

**MONTE CARLO QUANTIQUE
POUR LE MODÈLE DE HUBBARD
AVEC SAUTS VERS LES SECONDS VOISINS**

par

Alain VEILLEUX

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

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, Novembre 1994

SOMMAIRE

Dans ce travail, nous étudions le modèle de Hubbard appliqué aux supraconducteurs à haute température de transition à l'aide de la simulation Monte Carlo (MC) quantique sur réseau bidimensionnel. Le modèle comporte un terme de saut vers les premiers voisins (t), un terme de saut vers les seconds voisins (t') ainsi qu'un terme lié au potentiel de Coulomb écranté (U). Nous nous concentrons sur le cas du couplage intermédiaire.

Nous calculons la susceptibilité magnétique uniforme, en fonction du dopage en trous, par MC ainsi qu'à l'aide de l'approximation auto-cohérente à deux particules (ACDP) développée par Vilk, Chen et Tremblay. Les cas $t'=0$ et $t'=-0.35$ reproduisent qualitativement la forme expérimentale de la susceptibilité pour les températures $\beta=5$ et $\beta=6$. Nous constatons cependant que l'origine du maximum de la susceptibilité diffère dans les deux cas. Dans le cas $t'=0$, le maximum de la susceptibilité magnétique uniforme provient des interactions, alors que dans le cas $t'=-0.35$, il provient d'un effet de la structure de bande (singularité de Van Hove) amplifié par les interactions.

Nous calculons aussi les corrélations supraconductrices de symétrie S étendue et d par MC ainsi qu'à l'aide de l'approximation de la matrice T . L'accord entre les deux calculs est bon pour des remplissages situés loin de la singularité de Van Hove à la température $\beta=5$. Pour la symétrie d , on constate que l'approximation de la matrice T surestime les corrélations supraconductrices à $t'=-0.35$ pour une température où l'antiferromagnétisme est absent, alors qu'elle les sous-estime à $t'=0$ pour une température où l'antiferromagnétisme est présent. Ceci suggère que l'antiferromagnétisme favorise les corrélations supraconductrices de symétrie d .

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier en tout premier lieu et tout particulièrement mon directeur de recherche: le parfois trop modeste André-Marie Tremblay qui, en raison de l'étendue de ses compétences, est sans aucun doute à la base de la formation que j'ai acquise au cours de ce travail. Cette formation déborde le cadre du sujet traité pour aussi s'étendre à des domaines aussi divers que le calcul numérique de haute performance, l'organisation du travail et les relations humaines. Je l'en remercie très sincèrement et ne peux tarir d'éloges à son égard.

Je remercie également mes collègues avec qui j'ai eu de fructueuses discussions et sans qui ce travail eût été gravement handicapé: le sympathique Liang Chen, l'aimable Anne-Marie Daré et l'efficace Yury Vilik.

Je suis redevable, pour leur soutien financier, aux organismes suivants: le CRSNG (Conseil pour la recherche en sciences naturelles et génie du Canada), le CRPS (Centre de recherche en physique du solide), le FCAR (Fond d'aide aux chercheurs et à la recherche) et HPC/Fujitsu (High Performance Computing/Fujitsu Corporation).

Je ne peux passer sous silence l'indispensable soutien de mes parents, la sage Monique et l'enthousiaste Léonard, et celui d'amis qui ont su meubler l'atmosphère et la rendre propice à ce travail: l'artiste Alvaro Rojas, le secret Jean Royer, le passionné Régis Fortin, le posé Yves Carbonneau, l'actif Michel Delage, l'aventureuse Julie McDuff, la colorée Patricia Dolez, les exemplaires Louise Loiselle et François Schiettekatte, le loyal Steeve Véronneau, la tranquille Sylvie Lefebvre ainsi que les très actifs membres du Conseil d'administration du RECSUS (Regroupement des étudiants chercheurs en sciences de l'Université de Sherbrooke).

TABLE DES MATIÈRES

SOMMAIRE	ii
REMERCIEMENTS	iii
TABLE DES MATIÈRES	iv
LISTE DES FIGURES	vi
INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE 1: SUPRACONDUCTEURS À HAUTE TEMPÉRATURE DE TRANSITION	3
1.1 Historique: supraconducteurs conventionnels et à haute température de transition	3
1.2 Nécessité d'un modèle avec électrons fortement corrélés: le modèle de Hubbard	4
1.3 Structure bidimensionnelle des supraconducteurs à haute température critique.....	7
CHAPITRE 2: MODÈLES ET APPROCHES PHYSIQUES UTILISÉS	9
2.1 Modèle de Hubbard	9
2.1.1 Électrons fortement corrélés.....	9
2.1.2 Justification physique de l'utilité des sauts vers les seconds voisins	10
2.1.3 Relation de dispersion et surface de Fermi	10
2.2 Matrice T	13
2.2.1 Approximation de la matrice T	13
2.2.2 Corrélations supraconductrices.....	13
2.2.2.1 Symétrie d	15
2.2.2.2 Symétrie S étendue.....	15
2.3 Approximation auto-cohérente à deux particules.....	16
2.3.1 Introduction	16
2.3.2 Développement théorique.....	17

CHAPITRE 3: SIMULATION MONTE CARLO QUANTIQUE	20
3.1 Introduction	20
3.2 Calcul des observables	21
3.2.1 Décomposition de Trotter	21
3.2.2 Transformation de Hubbard-Stratonovitch et trace sur les fermions.....	22
3.2.3 Calcul des observables par la méthode Monte Carlo: introduction du signe du déterminant.....	24
3.3 Un cycle de mise à jour.....	26
3.4 Limites de la méthode.....	28
3.4.1 Problème du signe du déterminant	28
3.4.2 Conditions aux frontières périodiques.....	29
3.5 Améliorations numériques apportées à la méthode	29
3.5.1 Stabilisation numérique à basse température	29
3.5.2 Matrices éparses.....	30
3.6 Le calcul d'une observable en pratique	32
3.6.1 Extrapolation pour contourner l'erreur systématique en $(\Delta\tau)^2$	32
3.6.2 Méthodologie pour obtenir la valeur et l'incertitude d'une observable.....	34
CHAPITRE 4: RÉSULTATS ET ANALYSE.....	37
4.1 Problématique	37
4.2 Effets de taille finie.....	38
4.3 Résultats expérimentaux: susceptibilité magnétique.....	38
4.4 Facteur de structure magnétique et approximation auto-cohérente à deux particules.....	40
4.4.1 Calcul du facteur de structure magnétique	40
4.4.2 Susceptibilité magnétique uniforme.....	40
4.4.3 Partie réelle de la susceptibilité magnétique.....	61
4.5 Corrélations supraconductrices et approximation de la matrice T	64
4.6 Quelques détails techniques sur les simulations et les ordinateurs utilisés.....	71
CONCLUSION.....	73
ANNEXE A: CALCUL DE LA MOYENNE ET DE L'ÉCART-TYPE PONDÉRÉS PAR LA MÉTHODE DU MAXIMUM DE VRAISEMBLANCE	75
BIBLIOGRAPHIE	78

LISTE DES FIGURES

Chapitre 1

1-1	Spectroscopie par absorption des rayons X pour le composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$: fluorescence en fonction de l'énergie du photon.....	6
1-2 (a)	Nécessité d'un modèle avec électrons fortement corrélés: demi-remplissage	6
1-2 (b)	Nécessité d'un modèle avec électrons fortement corrélés: dopage en trous	6
1-3 (a)	Structure générale planaire d'un supraconducteur haut- T_c : plan Cu-O	8
1-3 (b)	Structure des plans Cu-O du cristal $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$	8
1-4	Structure du composé $\text{La}_2\text{CaCu}_2\text{O}_6$	8

Chapitre 2

2-1	Réseau carré utilisé pour la simulation MC du modèle de Hubbard avec sauts aux premiers et seconds voisins	9
2-2	Surface de Fermi pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$, $t'=0$	12
2-3	Surface de Fermi pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$, $t'=-0.35$	12
2-4	Approximation de la matrice T dans le langage des diagrammes de Feynman.....	13
2-5	Symétries spatiales des fonctions de poids $g^\alpha(\nu)$ de la matrice T	14

Chapitre 3

3-1	Signe moyen du déterminant en fonction du remplissage pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins.....	28
3-2	Liens pour les sauts vers les premiers voisins sur un réseau carré 4×4	31
3-3	Liens pour les sauts vers les seconds voisins sur un réseau carré 4×4	31
3-4	Convergence linéaire de l'observable énergie cinétique en fonction de $(\Delta\tau)^2$ pour le modèle de Hubbard à $U=0$ sur réseau 8×8	33
3-5	Convergence normale des valeurs moyennes de la susceptibilité magnétique uniforme et du remplissage pour une simulation MC avec sauts vers les premiers voisins	35
3-6	Convergence normale de l'écart-type sur les observables de la figure 3-5.....	35
3-7	Convergence anormale des valeurs moyennes de la susceptibilité magnétique uniforme et du remplissage pour une simulation MC avec sauts vers les premiers voisins	36
3-8	Convergence de l'écart-type sur les observables de la figure 3-7.....	36

Chapitre 4

4-1	Susceptibilité magnétique expérimentale en fonction de la température du composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ pour différentes valeurs de dopage en trous.....	39
4-2	Susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard à $U=0$, en fonction du remplissage pour un réseau 4×4 à $\beta=6$ et différents t'	47

4-3	Susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard à $U=0$, en fonction du remplissage pour un réseau 10×10 à $\beta=5$ et différents t'	48
4-4	Susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard à $U=0$, en fonction du remplissage pour $t'=-0.35$, $\beta=5$ et différentes tailles du réseau.....	49
4-5	Distribution des vecteurs d'onde permis par un réseau 10×10 pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$ et $t'=-0.20$	50
4-6	Distribution des vecteurs d'onde permis par un réseau 10×10 pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$ et $t'=-0.35$	50
4-7	Maximum de la susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=0$ et $\beta=6$, en fonction du remplissage pour différentes tailles de réseaux du calcul MC ainsi que pour l'approche ACDP sur réseau infini.....	51
4-8	Maximum de la susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, en fonction du remplissage pour un calcul MC sur réseau 8×8 ainsi que pour l'approche ACDP sur réseau infini	52
4-9	Maximum de la susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, en fonction du remplissage pour un calcul MC sur réseau 6×6	53
4-10	Fonction de Fermi à température non nulle.....	54
4-11	Dérivée de la fonction de Fermi de la figure 4-2	54
4-12	Densité d'états du modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$, $t'=-0.35$	54

4-13	Facteur de structure magnétique, pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$ au vecteur d'onde antiferromagnétique (π, π) , en fonction du remplissage pour des calculs MC sur réseau 6×6 et 8×8 ainsi que pour l'approche ACDP sur réseau infini	55
4-14	Facteur de structure magnétique, pour le modèle de Hubbard à $t'=-0.35$ et $\beta=5$, calculé par MC sur réseaux 6×6 et 8×8 ainsi que par l'approche ACDP sur réseau infini le long de la première zone de Brillouin pour la bande demi-remplie	56
4-15	Comme la figure 4-14, mais pour un remplissage $\langle n \rangle = 0.835$	57
4-16	Comme la figure 4-14, mais pour un remplissage $\langle n \rangle = 0.63$	58
4-17	Comme la figure 4-14, mais pour un remplissage $\langle n \rangle = 0.37$	59
4-18	Comme la figure 4-14, mais pour un remplissage $\langle n \rangle = 0.082$	60
4-19	Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, pour un réseau 400×400 et $\langle n \rangle = 0.6$	62
4-20	Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, pour un réseau 8×8 et $\langle n \rangle = 0.6$	62
4-21	Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=-0.35$ et $\beta=100$, pour un réseau 400×400 et $\langle n \rangle = 0.6$	63
4-22	Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t'=-0.35$ et $\beta=100$, pour un réseau 8×8 et $\langle n \rangle = 0.6$	63
4-23	Corrélations supraconductrices de la symétrie S étendue, pour le modèle de Hubbard à $U=4$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, pour un calcul MC et l'approximation de la matrice T sur réseau 8×8	67

4-24	Corrélations supraconductrices de la symétrie d , pour le modèle de Hubbard à $U=4$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, pour un calcul MC et l'approximation de la matrice T sur réseau 8×8	68
4-25	Corrélations supraconductrices de la symétrie S étendue, pour le modèle de Hubbard à $U=4$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, pour un calcul MC et l'approximation de la matrice T sur réseau 6×6	69
4-26	Corrélations supraconductrices de la symétrie d , pour le modèle de Hubbard à $U=4$, $t'=-0.35$ et $\beta=5$, pour un calcul MC et l'approximation de la matrice T sur réseau 6×6	70

INTRODUCTION

Depuis la découverte des supraconducteurs dits conventionnels par Kamerlingh Onnes en 1911, les recherches des physiciens ont mené à la formulation de la théorie BCS par Bardeen, Cooper et Schrieffer en 1957. Cependant, les céramiques supraconductrices à haute température critique, découvertes en 1986, n'entrent pas complètement dans le cadre de cette théorie puisque les phonons n'y semblent pas être à l'origine du mécanisme d'appariement des électrons.

