q_x/2))^2}} \tag{4}$$

avec la condition suivante pour $k_y^0$, qui provient de la conservation de l'énergie:

$$\sin(k_y^0) = \frac{\omega/4 - \sin(k_{x)} \sin(q_x/2)}{\sin(q_y/2)} \tag{5}$$

Dans le calcul de l'équation (4), on arrête l'intégration lorsque le radical devient imaginaire. Dans les équations précédentes, nous avons utilisé les expressions suivantes:

$$f(\omega) \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \tag{6}$$

$$n_B(\omega) \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1} \tag{7}$$

$$\xi_{\mathbf{k}}^0 \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^0 \tag{8}$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}}$ est la relation de dispersion des électrons libres (-2cos($k_x$)- 2cos($k_y$) en l'absence de saut au second voisin) et $\mu^0$ le potentiel chimique calculé à U=0.

## 2.2 Description du programme

L'exécution de ce programme se déroule en 6 grandes étapes principales, dont une (la quatrième) est optionnelle.

1. Calcul de $\mu^0$ : une fois que le remplissage a été choisi, il est possible de déterminer $\mu^0$ à partir de l'équation suivante:

$$n = \sum_{\sigma=\pm1} \int f(\xi_{\mathbf{k}}^0) \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tag{9}$$

   **Sous-routine concernée :** CALCUL_MU0
   **Fonctions concernées :** EQ_MU0, ZBRENT

2. Construction des tableaux : on construit les tableaux xtab et ytab, conçus de façon à ce que $q_x = \pi - x^2$ (avec $q_x$ variant de 0 à $\pi$) et $q_y = q_x - y^2$ (avec $q_y$ variant de 0 à $q_x$). Ainsi, on ne travaille que dans le premier octant de la zone de Brillouin et le nombre de vecteur d'onde est maximisé dans les régions d'intérêt (i.e. la diagonale et les points (0,0) et ($\pi$,0)).

   Ensuite, on construit les tableaux xmat et ymat, qui contiennent les poids d'intégration selon la méthode de Simpson. Puis, on construit le tableau wtab, qui contient, pour chaque vecteur d'onde, les fréquences réelles auxquelles $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega)$ sera calculée. Notez que la répartition des fréquences n'est pas uniforme, mais est plutôt effectuée de façon à ce qu'il y ait davantage de points près des fréquences singulières, données par l'expression:

$$\omega_s = 4|\sin(|q_x|/2) - \sin(|q_y|/2)| \tag{10}$$

La position de la fréquence de coupure $\omega_c$ influence également la répartition des fréquences. Cette dernière est définie comme:

$$\omega_c \equiv 4[|\sin(q_x/2)| + |\sin(q_y/2)|] \tag{11}$$

Finalement, on construit le tableau swtab des fréquences réelles auxquelles la self-énergie sera calculée. Cette fois, on maximise le nombre de fréquences autour de $\omega = 0$.
**Sous-routine concernée :** CONSTR_WTAB

3. Calcul de $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega)$ : on construit un tableau contenant les résultats pour chaque vecteur d'onde et pour chaque fréquence. Premièrement, il s'agit de déterminer les valeurs singulières de $k_x$ (notées $k_x^s$) pour lesquelles le dénominateur de l'équation (4) est nul. Deuxièmement, on divise l'intervalle d'intégration entre les différents $k_x^s$. Troisièmement, on subdivise chacun des intervalles ainsi obtenus en deux et l'on appelle la sous-routine RKSING_BINF (RKSING_BSUP) pour effectuer l'intégration sur la section de l'intervalle où la singularité est située à la borne inférieure (supérieure). Le schéma d'intégration utilisé est un Runge-Kutta et l'argument de l'intégrale dans l'équation (4) est retourné par la sous-routine ARG_IMCHI0.
**Sous-routines concernées :** CONSTR_IMCHI0TAB, IMCHI0, RKSING_BINF, RKSING_BSUP.
**Fonction concernée :** ARG_IMCHI0
4. Calcul de $k_F^0$ (optionnel) : l'usager peut décider du vecteur d'onde pour lequel il est intéressé d'obtenir les résultats sur la self-énergie des électrons. Cependant, si ce vecteur d'onde est un de ceux se trouvant à la surface de Fermi à U=0, il n'est généralement pas évident de déterminer sa valeur. La sous-routine CALCUL_KF0 permet de trouver ce vecteur d'onde $k_F^0$ se trouvant à un angle $\theta$ dans la zone de Brillouin. La valeur de $\theta$ est choisie par l'utilisateur et $\theta$=0 correspond à $k_y$=0. La valeur de $k_F^0$ s'obtient en résolvant l'équation $\xi^0_{\mathbf{k}_F^0}$=0.
**Sous-routine concernée :** CALCUL_KF0
**Fonctions concernées :** EQ_MU0, ZBRENT