Encore aujourd'hui, les supraconducteurs haut- T_c posent un défi aux théoriciens, car ils font appel à des théories d'électrons fortement corrélés. Dans ce contexte, l'hamiltonien de Hubbard est le plus simple contenant l'essentiel de la physique du problème à N-corps. Jusqu'à maintenant, la majorité des études des supraconducteurs haut- T_c , faites à l'aide du modèle de Hubbard, considèrent uniquement le terme cinétique avec sauts vers les premiers voisins. L'originalité du présent travail consiste à y inclure le terme cinétique de saut vers les seconds voisins, qui est par ailleurs justifié par les calculs de structure de bande.

Nous étudierons le modèle de Hubbard à une bande pour des fermions, en couplage intermédiaire, à l'aide de la simulation Monte Carlo (MC) quantique sur des réseaux bidimensionnels de 4×4 , 6×6 et 8×8 sites. Pour la gamme de paramètres de la présente étude, ces simulations s'avèrent très exigeantes en terme de puissance de calcul de l'unité centrale de traitement de l'ordinateur utilisé. En effet, l'anti-symétrie des fonctions d'ondes empêche généralement la détermination des quantités positives-définies utilisées en simulation MC et il en découle le fameux "problème du signe du déterminant". Ce dernier cause une

forte diminution de la vitesse de convergence des observables simulées par MC quantique par rapport à l'équivalent classique.

Les contraintes numériques des systèmes étudiés nous obligent à restreindre notre étude sur une gamme de températures situées aux environ de 1000 K, ce qui nous place dans la phase normale du modèle. Notre étude des propriétés physiques sera concentrée sur le facteur de structure magnétique et sur les corrélations supraconductrices. Les résultats des simulations MC du facteur de structure magnétique seront comparés à des calculs avec l'approximation auto-cohérente à deux particules mise au point par Vilk, Chen et Tremblay (Vilk *et al.* 1994). Les résultats des simulations MC des corrélations supraconductrices seront comparés à des calculs des mêmes quantités avec l'approximation de la matrice T , pour les symétries S étendue et d .

Au premier chapitre, nous énoncerons les principales caractéristiques des supraconducteurs à haute température de transition tout en justifiant l'utilisation du modèle de Hubbard bidimensionnel pour leur étude. Le second chapitre décrira les modèles et approches physiques utilisés, soient le modèle de Hubbard avec sauts vers les deuxièmes voisins, l'approximation de la matrice T et l'approximation auto-cohérente à deux particules. Le troisième chapitre traitera de la technique numérique associée à la méthode de simulation Monte Carlo quantique. Il sera montré comment la simulation MC intervient dans le calcul d'une observable ainsi que les limitations inhérentes à cette méthode. Le quatrième et dernier chapitre exposera et discutera de l'ensemble des résultats obtenus au cours du présent travail, soit le facteur de structure magnétique, calculé par MC et avec l'approximation auto-cohérente à deux particules, ainsi que les corrélations supraconductrices, calculée par MC et avec l'approximation de la matrice T .

CHAPITRE 1: SUPRACONDUCTEURS À HAUTE TEMPÉRATURE DE TRANSITION

1.1 Historique: supraconducteurs conventionnels et à haute température de transition

Les supraconducteurs présentent des propriétés électromagnétiques hors du commun. Par exemple, en dessous d'une certaine température critique T_c , ils n'offrent aucune résistance électrique et sont des diamagnétiques parfaits. Nous vous référons aux textes de Kresin *et al.* (1990) et de Burns (1992) pour une description des propriétés des supraconducteurs conventionnels et à haute température de transition.

Kamerlingh Onnes découvrit la supraconductivité dite "conventionnelle" en 1911, alors qu'il étudiait la résistivité du mercure en fonction de la température. C'était la première fois qu'il était possible d'abaisser la température du mercure au-dessous de 4.2 K. En 1957, ces supraconducteurs ont été décrits avec succès par la théorie BCS (par Bardeen, Cooper et Schrieffer). Dans cette théorie, les électrons forment des paires dites "de Cooper" qui forment ensuite un état "cohérent", i.e. dont les phases des fonctions d'onde s'additionnent. C'est l'interaction électron-phonon qui provoque ces combinaisons en permettant une attraction retardée entre deux électrons, malgré la présence d'un potentiel de Coulomb répulsif instantané. Ainsi, le potentiel de Coulomb agissant sur un électron est écranté par les ions avoisinants.

Le premier supraconducteur à haute température critique a été découvert en 1986 par Bednorz et Müller (Laboratoire de recherche de IBM, Zurich). Il s'agissait d'un composé de la

famille $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, mauvais conducteur à la température de la pièce, affichant une température critique d'environ 30 K. Il s'est avéré que la théorie BCS n'explique pas bien la supraconductivité à haute température critique. Diverses observations expérimentales des supraconducteurs à haute température de transition ne concordent pas bien avec cette théorie (Burns 1992). À titre d'exemples, mentionnons la valeur très élevée de T_c , la résistivité linéaire dans l'état normal, les petites longueurs de cohérence, etc. C'est pourquoi l'approche des électrons fortement corrélés est utilisée pour expliquer les supraconducteurs à haute température de transition.

1.2 Nécessité d'un modèle avec électrons fortement corrélés: le modèle de Hubbard

Le modèle le plus simple, pour N fermions fortement corrélés, est le modèle de Hubbard qui sera détaillé au chapitre suivant. Dans ce modèle, le potentiel de Coulomb a une portée réduite, car il est écranté par la mer d'électrons. On peut justifier l'utilisation d'un modèle avec électrons fortement corrélés à l'aide de plusieurs arguments physiques.

La première justification de l'utilisation d'un tel modèle est donnée par son diagramme de phase qui est assez complet pour permettre d'expliquer les propriétés magnétiques des composés supraconducteurs à haute température de transition. Cependant, aucune phase supraconductrice n'a encore été clairement identifiée; le débat reste ouvert de ce côté.

Une autre justification est donnée par le comportement de la résistivité des oxydes de cuivre en fonction du dopage en trous. À faible dopage en trous (près du demi-remplissage), les supraconducteurs haut- T_c sont des isolants antiferromagnétiques, alors qu'à plus fort dopage, ils deviennent métalliques. Ceci rappelle une propriété fondamentale de l'hamiltonien de Hubbard où il y a compétition entre la tendance à la délocalisation des électrons (terme

cinétique) et la tendance à la localisation (terme potentiel). La théorie des bandes, quant à elle, prédit à tort que les oxydes de cuivre devraient être des métaux près du demi-remplissage.

La pertinence de ce modèle est aussi confirmée par des calculs de structure de bandes ainsi que par des mesures expérimentales telles la spectroscopie par absorption de rayons X, la spectroscopie par absorption des pertes d'énergie d'électrons et par la spectroscopie par photo-émission (C.T. Chen *et al.* 1991; Hybertsen *et al.* 1992). La figure 1-1 montre la spectroscopie par absorption des rayons X pour le composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. On peut voir, sur la partie inférieure de la figure, que l'augmentation de l'intensité du pic de plus basse énergie, en fonction du dopage, est deux fois plus rapide que la diminution d'intensité du pic de plus haute énergie. Ceci s'explique par un modèle du type Hubbard, tel qu'illustré à la figure 1-2, avec une énergie U séparant deux bandes auxquelles correspondent les deux pics de la figure 1-1. On observe ce qui se passe lorsqu'on ajoute des électrons dans le système tout en minimisant son énergie totale. La partie (a) de la figure 1-2 montre ces deux bandes pour un système demi-rempli avec un électron par site. À cause du principe d'exclusion de Pauli, l'ajout d'un électron supplémentaire doit se faire dans la bande supérieure sur un site contenant un spin opposé à celui ajouté. La partie (b) de la figure 1-2 montre ces deux mêmes bandes pour un système dopé x en trous. L'ajout au système d'un électron supplémentaire dans la bande inférieure peut être fait de deux façons: avec un spin *up* ou un spin *down*. Par contre, l'ajout d'un électron dans la bande supérieure ne peut pas être fait au site où se situe le trou, ce qui enlève un état à la bande supérieure. Lorsqu'on dope en trous, le nombre de possibilités de placer un électron dans la bande inférieure est de deux fois le dopage, alors que le nombre de possibilités de placer un électron dans la bande supérieure diminue linéairement avec le dopage. Ainsi, la figure 1-1 présente bien une augmentation de l'intensité du pic d'énergie inférieure deux fois plus rapide que la diminution de l'intensité du pic d'énergie supérieure.

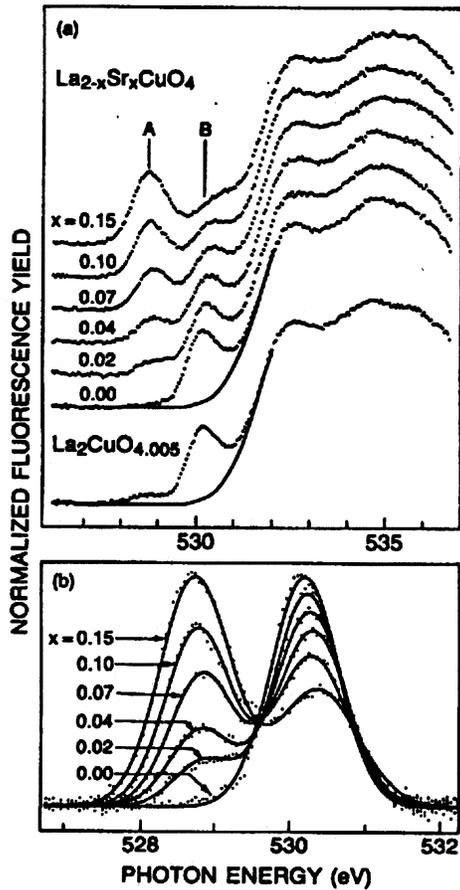


Fig. 1-1: Spectroscopie par absorption des rayons X pour le composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. L'intensité de la fluorescence produite est tracée en fonction de l'énergie du photon incident pour différents dopages x en trous. La figure du bas est une superposition de toutes les courbes de celle du haut. On voit que l'augmentation du pic de plus basse énergie, en fonction du dopage, est deux fois rapide que la diminution du pic de plus haute énergie. Source: C.T. Chen et al. 1991.

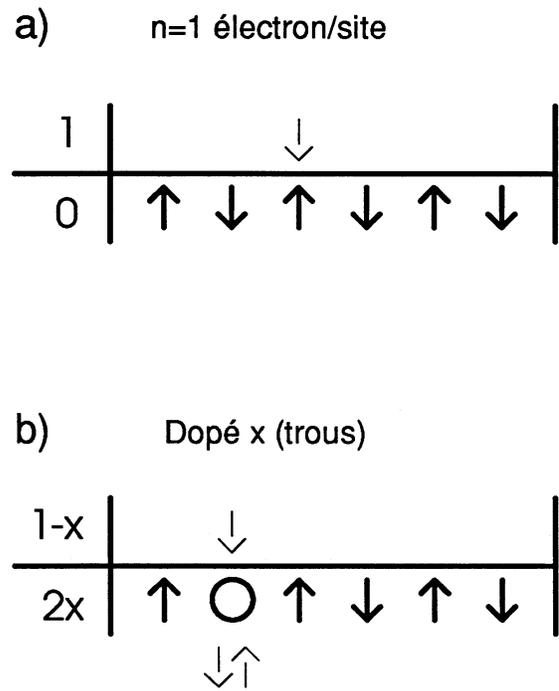


Fig. 1-2: Schémas simplifiés du modèle de Hubbard où on a représenté l'interaction potentielle par deux bandes séparées par une énergie U . On ajoute des électrons en minimisant l'énergie totale du système. La figure (a) montre qu'on peut ajouter un électron uniquement sur la bande supérieure, devant un site de spin opposé. La figure (b) montre qu'on peut ajouter un électron à la bande inférieure de deux façons et qu'il y a un endroit de moins où l'ajouter dans la bande supérieure.

1.3 Structure bidimensionnelle des supraconducteurs à haute température critique

Tous les supraconducteurs à haute température de transition connus à ce jour ont la particularité de posséder des plans d'oxyde de cuivre CuO_2 (dénommés plans Cu-O). Dans ces plans, chaque atome de Cu est entouré de quatre atomes d'oxygène sur un réseau bidimensionnel carré (voir la figure 1-3). Parfois, s'ajoutent aussi des atomes d'oxygène situés entre les plans Cu-O. Les plans Cu-O forment les plans *ab* du réseau cristallin, perpendiculaire à son axe *c*. La structure d'un supraconducteur ressemble donc à un empilement de plans conducteurs (voir la figure 1-4). Le recouvrement des orbitales entre deux atomes voisins situés sur des plans différents est beaucoup plus faible que celui entre des voisins situés dans un même plan. De cette forte anisotropie cristalline découle une forte anisotropie des propriétés physiques du cristal. Par exemple, la conductivité dans le plan *ab* du composé de lanthane $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, près de la température de transition, est environ cent fois plus grande que celle le long de l'axe *c* du cristal. Des calculs de structure de bande et des expériences confirment que la surface de Fermi des composés de lanthane, dans leur phase métallique, est essentiellement bidimensionnelle (Bénard, thèse 1993; Tmasaku *et al.* 1992; Keimer *et al.* 1992).

Les diverses propriétés physiques observées chez les supraconducteurs haut- T_c suggèrent donc de commencer par une analyse des modèles à caractère bidimensionnel avant d'y ajouter les effets de couplage interplan. C'est pourquoi nous restreindrons notre étude à celle du modèle de Hubbard sur un réseau bidimensionnel.

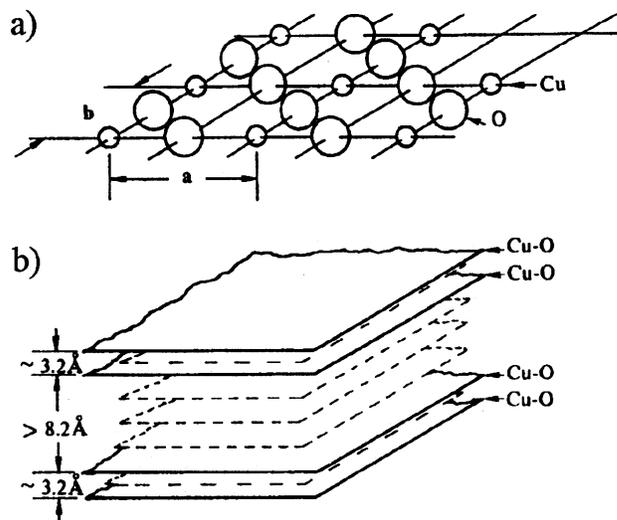


Fig. 1-3: Schéma de la structure planaire d'un supraconducteur à haute température de transition. En a), on peut voir un plan Cu-O à structure carrée. En b), on peut voir les deux plans Cu-O adjacents du cristal $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Le pointillé entre les deux plans indique une couche d'atomes Y dispersés. Les trois autres plans contiennent de l'O et sont isolants. Source: Burns 1992, fig. 1-1a&c.

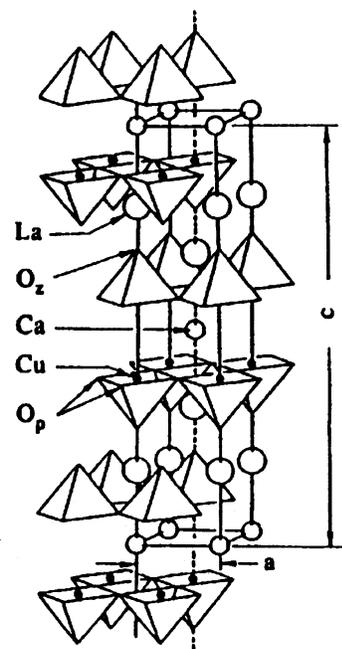


Fig. 1-4: Structure du composé $\text{La}_2\text{CaCu}_2\text{O}_6$. L'oxygène se retrouve à deux endroits: O_2 selon l'axe isolant et O_p dans les plans conducteurs. Source: Burns 1992, fig. 3-4d.

CHAPITRE 2: MODÈLES ET APPROCHES PHYSIQUES UTILISÉS

2.1 Modèle de Hubbard

2.1.1 Électrons fortement corrélés

Pour les simulations Monte Carlo dont il sera question dans le présent travail, on considère l'hamiltonien de Hubbard bidimensionnel à une bande suivant (Hubbard 1963; Mahan 1990; Doniach et Sondheimer 1974):

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^+ c_{i,\sigma}) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^+ c_{i,\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (2.1)$$

où l'opérateur $c_{j,\sigma}$ détruit un électron de spin σ au site j , alors que l'opérateur $c_{i,\sigma}^+$ crée un électron de spin σ au site i . La somme sur $\langle i,j \rangle$ porte sur les premiers voisins, alors que la somme sur $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ porte sur les deuxièmes voisins. Les paramètres t et t' sont les amplitudes de saut des électrons d'un site à l'autre pour les termes cinétiques qui les accompagnent. Le terme en U représente l'interaction résiduelle écrantée qui est non nulle seulement lorsque

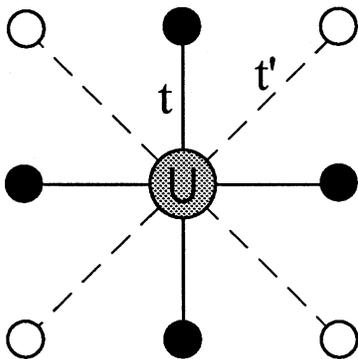


Fig. 2-1: Modèle de Hubbard sur réseau carré avec sauts vers les premiers et seconds voisins. Les cercles noirs sont les premiers voisins du site central (en grisé), alors que les cercles blancs sont les deuxièmes voisins. L'interaction coulombienne écrantée U est aussi indiquée.

deux électrons de spins opposés se rencontrent sur un même site. Il y a 4 états possibles pour un site, soient $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ et $|0\rangle$. Les différents termes de l'hamiltonien (2.1) sont illustrés sur la figure 2-1.

2.1.2 Justification physique de l'utilité des sauts vers les seconds voisins

Le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers voisins a été très étudié au cours des dernières années. On a constaté que cette version du modèle nécessite absolument une interaction forte (U élevé) pour obtenir un accord qualitatif avec des expériences telles que le coefficient de Hall et la susceptibilité magnétique uniforme. L'originalité du présent travail consiste à ajouter, à l'hamiltonien de Hubbard, un terme de saut vers les deuxièmes voisins (t') qui permet un meilleur accord avec ces mêmes expériences. L'utilisation d'un t' permet aussi de reproduire la position des maximums d'intensité de diffusion neutronique (Lu *et al.* 1990; Lu *et al.* 1991; Si *et al.* 1992; Bénard *et al.* 1993).

2.1.3 Relation de dispersion et surface de Fermi

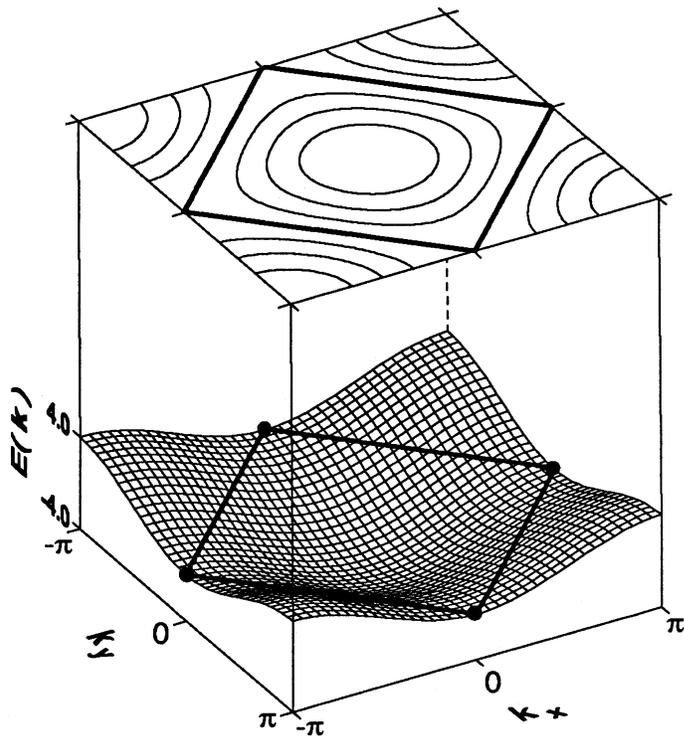
En couplage fort (U très grand), le coût énergétique d'un état $|\uparrow\downarrow\rangle$ le rend très peu probable. En appliquant la théorie des perturbations de Brillouin-Wigner dans la limite du couplage fort, on montre qu'il y a antiferromagnétisme de Heisenberg à demi-remplissage (Fradkin 1991, section 2.3.1).

Dans la limite sans interactions ($U=0$), la relation de dispersion pour un paramètre de réseau unitaire est donnée par

$$E(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y, \quad (2.2)$$

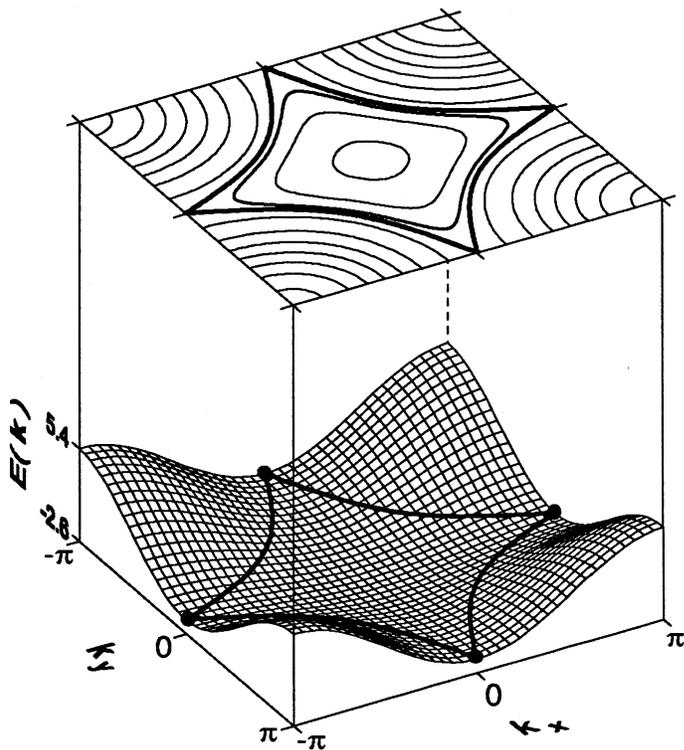
qui manifeste une compétition entre deux symétries de la surface de Fermi: les surfaces $t \neq 0, t' = 0$ et $t = 0, t' \neq 0$ sont tournées de 45 degrés l'une par rapport à l'autre. Diverses surfaces de Fermi, calculées à l'aide de l'équation (2.2), ont été illustrées aux figures 2-2 et 2-3. Le demi-remplissage se produit pour $E(\mathbf{k}) \cong 2t'$, alors que la singularité de Van Hove se produit exactement à $E(\mathbf{k}) = 4t'$ (Bénard thèse 1993). Une singularité de Van Hove se produit aux endroits de la surface de Fermi où la vitesse de Fermi est nulle. Ceci provoque une anomalie de la densité d'états qui se répercute dans les propriétés physiques du gaz d'électrons. La singularité de Van Hove vient des cols indiqués par des cercles noirs sur les figures 2-2 et 2-3. Les courbes isopotentielle correspondant à la singularité sont représentées par un trait gras sur les parties supérieures et inférieures des figures. Sur la figure 2-2, la singularité coïncide avec le demi-remplissage: pour un remplissage inférieur à la demie, on a une surface d'électrons, alors que pour un remplissage supérieur à la demie, on a une surface de trous. Sur la figure 2-3, on voit qu'il existe des remplissages supérieurs à celui où survient la singularité de Van Hove, et inférieurs au demi-remplissage, pour lesquels la courbure de la surface de Fermi s'apparente celle de trous.