5. Calcul de $\Sigma''(\mathbf{k},\omega)$ : pour le vecteur d'onde choisi et pour chaque fréquence se trouvant dans swtab, on effectue l'intégrale sur tous les vecteurs d'onde pouvant être obtenus des tableaux xtab et ytab. Il faut cependant se rappeler que ces tableaux n'ont été construits que pour le premier octant de la zone de Brillouin; c'est pourquoi il est nécessaire d'utiliser les symétries appropriées pour être en mesure d'effectuer la double intégrale de l'équation (1) sur tous les vecteurs d'onde. Autre point valant la peine d'être mentionné, les valeurs préalablement calculées pour $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega)$ ne sont pas nécessairement celles qui interviendront dans le calcul de $\Sigma''(\mathbf{k},\omega)$. On procède alors par interpolation linéaire pour obtenir les valeurs de $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \xi^0_{\mathbf{k+q}} - \omega)$ nécessaires à l'évaluation de l'équation (1).
**Sous-routines concernées :** CONSTR_IMSELFTAB, IMSELF
**Fonctions concernées :** ARG_IMSELF, INTER_IMCHI0

6. Calcul de $\Sigma'(\mathbf{k},\omega)$ : pour le vecteur d'onde choisi et pour chaque fréquence se trouvant dans swtab, on obtient $\Sigma'(\mathbf{k},\omega)$ grâce à l'équation (2). Tout comme précédemment, il est en général nécessaire de procéder à une interpolation linéaire des résultats obtenus pour $\Sigma''(\mathbf{k},\omega)$ de façon à obtenir $\Sigma''(\mathbf{k}, \omega + \omega')$

et $\Sigma''(\mathbf{k}, \omega - \omega')$ sur tout l'intervalle d'intégration. Autre subtilité, le changement de variable $\omega'$=t$^2$ (d'où d$\omega'$=2tdt) est effectué de façon à annuler l'argument de l'intégrale quand t = 0.
**Sous-routines concernées :** CONSTR_RESELFTAB, RESELF
**Fonctions concernées :** ARG_RESELF, INTER_IMSELF

# 3 Programme "vt" sans saut au second voisin ($t'$=0)

Ce programme commence par calculer la susceptibilité des électrons libres en fonction du vecteur d'onde et de la fréquence imaginaire. À partir du résultat obtenu, il est possible de déterminer la valeur des constantes de couplage effectives U$_{sp}$ et U$_{ch}$, ainsi que la valeur de la double occupation. Puis, on procède au calcul des parties réelle et imaginaire de la susceptibilité des électrons libres en fonction du vecteur d'onde et de la fréquence réelle. Cela nous permet d'obtenir la partie imaginaire des susceptibilités de spin et de charge. Finalement, ces dernières nous permettent de calculer les parties réelle et imaginaire de la self-énergie des électrons libres dans le cadre de l'approche de Vilk-Tremblay.

## 3.1 Équations principales

Dans le cadre de l'approche Vilk-Tremblay, la partie imaginaire de la self-énergie s'évalue à partir de:

$$\Sigma''(\mathbf{k},\omega) = -\frac{U}{16\pi^2}\int d^2q[\alpha U_{sp}\chi''_{sp}(\mathbf{q}, \xi^0_{\mathbf{k+q}} - \omega) + \beta U_{ch}\chi''_{ch}(\mathbf{q}, \xi^0_{\mathbf{k+q}} - \omega)][n_B(\xi^0_{\mathbf{k+q}} - \omega) + f(\xi^0_{\mathbf{k+q}})] \quad (12)$$

tandis que l'on évalue encore la partie réelle de la self-énergie à l'aide de l'équation (2). Les paramètres $\alpha$ et $\beta$ présents dans l'expression précédente peuvent prendre deux ensembles de valeurs. L'approche Vilk-Tremblay "pure" correspond à $\alpha$=$\beta$=1. Cependant, cela ne respecte pas l'invariance sous rotation des spins du modèle de Hubbard. Le choix $\alpha$=3/2 et $\beta$=1/2, qui est la moyenne des résultats longitudinal et transversal, est donc plus indiqué. Les deux options sont néanmoins présentes dans le programme (sous-routine ARG_ IMSELF). Les quantités $U_{sp}$ et $U_{ch}$ apparaissant dans l'équation (12) sont évaluées de manière auto-cohérente à l'aide de l'ensemble d'équations suivant:

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (13)$$

$$\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{1}{2}U_{ch}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (14)$$

$$\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{q}, iq_n}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow\rangle \quad (15)$$

$$\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{q}, iq_n}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = n + 2\langle n_\uparrow n_\downarrow\rangle - n^2 \quad (16)$$

$$U_{sp}\langle n_\uparrow\rangle\langle n_\downarrow\rangle = U\langle n_\uparrow n_\downarrow\rangle \tag{17}$$

Nous savons que $U_{sp} \in [0, U_{sp}^{max}]$ avec $U_{sp}^{max}$ = min $\{U,\ 2/\chi^0\ (\mathbf{Q},0)\}$ et où $\mathbf{Q}$ est le vecteur d'onde pour lequel $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n{=}0)$ est maximum. La quantité $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$ figurant dans les équations (13) et (14) se calcule de la façon suivante:

$$\chi^0(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi^0_{\mathbf{k}}) - f(\xi^0_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{iq_n + \xi^0_{\mathbf{k}} - \xi^0_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \tag{18}$$

Dans les équations (15), (16) et (18), N désigne le nombre total de vecteurs d'onde sur lesquels est effectuée la double somme. On voit aisément à partir des équations (13) et (14) que les parties imaginaires de la susceptibilité de spin et de la susceptibilité de charge sont respectivement données par:

$$\chi''_{sp}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \omega)}{(1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0\prime}(\mathbf{q}, \omega))^2 + (\frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \omega))^2} \tag{19}$$

$$\chi''_{ch}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \omega)}{(1 + \frac{1}{2}U_{ch}\chi^{0\prime}(\mathbf{q}, \omega))^2 + (\frac{1}{2}U_{ch}\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \omega))^2} \tag{20}$$

On calcule $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \omega)$ grâce à l'équation (4) tandis que $\chi^{0\prime}(\mathbf{q}, \omega)$ est obtenue de l'expression suivante, dérivable des relations de Kramers-Kronig:

$$\chi^{0\prime}(\mathbf{q}, \omega) = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \omega')(\omega' - \omega)}{(\omega' - \omega)^2 + \eta^2} \tag{21}$$

avec $\eta \to 0$.

### 3.2 Description du programme

L'exécution de ce programme se déroule en 9 grandes étapes principales, dont une (la septième) est optionnelle.

1. Calcul de $\mu^0$ : voir la sous-section 2.2.

2. Construction des tableaux : voir la sous-section 2.2. De plus, on construit le tableau qtab contenant les vecteurs d'onde pour $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$, qui sont répartis uniformément entre 0 et $\pi$, ainsi que le tableau qmat des poids d'intégration pour les vecteurs d'onde de qtab.
   **Sous-routine concernée :** CONSTR_WTAB

3. Calcul de $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$ : on contruit un tableau contenant les résultats pour chaque vecteur d'onde $q_x$ et $q_y$ de qtab (i.e. pour le premier quadrant de la zone de Brillouin) et pour chaque fréquence imaginaire $iq_n$ avec $q_n=2\pi n/B$. Lors de la construction du tableau, on utilise le fait que $\chi^0((q_x,q_y), iq_n) = \chi^0((q_y,q_x), iq_n)$. Le calcul se fait à partir de l'équation (18) à deux détails près. Premièrement, puisque l'on travaille à la limite thermodynamique, la double somme sur $\mathbf{k}$ est remplacée par une double intégrale, i.e. $\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \to \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}$. L'autre différence est que l'on utilise le fait que la partie imaginaire de l'équation (18) est nulle. Ainsi, l'évaluation de $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$ se fait numériquement à l'aide de l'expression:

$$\chi^0(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{1}{2\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi} d^2\mathbf{k}\frac{[f(\xi^0_{\mathbf{k}}) - f(\xi^0_{\mathbf{k+q}})][\xi^0_{\mathbf{k}} - \xi^0_{\mathbf{k+q}}]}{q_n^2 + (\xi^0_{\mathbf{k}} - \xi^0_{\mathbf{k+q}})^2} \tag{22}$$