En ajoutant un terme de saut vers les seconds voisins au modèle de Hubbard, la singularité de Van Hove et l'antiferromagnétisme ne coïncideront plus au demi-remplissage. Ainsi, il sera plus facile de distinguer les cas où la singularité de Van Hove agit sur le phénomène de supraconductivité de ceux où c'est plutôt l'antiferromagnétisme dû à l'emboîtement qui agit sur la supraconductivité.



Fichier: fermi2c.srf

Fig. 2-2: **Bas du cube:** surface de Fermi pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$, $t'=0$ (sauts aux premiers voisins seulement). La singularité de Van Hove survient aux cols indiqués par des points noirs. **Haut du cube:** projection de la surface avec courbes isopotentielles. Le trait gras marque la courbe isopotentielle correspondant à la singularité de Van Hove.



Fichier: fermi1c.srf

Fig. 2-3: **Bas du cube:** surface de Fermi pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$, $t'=-0.35$ (sauts aux premiers et seconds voisins). La singularité de Van Hove survient aux cols indiqués par des points noirs. **Haut du cube:** projection de la surface avec courbes isopotentielles. Le trait gras marque la courbe isopotentielle correspondant à la singularité de Van Hove.

2.2 Matrice T

2.2.1 Approximation de la matrice T

On considère le cas de la diffusion entre deux électrons de spins opposés. L'approximation de la matrice T consiste à ne retenir que les diffusions directes. La figure 2-4 illustre cette approximation dans le langage des diagrammes de Feynman. Cette approximation n'est valable que pour un système possédant une interaction à courte portée et une faible densité de particule. Dans ce cas, on peut dire que les diffusions auront lieu directement deux à deux. Il s'agit donc d'une interaction efficace locale qui est bien celle que présente le modèle de Hubbard étudié ici (Daré *et al.* 1994).

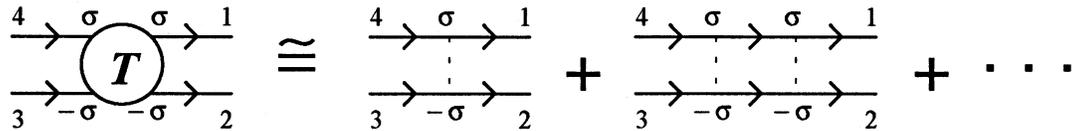


Fig. 2-4: Approximation de la matrice T dans le langage des diagrammes de Feynman. Pour le calcul de l'interaction totale, on ne retient que les diffusions multiples deux à deux.

2.2.2 Corrélations supraconductrices

Les fonctions d'auto-corrélation à temps égal $\langle \Delta_\alpha^+ \Delta_\alpha \rangle$ sont formées à partir du paramètre d'ordre

$$\Delta_\alpha^+ = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{i,\nu} g^\alpha(\nu) c_{i,\uparrow}^+ c_{i+\nu,\downarrow}^+, \quad (2.3)$$

où la somme sur ν s'étend sur les sites voisins du site i . La fonction de poids $g^\alpha(\nu)$, qui prend les valeurs ± 1 , détermine la symétrie spatiale (s , S étendue, d ou p) et la symétrie de spin (singulet ou triplet) de la paire de Cooper. Pour l'état singulet du paramètre d'ordre, la

fonction de poids présente une parité dans l'espace telle que $g^\alpha(\nu) = g^\alpha(-\nu)$. Les symétries spatiales habituellement considérées sont

$$\begin{aligned}
 s: & \quad g^s(\nu) = \delta_{\nu,0}, \\
 S \text{ étendue:} & \quad g^S(\nu) = \delta_{\nu,\hat{x}} + \delta_{\nu,-\hat{x}} + \delta_{\nu,\hat{y}} + \delta_{\nu,-\hat{y}}, \\
 d: & \quad g^d(\nu) = \delta_{\nu,\hat{x}} + \delta_{\nu,-\hat{x}} - \delta_{\nu,\hat{y}} - \delta_{\nu,-\hat{y}},
 \end{aligned}
 \tag{2.4}$$

qui sont illustrées schématiquement à la figure 2-5.

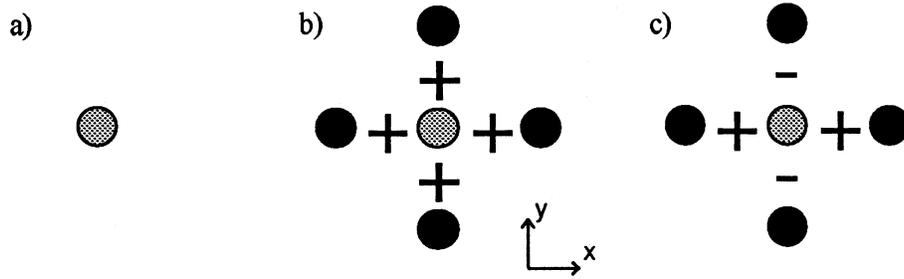


Fig. 2-5: Symétries spatiales des fonctions de poids $g^\alpha(\nu)$ du groupe d'équation (2.4) sur réseau carré. Le site considéré est illustré en grisé alors que ses voisins sont illustrés en noir: a) symétrie s , b) symétrie S étendue, c) symétrie d .

On obtient les fonctions d'auto-corrélation à partir du théorème de fluctuation-dissipation:

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta_\alpha^+ \Delta_\alpha \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2}{1 - e^{-\beta\omega}} \chi_\alpha''(\mathbf{q} = 0, \omega), \\
 \text{avec } \chi_\alpha''(t) &= \frac{1}{2} \langle [\Delta_\alpha^+(t), \Delta_\alpha(0)] \rangle,
 \end{aligned}
 \tag{2.5}$$

où la fonction spectrale satisfait $\chi_\alpha''(t) = [\chi_\alpha''(-t)]^*$. Pour l'état singulet, on peut montrer que, après avoir effectué la somme sur les fréquences de Matsubara (Daré *et al.* 1994), la susceptibilité est donnée par

$$\chi_{\alpha}(\mathbf{q}=0, i\omega_q) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} [F^{\alpha}(\mathbf{k})]^2 \frac{1-2f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\omega_q} - \frac{U}{1+U\chi_{pp}(0, i\omega_q)} \left\{ \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} F^{\alpha}(\mathbf{k}) \frac{1-2f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\omega_q} \right\}^2, \quad (2.6)$$

avec $\chi_{pp}(0, i\omega_q) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1-2f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\omega_q}$ et $F^{\alpha}(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\nu} g^{\alpha}(\nu) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_{\nu}}$,

où $f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ est la fonction de distribution de Fermi et U est la valeur de l'interaction sur un même site dans le modèle de Hubbard (voir plus haut).

2.2.2.1 Symétrie d

Cette symétrie, combinée à la symétrie du spectre d'énergie du réseau, est telle que le terme entre accolades " $\{ \}$ " de l'équation (2.6) est nul. La transformée de Fourier $F^d(\mathbf{k})$ de la fonction de poids est alors donnée par $F^d(\mathbf{k}) = 2[\cos(k_x) - \cos(k_y)]$. Suite à un prolongement analytique et une intégration sur les fréquences, on obtient

$$\langle \Delta_d^+ \Delta_d \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_x - \cos k_y)^2 f^2(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (2.7)$$

pour la fonction d'auto-corrélation. On voit immédiatement que, dans l'approximation de la matrice T , cette fonction est indépendante de la grandeur de l'interaction U .

2.2.2.2 Symétrie S étendue

Avec cette symétrie, aucun terme de l'équation (2.6) ne s'annule. La transformée de Fourier $F^S(\mathbf{k})$ de la fonction de poids est alors donnée par $F^S(\mathbf{k}) = 2[\cos(k_x) + \cos(k_y)]$. La force d'interaction U contribue ici à la fonction d'auto-corrélation. Le prolongement analytique est plus délicat que dans le cas de la symétrie d (voir Daré *et al.* 1994 pour les détails). Pour effectuer l'intégration sur la partie imaginaire de la susceptibilité, il faut trouver tous les pôles de la susceptibilité, puis sommer sur les fonctions δ situées à chaque pôle.

2.3 Approximation auto-cohérente à deux particules

2.3.1 Introduction

On note d'abord une règle de somme pour les facteurs de structure magnétique et de charge (voir équation (4.1) au chapitre 4 du présent travail):

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{q}} S_{\text{spin}}(\mathbf{q}) &= \left\langle (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})(n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow}) \right\rangle = \langle n_{i,\uparrow} \rangle + \langle n_{i,\downarrow} \rangle - 2\langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle, \\ \sum_{\mathbf{q}} S_{\text{charge}}(\mathbf{q}) &= \left\langle (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow})(n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) \right\rangle = \langle n_{i,\uparrow} \rangle + \langle n_{i,\downarrow} \rangle + 2\langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle,\end{aligned}\tag{2.8}$$

où l'indice i indique le site et les indices \uparrow et \downarrow indiquent un spin *up* et un spin *down* respectivement. Comme $n_{i,\uparrow,\downarrow} = 0$ ou 1 pour des fermions obéissant au principe de Pauli, on a $n_i^2 = n_i$. En sommant les facteurs de structure magnétique et de charge, on obtient:

$$\sum_{\mathbf{q}} [S_{\text{spin}}(\mathbf{q}) + S_{\text{charge}}(\mathbf{q})] = 2n,\tag{2.9}$$

qui n'est pas satisfaite par la RPA (Random Phase Approximation) ordinaire:

$$\chi_{\text{spin}} = \frac{\chi_0}{1 - \frac{1}{2}U\chi_0}, \quad \chi_{\text{charge}} = \frac{\chi_0}{1 + \frac{1}{2}U\chi_0}.\tag{2.10}$$

En effet, l'équation (2.9) est directement satisfaite par χ_0 lui-même, alors que le développement des équations (2.10) à un ordre supérieur en U ajoute des termes positifs qui ne respectent donc pas l'égalité (2.9).

2.3.2 Développement théorique

La présente approche a été développée par Vilks, Chen et Tremblay (Vilks *et al.* 1994) pour le modèle de Hubbard à une bande. On considère tout d'abord l'équation du mouvement de l'opérateur particule-trou en présence d'un faible champ ϕ externe:

$$\frac{\partial c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma}}{\partial \tau} = [H + H_{\text{externe}}, c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma}], \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \rangle}{\partial \tau} = & \text{Cinétique} + (\phi_{j,\sigma} - \phi_{i,\sigma}) \langle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \rangle \\ & - U \left(\langle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} c_{j,-\sigma}^+ c_{j,-\sigma} \rangle - \langle c_{i,-\sigma}^+ c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \rangle \right), \end{aligned} \quad (2.12)$$

où tous les opérateurs sont pris au même temps et $\phi_{i,\sigma}$ est couplé localement à la quantité $\langle c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} \rangle$ (Pines et Nozières 1966).

L'approximation RPA habituelle est donnée par:

$$U \langle c_{i,-\sigma}^+ c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \rangle \approx U \langle c_{i,-\sigma}^+ c_{i,-\sigma} \rangle \langle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \rangle, \quad (2.13)$$

puis on linéarise ensuite selon ϕ . L'approximation ACDP (approximation auto-cohérente à deux particules) consiste plutôt à poser l'égalité:

$$U \delta \left[\langle c_{i,-\sigma}^+ c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \rangle \right] \approx U \delta \left[g_{\uparrow\downarrow}(i,i) \langle c_{i,-\sigma}^+ c_{i,-\sigma} \rangle \langle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \rangle \right], \quad (2.14)$$

$$g_{\uparrow\downarrow}(i,i) \equiv \frac{\langle n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle}{\langle n_{i,\uparrow} \rangle \langle n_{i,\downarrow} \rangle}, \quad (2.15)$$

où le symbole $\delta[\dots]$ indique qu'on linéarise par rapport à ϕ . La relation (2.14) a été choisie de façon à ce qu'elle devienne exacte lorsque $i=j$. Le terme $g_{\uparrow\downarrow}(i,i)$ joue le rôle d'une pondération de U pour la probabilité de double occupation d'un site. En linéarisant, on obtient

$$g_{\uparrow\downarrow}(i,i;t) = g_{\uparrow\downarrow}(0) + \sum_j \int dt' \frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(i,i;t)}{\delta n_{j,\uparrow}(t')} \delta \langle n_j(t') \rangle, \quad (2.16)$$

$$n_j(t') \equiv n_{j,\uparrow}(t') + n_{j,\downarrow}(t'),$$

où le terme $g_{\uparrow\downarrow}(0)$ est une constante alors que l'intégrale fait partie du terme de perturbation au premier ordre. La somme sur le spin est absente de ce dernier terme, car $g_{\uparrow\downarrow}(i,i;t)$ est symétrique pour n_{\uparrow} et n_{\downarrow} . Comme le terme de perturbation est couplé à la charge seulement, la réponse linéarisée est donc de la forme RPA, mais avec un U renormalisé:

$$U_{\text{spin}} \equiv g_{\uparrow\downarrow}(0) U. \quad (2.17)$$

On peut maintenant réécrire le terme magnétique de l'équation (2.8) sous la forme:

$$n - \frac{g_{\uparrow\downarrow}(0)}{2} n^2 = \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} S_{\text{spin}}(\mathbf{q}), \quad (2.18)$$

qui satisfait le théorème de Mermin-Wagner. Ce dernier stipule que, pour un système de dimension égale ou inférieure à deux, les ondes de spin détruisent l'ordre magnétique à longue portée. Comme le membre de gauche de l'équation (2.18) est constant, on voit immédiatement que l'intégrale du membre de droite ne diverge pas et que les corrélations ont une portée finie pour notre modèle à deux dimensions. Ainsi, l'inconnue $g_{\uparrow\downarrow}(i,i)$ peut être calculée par auto-cohérence à l'aide de la relation (2.18) et du théorème de fluctuation-dissipation

$$S_{\text{spin}}(\mathbf{q}) = T \sum_{i\omega_n} \frac{\chi_0(i\omega_n, \mathbf{q})}{1 - \frac{1}{2} [g_{\uparrow\downarrow}(0)U] \chi_0(i\omega_n, \mathbf{q})}, \quad (2.19)$$

qui nous donne aussi le facteur de structure magnétique. Il est possible de calculer le facteur de charge à partir de l'équation (2.16), mais un terme supplémentaire apparaîtra dans l'expression d'un U renormalisé, suite au couplage avec la charge du terme contenant l'intégrale.

Ce sont les caractéristiques de l'approximation auto-cohérente à deux particules qui la rendent intéressante. Ces principales caractéristiques sont qu'elle n'introduit aucun paramètre ajustable, elle tient compte des fluctuations à courte portée (quantiques) et à longue portée (thermiques) et elle satisfait les lois de conservation et le principe de Pauli.

CHAPITRE 3: SIMULATION MONTE CARLO QUANTIQUE

3.1 Introduction

Nous décrivons, dans ce chapitre, l'algorithme BSS nommé à partir des initiales de ses inventeurs: Blankenbecler, Scalapino et Sugar (Blankenbecler *et al.* 1981). Cet algorithme est aussi connu sous le nom de "méthode du déterminant". Son application au modèle de Hubbard a d'abord été faite par Hirsch (1985). Nous discuterons des limites de la méthode ainsi que des améliorations apportées pour obtenir un programme qui fonctionne. Le calcul d'une observable en pratique sera aussi abordé.

Considérons tout d'abord un réseau carré de N sites sur lesquels on distribue des électrons. En tenant compte du principe d'exclusion de Pauli, quatre états sont possibles pour chaque site du réseau, soit: aucun électron présent, un électron de spin *up* présent, un électron de spin *down* présent ou encore un électron de spins *up* et un électron de spin *down* présents. L'espace des états associés au système est donc 4^N . Le problème de la diagonalisation de la matrice associée au hamiltonien croît exponentiellement avec la taille du réseau, ce qui rend ce genre de calcul très exigeant au plan des ressources informatiques. On préfère donc utiliser un algorithme, dit "Monte Carlo quantique", qui permet d'échantillonner une partie des états du système afin d'obtenir une moyenne thermodynamique valable en un nombre d'opérations de calcul beaucoup moindre que celui nécessaire à un calcul complet. Cet échantillonnage est dit "selon l'importance" puisqu'il balaie les configurations du système en privilégiant celles qui ont la plus grande probabilité de se produire.

3.2 Calcul des observables

3.2.1 Décomposition de Trotter

Nous cherchons à calculer la moyenne thermodynamique¹ $\langle \hat{O} \rangle$ d'une observable \hat{O} à la température $\beta = 1 / k_B T$:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr}\{\exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})]\hat{O}\}}{\text{Tr}\{\exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})]\}}, \quad (3.1)$$

où \hat{H} est l'hamiltonien du système, et \hat{N} donne le nombre d'électrons dans l'état sur lequel cet opérateur agit. La trace est effectuée dans l'espace des états décrit plus haut. L'opérateur $\hat{H} - \mu\hat{N}$ contient une partie cinétique \hat{K} , diagonalisable dans l'espace de Fourier, et une partie potentielle \hat{V} , diagonalisable dans l'espace réel. Pour simplifier le calcul de la moyenne, on cherche à faire apparaître l'exponentielle de l'un ou l'autre des opérateurs \hat{K} et \hat{V} plutôt que l'exponentielle de leur somme. Pour ce faire, on utilise la décomposition dite "de Trotter" (Trotter 1959; Suzuki 1976; Barma *et al.* 1978) qui s'énonce comme suit,

$$e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = \prod_{\ell=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau(\hat{K} + \hat{V})} \approx \prod_{\ell=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau\hat{K}} e^{-\Delta\tau\hat{V}} + O((\Delta\tau)^2), \quad (3.2)$$

où $\Delta\tau\hat{K}$ et $\Delta\tau\hat{V}$ commutent maintenant à l'ordre $(\Delta\tau)^2$ et $\beta = N_\tau \Delta\tau$. Cette transformation introduit N_τ tranches de temps imaginaires. Cette appellation de tranches de temps imaginaire vient de l'analogie entre $e^{-\beta\hat{H}}$ et l'opérateur d'évolution $e^{i\hat{H}t}$ si on considère le temps t comme imaginaire.

¹Tout au long du présent travail, les opérateurs de seconde quantification seront coiffés d'un accent circonflexe à l'exception des opérateurs de création et d'annihilation c^+ et c .

Désormais, le système considéré s'étend dans les directions \hat{x} et \hat{y} de l'espace réel, ainsi que dans la direction du temps imaginaire. La précision des calculs augmentera avec le nombre de tranches de temps imaginaires utilisées.

3.2.2 Transformation de Hubbard-Stratonovitch et trace sur les fermions

On veut maintenant rendre l'hamiltonien quadratique en opérateurs de fermions, de façon à pouvoir calculer la trace exacte sur les variables fermioniques. On introduit la transformation de Hubbard-Stratonovitch discrète (Hirsch 1983),

$$e^{-\Delta\tau U \left(n_{i,\uparrow} - \frac{1}{2}\right) \left(n_{i,\downarrow} - \frac{1}{2}\right)} = e^{-\Delta\tau \frac{U}{4}} \frac{1}{2} \sum_{x_{i,\ell} = \pm 1} e^{\lambda x_{i,\ell} (2S_i \cdot \mathbf{l}_i)}, \quad (3.3)$$

où $\cosh \lambda = e^{\Delta\tau U/2}$ pour $U > 0$, et \mathbf{l}_i est arbitraire avec la condition $\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{l}_i = 1$. Dans le présent travail, \mathbf{l}_i est choisi de façon à pointer selon l'axe \bar{z} , ce qui forme la jauge dite "standard". L'indice i indique le site du réseau dans l'espace réel, alors que l'indice ℓ indique la tranche de temps imaginaire. Pour un nombre infini d'itérations Monte Carlo, les résultats obtenus ne dépendent pas de la jauge choisie, c'est-à-dire de la direction de \mathbf{l}_i . Cependant, comme la limite de temps de calcul restreint le nombre d'itérations, le choix de la jauge influence l'efficacité avec laquelle l'espace des phases est couvert au cours d'un calcul. Le choix adéquat d'une jauge pourrait permettre de contourner le fameux "problème du signe" qui sera détaillé plus loin.

Suite à cette transformation, on peut effectuer la trace exacte sur les variables classiques $x_{i,\ell}$. Il y a désormais un champ de Hubbard-Stratonovitch $x_{i,\ell} = \pm 1$ pour chaque point du réseau espace-temps. La fonction de partition à évaluer prend la forme

$$Z = \sum_{\{x_{i,\ell}\}} \prod_{\sigma = \pm 1} Tr \left[\prod_{\ell=1}^{N_\tau} \hat{D}_\ell^\sigma(\{x_{i,\ell}\}) \right], \quad (3.4)$$

où la somme est effectuée sur toutes les configurations $\{x_{i,\ell}\}$ possibles. L'équation (3.4) demande la définition de l'opérateur d'évolution du temps imaginaire $\ell-1$ au temps imaginaire ℓ pour la $\ell^{\text{ième}}$ tranche de temps imaginaire d'épaisseur $\Delta\tau$:

$$\hat{D}_\ell^\sigma(\{x_{i,\ell}\}) \equiv e^{-\Delta\tau \sum_{i,j} c_{i,\sigma}^+ K_{i,j} c_{j,\sigma}} e^{\sum_{i,j} c_{i,\sigma}^+ (V_{i,j})_\ell^\sigma c_{j,\sigma}}, \quad (3.5)$$

où on définit également

$$K_{i,j} \equiv \begin{cases} -t & \text{si les sites } i \text{ et } j \text{ sont premiers voisins} \\ -t' & \text{si les sites } i \text{ et } j \text{ sont deuxièmes voisins} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (3.6)$$

$$(V_{i,j})_\ell^\sigma \equiv \delta_{i,j} \left[\sigma \lambda x_{i,\ell} + \Delta\tau \left(\mu - \frac{U}{2} \right) \right], \quad (3.7)$$

Le calcul de la trace (3.4) est souvent fait à l'aide de variables de Grassman. On obtient (Hirsch 1985; Loh *et al.* 1992; annexe D du texte de Tremblay, école d'été du CRPS 1994):

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{x_{i,\ell}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} \det[\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma \mathbf{B}_{N_\tau-1}^\sigma \dots \mathbf{B}_1^\sigma] = \sum_{\{x_{i,\ell}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} \det\left[\left(G^\sigma(\{x_{i,\ell}\})\right)^{-1}\right], \\ &= \sum_{\{x_{i,\ell}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} e^{\text{Tr}[\ln(S^\sigma(\{x_{i,\ell}\}))]}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\mathbf{B}_\ell^\sigma \equiv e^{-\Delta\tau K} e^{V_\ell^\sigma}; \quad G^\sigma \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{I} & 0 & 0 & \dots & 0 & -\mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma \\ -\mathbf{B}_1^\sigma & \mathbf{I} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{B}_2^\sigma & \mathbf{I} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\mathbf{B}_{N_\tau-1}^\sigma & \mathbf{I} \end{bmatrix}^{-1} \equiv (S^\sigma)^{-1}, \quad (3.9)$$

où les matrices \mathbf{B}_ℓ^σ sont de dimension $N \times N$ et G^σ de dimension $(N_\tau N) \times (N_\tau N)$. Le problème équivaut désormais à celui d'électrons sans interaction se déplaçant dans un champ

magnétique pointant dans la direction z , et dont la valeur en chaque point (i, ℓ) du réseau espace-temps est déterminée par le $x_{i,\ell}$ correspondant.