**Sous-routines concernées :** CONSTR_CHI0IQNTAB, CHI0IQNTAB, INTKY_ ARG_CHI0IQN
**Fonction concernée :** ARG_CHI0IQN

4. Calcul de $U_{sp}$ et $U_{ch}$ : on commence par déterminer $U_{sp}$ à partir des équations (13), (15) et (17) que l'on combine de façon à ce que $U_{sp}$ soit la seule inconnue ($\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$ ayant été calculée précédemment). Il est cependant nécessaire de multiplier le résultat par 4 pour tenir compte de toute la zone de Brillouin, $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$ n'ayant été calculée que pour le premier quadrant. On utilise de plus le fait que $\chi^{0\prime}(\mathbf{q}, iq_n) = \chi^{0\prime}(\mathbf{q}, -iq_n)$ pour ne faire que la somme de (15) sur les $q_n$ positifs. Pour accélérer la convergence numérique des résultats, on modifie légèrement l'équation (15) en se servant de l'égalité:

$$\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{q},iq_n}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n) = n - \frac{n^2}{2} \tag{23}$$

En transformant la double somme sur les vecteurs d'onde en double intégrale, l'expression qui est évaluée numériquement pour déterminer $U_{sp}$ est donc:

$$\frac{T}{4\pi^2}\int d^2\mathbf{q}\sum_{iq_n}\left[\frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)} - \chi^0(\mathbf{q}, iq_n)\right] = \frac{n^2}{2} - \frac{U_{sp}n^2}{2U} \tag{24}$$

où l'on a utilisé $\langle n_\uparrow\rangle = \langle n_\downarrow\rangle = n/2$. Ensuite, la double occupation s'obtient trivialement de (17). Finalement, on obtient $U_{ch}$ d'une manière tout à fait analogue à $U_{sp}$, sauf que cette fois on utilise les équations (14), (16) et (23).
**Sous-routines concernées :** UEFF
**Fonctions concernées :** EQUSPIN, EQUCHARGE, ZBRENT

5. Calcul de $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q}, \omega)$ : voir la sous-section 2.2.

6. Calcul de $\chi^{0\prime}(\mathbf{q}, \omega)$ : le calcul s'effectue directement à partir de l'équation (21). Dans le cas où $\omega=0$, on utilise le fait que $\chi^{0\prime}(\mathbf{q}, \omega = 0) = \chi^0(\mathbf{q}, iq_n = 0)$.
**Sous-routines concernées :** CONSTR_RECHI0TAB, RECHI0
**Fonctions concernées :** ARG_RECHI0, INTER_IMCHI0

7. Calcul de $k_F^0$ (optionnel) : voir la sous-section 2.2.

8. Calcul de $\Sigma''(\mathbf{k},\omega)$ : on procède comme à la sous-section 2.2, sauf que l'on utilise l'équation (12) au lieu de l'équation (1). Pour le calcul de $\chi''_{sp}(\mathbf{q},\omega)$ et de $\chi''_{ch}(\mathbf{q},\omega)$, on utilise respectivement les équations (19) et (20).
**Sous-routines concernées :** CONSTR_IMSELFTAB, IMSELF
**Fonctions concernées :** ARG_IMSELF, INTER_IMCHI0, IMCHISP, IMCHICH

9. Calcul de $\Sigma'(\mathbf{k},\omega)$ : voir la sous-section 2.2.

**Remarques importantes**

1. Pour des raisons d'ordre pratique (limitation de la mémoire), les programmes "vt" ont été légèrement modifiés pour ne pas conserver d'informations inutiles. Certaines informations contenues dans les tableaux imchi0tab, rechi0tab et chi0iqntab sont ainsi regroupées dans le tableau chitab. De plus, la dimension du tableau rechi0tab passe de (0:nbk,0:nbk,0:nbw) à (0:nbw).