On passe ensuite au formalisme des fonctions de Green. En définissant

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}(\ell_1) &\equiv e^{\ell_1 \Delta\tau(\hat{H}-\mu N)} c_{i,\sigma} e^{-\ell_1 \Delta\tau(\hat{H}-\mu N)}, \\ c_{i,\sigma}^+(\ell_1) &\equiv e^{\ell_1 \Delta\tau(\hat{H}-\mu N)} c_{i,\sigma}^+ e^{-\ell_1 \Delta\tau(\hat{H}-\mu N)}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

on obtient les éléments de la matrice G^σ de l'équation (3.8) pour $\ell_1 > \ell_2$ (voir l'annexe F du texte de Tremblay, école d'été du CRPS 1994; ainsi que Negele *et al.* 1988),

$$G^\sigma(i, \ell_1; i, \ell_2) \equiv \langle c_{i,\sigma}(\ell_1) c_{i,\sigma}^+(\ell_2) \rangle_{\{x\}}^0 = \left[\frac{1}{\mathbf{I} + \mathbf{B}_{\ell_1} \dots \mathbf{B}_1 \mathbf{B}_{N_\tau} \dots \mathbf{B}_{\ell_1+1}} \mathbf{B}_{\ell_1} \dots \mathbf{B}_{\ell_2+1} \right]_{i,j}, \quad (3.11)$$

où la notation $\langle \rangle_{\{x\}}^0$ indique que la moyenne thermodynamique est calculée pour des électrons indépendants se déplaçant dans le champ $\{x_{i,\ell}\}$. Pour $\ell_1 = \ell_2$ dans l'équation (3.11), le calcul de la matrice G^σ se réduit à:

$$G_{i,j}^\sigma(\ell, \ell) \equiv G^\sigma(i, \ell; j, \ell) = \left[\frac{\mathbf{I}}{\mathbf{I} + \mathbf{B}_\ell^\sigma \dots \mathbf{B}_1^\sigma \mathbf{B}_{N_\tau}^\sigma \dots \mathbf{B}_{\ell+1}^\sigma} \right]_{i,j}. \quad (3.12)$$

À l'aide du théorème de Wick, toutes les observables peuvent être exprimées en terme de ces fonctions de Green qui jouent le rôle de propagateurs dans l'espace-temps pour le problème d'électrons sans interactions.

3.2.3 Calcul des observables par la méthode Monte Carlo: introduction du signe du déterminant

À partir de l'équation (3.4), et de ce qui précède, on peut exprimer la moyenne thermodynamique pour une observable,

$$\langle \hat{o} \rangle = \frac{\sum_{\{x_{i,\ell}\}} \langle \hat{o} \rangle_{\{x\}}^0 \prod_{\sigma=\pm 1} \det[\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_r}^\sigma \mathbf{B}_{N_r-1}^\sigma \dots \mathbf{B}_1^\sigma]}{\sum_{\{x_{i,\ell}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} \det[\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_r}^\sigma \mathbf{B}_{N_r-1}^\sigma \dots \mathbf{B}_1^\sigma]}, \quad (3.13)$$

où $\langle \rangle_{\{x\}}^0$ indique qu'on calcule la moyenne de l'observable pour des électrons indépendants et une configuration $\{x_{i,\ell}\}$ donnée du champ de Hubbard-Stratonovitch. La quantité

$$\prod_{\sigma=\pm 1} \det[\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_r}^\sigma \mathbf{B}_{N_r-1}^\sigma \dots \mathbf{B}_1^\sigma] = \prod_{\sigma=\pm 1} \det[(G^\sigma)^{-1}], \quad (3.14)$$

joue le rôle du poids de Boltzmann dans les simulations Monte Carlo classiques. Ce qui distingue essentiellement les simulations MC quantiques des simulations MC classiques, c'est que le signe de ce poids peut être négatif dans le cas quantique. Or, pour être en mesure d'appliquer l'algorithme dit du "bain de chaleur" (Loh *et al.* 1992), le signe du poids de Boltzmann doit être positif. On définit donc la valeur absolue suivante comme poids,

$$P(\{x_{i,\ell}\}) = \left| \prod_{\sigma=\pm 1} \det[\mathbf{I} + \mathbf{B}_{N_r}^\sigma \mathbf{B}_{N_r-1}^\sigma \dots \mathbf{B}_1^\sigma] \right| = \left| \prod_{\sigma=\pm 1} \det[(G^\sigma)^{-1}] \right|, \quad (3.15)$$

puis on tient compte séparément du signe lors du calcul des observables. La moyenne thermodynamique d'une observable devient ainsi,

$$\langle \hat{o} \rangle = \frac{\sum_{\{x_{MC}\}} \langle \hat{o} \rangle_{\{x\}}^0 s(\{x_{i,\ell}\})}{\sum_{\{x_{MC}\}} s(\{x_{i,\ell}\})}; \quad s(\{x_{i,\ell}\}) \equiv 1 \times \text{signe} \left(\prod_{\sigma=\pm 1} \det[(G^\sigma)^{-1}] \right), \quad (3.16)$$

où la somme sur les $\{x_{MC}\}$ parcourt les configurations Monte Carlo générées par échantillonnage selon l'importance en utilisant $P(\{x_{i,\ell}\})$ comme poids de Boltzmann.

3.3 Un cycle de mise à jour

Un cycle de mise à jour consiste à obtenir une nouvelle configuration des champs de Hubbard-Stratonovitch $\{x_{i,\ell}\}$ à partir de la précédente en balayant le réseau réel pour passer d'une tranche de temps imaginaire à la suivante.

Avant de démarrer la simulation, on assigne les valeurs +1 ou -1 au hasard à tous les champs $x_{i,\ell}$, ce qui correspond à placer le système à une température quelconque finie. À l'aide de l'équation (3.12), on calcule la fonction de Green au temps $\ell=0$. On procède ensuite au réchauffement du système, qui consiste à faire des mises-à-jour sans calculer de moyenne des observables. Ce réchauffement a pour objet de placer le système en équilibre thermique avec le bain de chaleur de l'ensemble Grand canonique utilisé.

Pour une tranche de temps imaginaire ℓ donnée, on génère les $x_{i,\ell}$ en balayant les sites du réseau réel. Pour chaque site, on effectue une bascule $x_{i,\ell} \rightarrow -x_{i,\ell}$ qui sera acceptée selon une certaine probabilité donnée par

$$P(x_{i,\ell} \rightarrow -x_{i,\ell}) = \frac{|R_{\uparrow}R_{\downarrow}|}{1+|R_{\uparrow}R_{\downarrow}|}; \quad R_{\sigma} = \frac{\det\left[\left(G^{\sigma'}\right)^{-1}\right]}{\det\left[\left(G^{\sigma}\right)^{-1}\right]}, \quad (3.17)$$

où $G^{\sigma'}$ réfère à la nouvelle configuration et G^{σ} à la précédente. Si le changement n'est pas accepté, on passe au site suivant de la même tranche de temps. Si le changement est accepté, la fonction de Green est recalculée avant de passer au site suivant, ce qui nécessite le calcul de N^2 termes.

Après avoir balayé l'ensemble des sites du réseau réel, on passe à la tranche de temps suivante. On a alors besoin de calculer la fonction de Green à la tranche $\ell+1$. On peut utiliser l'équation (3.12) pour ce faire. Comme ce calcul est très long, on peut calculer beaucoup plus

rapidement la fonction de Green à la tranche $\ell+1$, à partir de celle à la tranche ℓ , à l'aide de l'équation

$$G^\sigma(\ell+1, \ell+1) = \mathbf{B}_\ell^\sigma \mathbf{G}^\sigma(\ell, \ell) (\mathbf{B}_\ell^\sigma)^{-1}, \quad (3.18)$$

qui est cependant nettement moins stable numériquement. C'est pourquoi, après avoir utilisé (3.18) pendant un certain nombre de tranches de temps, il faut recalculer la fonction de Green au complet à l'aide de (3.12).

On dit qu'on effectue une "mesure" lorsqu'on calcule une observable à l'aide de l'équation (3.16) après la mise-à-jour d'une tranche de temps. Il n'est pas facile d'évaluer l'erreur statistique sur un ensemble de mesures d'une observable. En effet, une configuration d'une tranche de temps donnée est corrélée à la précédente, car elle est issue de cette dernière à partir de laquelle on a basculé quelques $x_{i,\ell}$. Pour contourner le problème, on regroupe les mesures par blocs. On calcule la moyenne pour chaque bloc et on estime l'écart quadratique moyen de nos mesures comme étant celui qu'ont les blocs entre eux.

3.4 Limites de la méthode

3.4.1 Problème du signe du déterminant

La principale limitation de la présente méthode numérique est sans conteste le "signe du déterminant". Le signe global d'une simulation est calculé en effectuant la moyenne des "+1" et des "-1" obtenus lors des calculs des déterminants de (3.14). Lorsque, dans l'équation (3.16), le signe devient trop petit, les valeurs mesurées pour les observables forment une gaussienne très aplatie, résultant en un écart-type très grand. La moyenne calculée pour l'observable n'a alors aucune signification. La figure 3-1 montre le signe du déterminant en fonction du remplissage pour des réseaux

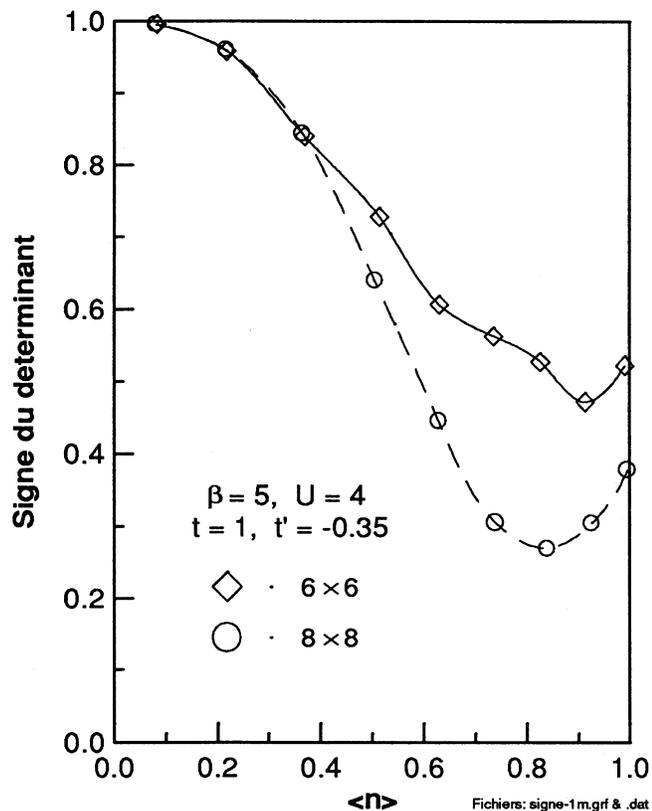


Fig. 3-1: Signe moyen du déterminant en fonction du remplissage pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins. On voit la diminution du signe avec l'augmentation de la taille du réseau.

6x6 et 8x8. Le problème du signe est généralement plus prononcé pour une valeur croissante du nombre de sites, de β , de U , de t , de t' et avec l'ajout des sauts vers les seconds voisins. L'effet néfaste du signe sur l'écart-type de la moyenne d'une observable a un comportement

apparenté à celui d'une exponentielle, ce qui impose une très forte limitation sur le domaine des paramètres pour lesquels les simulations sont possibles².

3.4.2 Conditions aux frontières périodiques

Pour éviter d'important effets de bord dans les réseaux utilisés, on emploie des conditions aux frontières périodiques. Ceci équivaut à enrouler le réseau réel sur lui-même de façon à former un tore. Malgré cela, les effets de taille finie du réseau demeurent très importants. Il est donc primordial de pouvoir calculer les observables pour différentes tailles du réseau afin d'extrapoler vers la limite de taille infinie.

Les effets de taille apparaissent lorsqu'une longueur de corrélation devient égale ou supérieure à la dimension réelle du réseau avant l'enroulement en tore. Il y a deux longueurs de corrélation qui peuvent conduire à des effets de taille. La première est celle de phénomènes collectifs comme la supraconductivité et la seconde est la longueur de Louis de Broglie liée à la température. Nous reparlerons de ces effets de taille finie à la section 4.2 et nous les illustrerons avec le calcul de la partie réelle de la susceptibilité magnétique à la section 4.4.3.

3.5 Améliorations numériques apportées à la méthode

3.5.1 Stabilisation numérique à basse température

Considérons le problème sans interactions ($U=0$) pour lequel les valeurs propres de l'hamiltonien s'étendent de $-4t$ à $+4t$. À titre d'exemple, pour la basse température $\beta=10/t$, les valeurs propres de $e^{-\beta\hat{H}}$ s'étalent de e^{-40} à e^{40} . La précision des ordinateurs, limitée à 15 chiffres significatifs, ne permet pas de garder toute l'information en calculant la fonction de

²Pour une bonne analyse des effets du signe de déterminant, voir Loh *et al.* (1990).

Green avec l'équation (3.12). De plus, seules les valeurs propres situées autour de 1 (le niveau de Fermi) sont physiquement importantes. Le calcul de la fonction de Green nécessite donc l'utilisation de techniques d'orthogonalisation qui permettent de séparer les éléments de matrices qui diffèrent de plusieurs ordres de grandeur. Nous vous référons aux textes de Tremblay (1994) et de White *et al.* (1989) pour le détail de ces techniques.

3.5.2 Matrices éparses

Lors d'une simulation, la plus grande part du temps de calcul est utilisée pour multiplier des matrices \mathbf{B}_i^σ ensemble. Dans l'équation (3.9), la matrice $e^{V_i^\sigma}$ est déjà diagonale, alors que la matrice $e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}$ est pleine. La multiplication de matrices pleines nécessite N^3 opérations, mais on peut ramener ce nombre d'opérations à N^2 en rendant la matrice $e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}$ éparses. On relie tout d'abord les sites du réseau par des liens qu'on qualifie de pairs et impairs, puis on divise la matrice \mathbf{K} en sous-matrices:

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_p^x + \mathbf{K}_i^x + \mathbf{K}_p^y + \mathbf{K}_i^y + \mathbf{K}_p^{x'} + \mathbf{K}_i^{x'} + \mathbf{K}_p^{y'} + \mathbf{K}_i^{y'} , \quad (3.19)$$

où x et y sont dirigés selon les axes des premiers voisins, alors que x' et y' sont dirigés selon les axes des deuxièmes voisins (en diagonale). Les indices "p" et "i" signifient *pair* et *impair* respectivement. Les figures (3-2) et (3-3) illustrent la disposition des liens pairs et impairs, dans les directions \vec{x} et \vec{x}' , entre les sites premiers et seconds voisins pour un réseau carré 4×4 . Les liens sont construits de la même façon pour les directions \vec{y} et \vec{y}' .

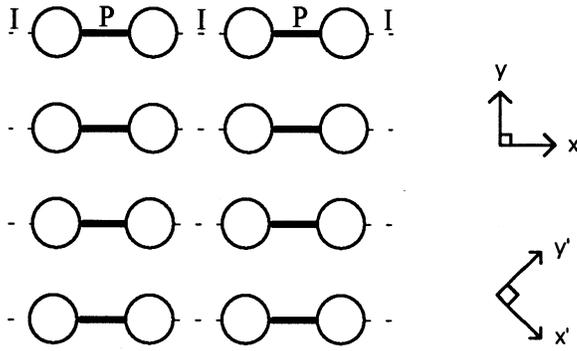


Fig. 3-2: Liens dans la direction \vec{x} pour les sauts vers les premiers voisins sur un réseau carré 4×4 . Les liens gras marqués d'un P sont pairs (\mathbf{K}_p^x) alors que les liens pointillés marqués d'un I sont impairs (\mathbf{K}_i^x). Les conditions aux frontières périodiques sont illustrées par des liens ouverts.

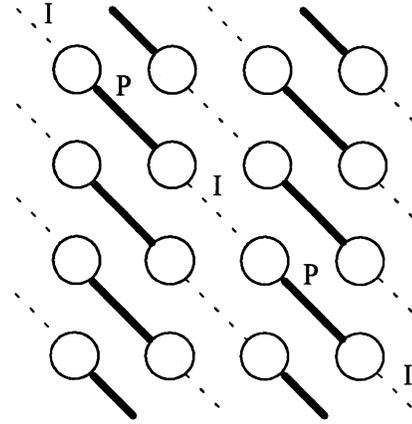


Fig. 3-3: Liens dans la direction \vec{x}' pour les sauts vers les seconds voisins sur un réseau carré 4×4 . Les liens gras marqués d'un P sont pairs ($\mathbf{K}_p^{x'}$) alors que les liens pointillés marqués d'un I sont impairs ($\mathbf{K}_i^{x'}$). Les conditions aux frontières périodiques sont illustrées par des liens ouverts.

Les matrices \mathbf{K}_α^β et $e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_\alpha^\beta}$ sont diagonales par blocs. Pour épargner du temps de calcul, on utilise de nouveau la décomposition de Trotter pour rendre la matrice $e^{-\Delta\tau \mathbf{K}}$ diagonale par blocs elle aussi:

$$\begin{aligned}
 e^{-\Delta\tau \mathbf{K}} &= e^{-\Delta\tau (\mathbf{K}_p^x + \mathbf{K}_i^x + \mathbf{K}_p^y + \mathbf{K}_i^y + \mathbf{K}_p^{x'} + \mathbf{K}_i^{x'} + \mathbf{K}_p^{y'} + \mathbf{K}_i^{y'})} \\
 &\approx e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_p^x} e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_i^x} e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_p^y} e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_i^y} e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_p^{x'}} e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_i^{x'}} e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_p^{y'}} e^{-\Delta\tau \mathbf{K}_i^{y'}}
 \end{aligned}
 \tag{3.20}$$

où on introduit une erreur systématique de l'ordre de $(\Delta\tau)^2$. C'est une opération très avantageuse, car diviser $\Delta\tau$ par deux double le temps de calcul, mais diminue l'erreur systématique d'un facteur quatre. Après toutes les modifications apportées à la méthode numérique, le temps de calcul croît généralement comme $N_{\text{sites}}^3 N_\tau$.

3.6 Le calcul d'une observable en pratique

3.6.1 Extrapolation pour contourner l'erreur systématique en $(\Delta\tau)^2$

L'erreur systématique est due aux décompositions de Trotter (3.2) et (3.20). On peut contourner le problème en calculant les observables pour plusieurs valeurs de $\Delta\tau$, puis en extrapolant vers $\Delta\tau=0$. La figure 3-4 illustre une telle extrapolation pour le cas de l'énergie cinétique pour des électrons libres.

Si la précision recherchée est de l'ordre de quelques pourcents, il n'est pas nécessaire d'effectuer la procédure qui précède, à condition que $\Delta\tau$ soit assez petit et que le nombre de mesures soit suffisamment grand. Le calcul de l'incertitude sur l'observable mesurée est abordé plus en détail dans la prochaine section.

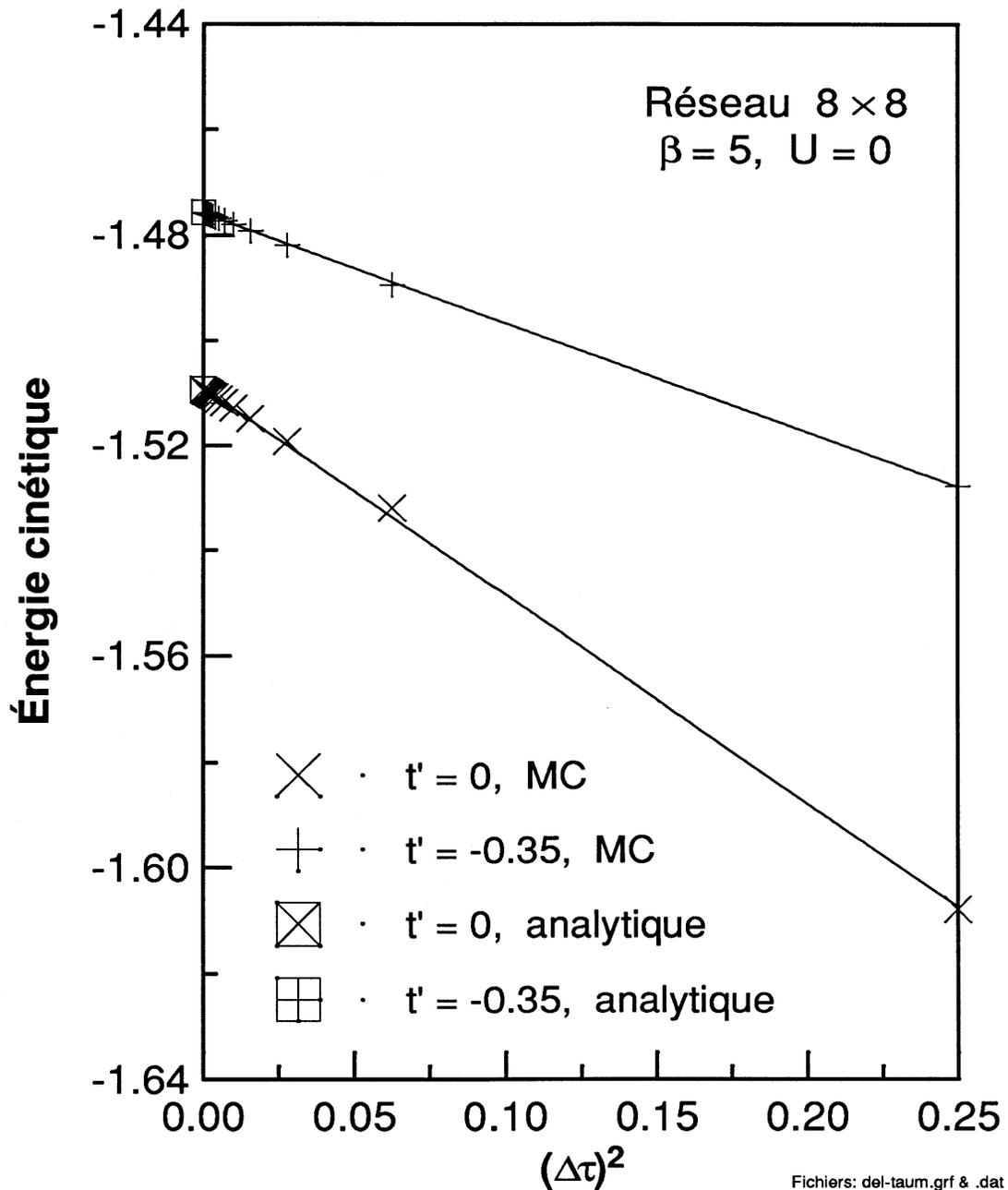


Fig. 3-4: Convergence linéaire de l'observable énergie cinétique en fonction de $(\Delta\tau)^2$ pour le modèle de Hubbard sans interactions ($U=0$). Les valeurs de l'énergie cinétique, pour le cas $(\Delta\tau)^2=0$, ont été calculées à l'aide de la relation exacte (2.2) de la dispersion pour les électrons libres. Toutes les autres valeurs ont été obtenues par simulation Monte Carlo.