2. Il y a dans les programmes "vt" une sous-routine (LONG_SPIN) qui permet de calculer la longueur de corrélation et la fréquence caractéristique des fluctutations de spin. L'équation utilisée pour la longueur de corrélation est la suivante:

$$\xi_{sp} \equiv \sqrt{\frac{U_{sp}}{\delta U}}\xi_0 \tag{25}$$

où $\delta U \equiv U_c - U_{sp}$ et $\xi_0 \equiv \sqrt{\frac{1}{2}\alpha U_c}$. Nous avons que $U_c \equiv 2/\chi^{0\prime}(\mathbf{Q},0)$, tandis que $\alpha$ est donné par:

$$\alpha \equiv -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2\chi^{0\prime}(\mathbf{q},0)}{\partial^2 q_x}\right]_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}} \tag{26}$$

L'équation pour la fréquence caractéristique est quant à elle:

$$\omega_{sp} \equiv \frac{2\delta U}{\alpha'' U_{sp} U_c} \tag{27}$$

où le coefficient $\alpha''$ est défini par:

$$\alpha'' \equiv \lim_{\omega\to 0} \frac{\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{Q},\omega)}{\omega \ln|\omega|} \tag{28}$$

# 4 Présence d'un saut au second voisin ($t' \neq 0$)

Comme nous l'avons mentionné précédemment, les programmes "self" et "vt" existent en deux versions, une sans et une avec saut au second voisin. Les modifications à apporter pour tenir compte de l'effet d'un saut au second voisin étant les mêmes dans les deux cas, nous les décrivons dans une seule section. Ces modifications se regroupent en trois classes.

1. Modification de la relation de dispersion : dans le cas d'un saut au second voisin non nul, la relation de dispersion des électrons libres est:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) - 4t' \cos(k_x) \cos(k_y) \tag{29}$$

2. Modification des valeurs de $\omega_s$ et de $\omega_c$ : les équations (10) et (11) ne sont plus valides. Pour déterminer $\omega_s$, on se sert du fait qu'à cette fréquence, le nombre de valeurs singulières de $\mathrm{k}_x$ (notées $\mathrm{k}_x^s$) passe brusquement de 4 à 2. Pour déterminer $\omega_c$, on se sert plutôt du fait qu'à cette fréquence, le nombre de valeurs de $\mathrm{k}_x^s$ devient nul. La sous-routine CALCUL_KXS détermine le nombre de valeurs singulières $\mathrm{k}_x^s$ ainsi que leur valeur numérique. Pour ce faire, il s'agit de résoudre:

$$\alpha_1 \sin^2(k_x^s) + \alpha_2 \sin(k_x^s) + \alpha_3 \cos(k_x^s) + \alpha_4 = 0 \tag{30}$$

avec

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &\equiv 64t'^2(\sin^2(q_x/2) - \sin^2(q_y/2)) - 16\sin^2(q_x/2) \\
\alpha_2 &\equiv 8\omega \sin(q_x/2) \\
\alpha_3 &\equiv 64t' \cos(q_x/2) \sin^2(q_y/2) \\
\alpha_4 &\equiv 16\sin^2(q_y/2)(1 + 4t'^2 \cos^2(q_x/2)) - \omega^2
\end{aligned}$$

L'équation (30) se ramène ainsi à un polynome du $4^e$ degré en $\sin(k_x^s)$:

$$\sin^4(k_x^s) + \frac{2\alpha_2}{\alpha_1}\sin^3(k_x^s) + \frac{\alpha_2^2 + 2\alpha_1\alpha_4 + \alpha_3^2}{\alpha_1^2}\sin^2(k_x^s) + \frac{2\alpha_2\alpha_4}{\alpha_1^2}\sin(k_x^s) + \frac{\alpha_4^2 - \alpha_3^2}{\alpha_1^2} = 0 \tag{31}$$

**Sous-routines concernées :** CALCUL_WS, CALCUL_WC, CALCUL_KXS

3. Modification du calcul de $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega)$ : en présence d'un saut au second voisin, l'équation (4) est remplacée par:

$$\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} \frac{[f(\xi^0_{\mathbf{k\text{-}q/2}}) - f(\xi^0_{\mathbf{k-q/2}} + \omega)]_{k_y=k_y^0}}{\sqrt{a^2(k_x,\mathbf{q}) + b^2(k_x,\mathbf{q}) - c^2(k_x,\mathbf{q})}} \tag{32}$$

avec

$$\begin{aligned}
a^2(k_x,\mathbf{q}) &\equiv 8t' \sin(k_x)\sin(q_x/2)\cos(q_y/2) \\
b^2(k_x,\mathbf{q}) &\equiv 4\sin(q_y/2)\{1 + 2t' \cos(k_x)\cos(q_x/2)\} \\
c^2(k_x,\mathbf{q}) &\equiv 4\sin(k_x)\sin(q_x/2) - \omega
\end{aligned}$$

**Sous-routines concernées :** ARG_IMCHI0