3.6.2 Méthodologie pour obtenir la valeur et l'incertitude d'une observable

Comme la méthode Monte Carlo est basée essentiellement sur l'échantillonnage statistique de l'espace des phases accessible au système considéré, il importe de parcourir uniformément cet espace. Or, lors de certaines simulations, on observe un phénomène de "collement" de l'échantillonnage dans certaines régions de l'espace. Pour éviter le collement, il est préférable d'effectuer plusieurs simulations avec les mêmes paramètres de départ, mais en initialisant le générateur de nombres aléatoires avec un nombre différent pour chacune. On calcule ensuite la moyenne pondérée et l'écart-type pondéré pour l'ensemble de ces simulations. Pour ce calcul, nous vous référons à la méthode du maximum de vraisemblance présentée à l'annexe A du présent travail.

La figure 3-5 montre l'évolution de la moyenne de la susceptibilité magnétique uniforme $S(0,0)$ et du remplissage $\langle n \rangle$ en fonction du nombre de mesures effectuées. La valeur de chaque point du graphique est une moyenne de toutes les mesures qui le précède, ce qui résulte en une convergence de l'écart-type comme $1/\sqrt{M}$, où M est le nombre de mesures. La figure 3-6 illustre cette convergence que prédit la théorie pour des mesures non corrélées et échantillonnant bien l'espace des phases. On constate qu'on peut extrapoler les droites de la figure 3-6 vers une valeur près de zéro. Les oscillations de $S(0,0)$ lors des premières mesures indiquent que le réchauffement du système n'était peut-être pas encore tout à fait complété.

Par contre, la figure 3-7 montre un cas où il y a collement dans quelques régions de l'espace des phases. En conséquence, les données de la figure 3-8 ne s'extrapolent pas facilement vers zéro.

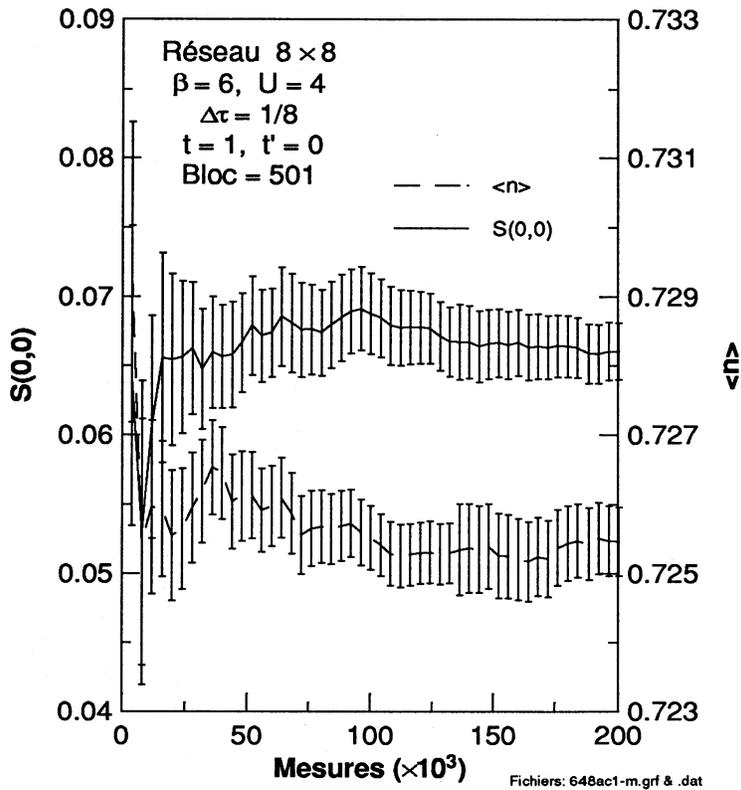


Fig. 3-5: Convergence normale des valeurs moyennes de la susceptibilité magnétique uniforme $S(0,0)$ et du remplissage $\langle n \rangle$ pour une simulation MC avec sauts vers les premiers voisins.

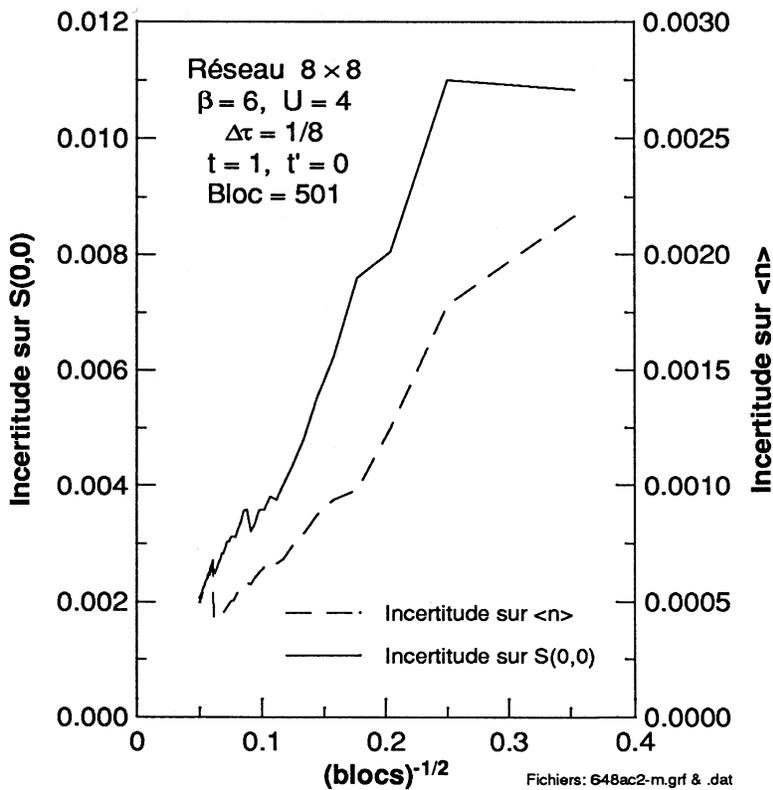


Fig. 3-6: Convergence normale de l'écart-type sur les observables de la figure 3-5. Les sauts brusques de l'incertitude sont peu importants. On extrapole les droites vers des valeurs situées près de zéro.

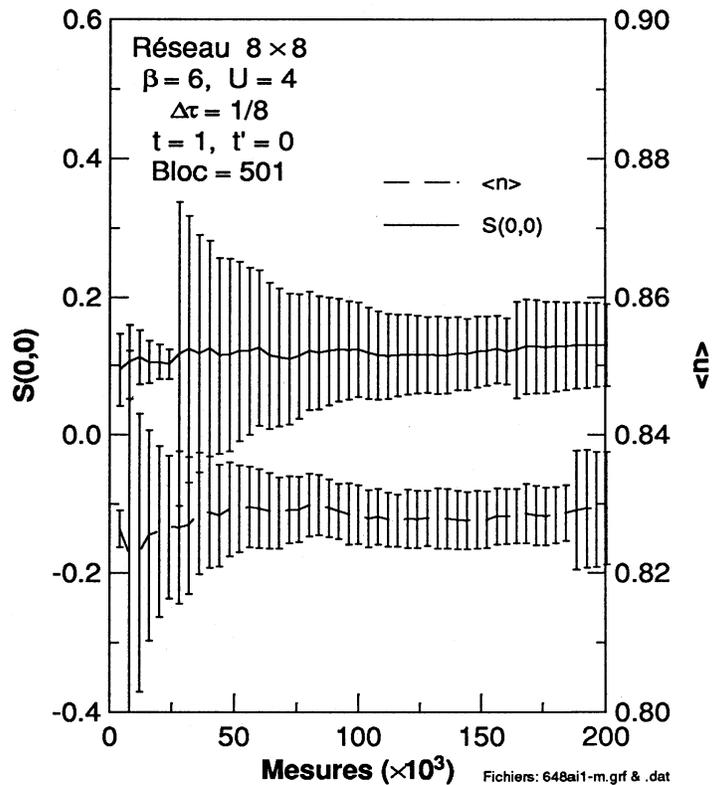


Fig. 3-7: Convergence anormale des valeurs moyennes de la susceptibilité magnétique uniforme $S(0,0)$ et du remplissage $\langle n \rangle$ pour une simulation MC avec sauts vers les premiers voisins. On voit clairement les sauts de l'incertitude, liés au phénomène de collement. Un saut apparaît lorsque l'échantillonnage passe brusquement à une autre région de l'espace des phases.

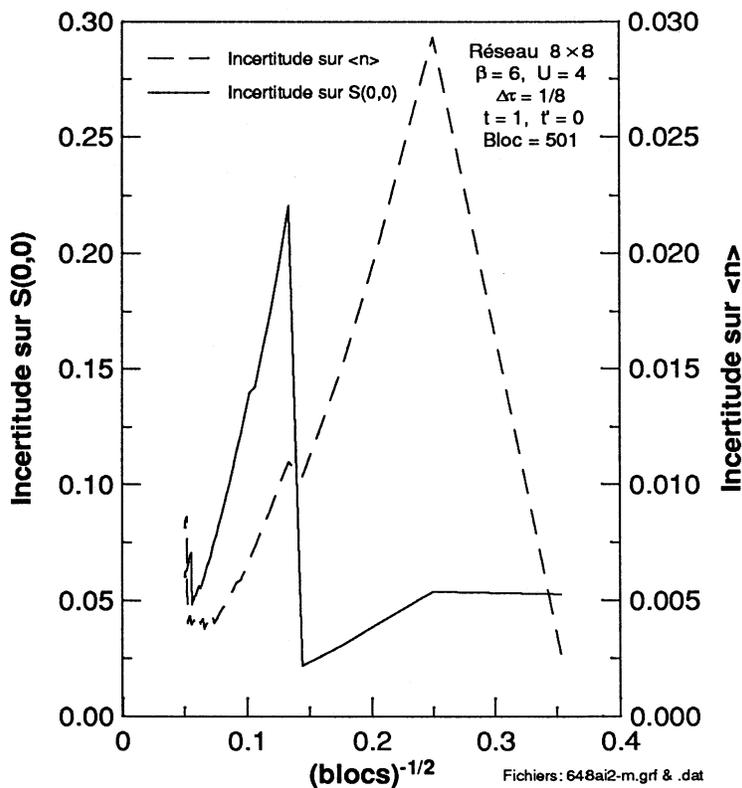


Fig. 3-8: Convergence de l'écart-type sur les observables de la figure 3-7. Les sauts brusques de l'incertitude sont très importants, ce qui indique un phénomène de collement prononcé. Les courbes ne s'extrapolent pas facilement vers des valeurs situées près de zéro.

CHAPITRE 4: RÉSULTATS ET ANALYSE

4.1 Problématique

Comme il est possible que des excitations magnétiques (magnons) remplacent les phonons comme source de la formation des paires de Cooper dans les supraconducteurs, il est intéressant d'étudier l'interdépendance des propriétés magnétiques et supraconductrices. Une comparaison entre des expériences et des calculs (Hybertsen *et al.* 1990; Hybertsen *et al.* 1992) a démontré que les paramètres du modèle de Hubbard, appliqué aux supraconducteurs à haute température de transition, prennent les valeurs suivantes: $t \approx 0.43 \text{ eV}$, $t' \approx -0.14 \text{ eV}$ et $U \approx 9t$. L'interaction U est de l'ordre de la largeur de bande qui est $W \approx 8t$. On doit donc résoudre le modèle de Hubbard en couplage intermédiaire.

Nous nous poserons deux questions concernant les résultats qui seront présentés dans ce chapitre:

- 1) L'ajout du terme de sauts vers les seconds voisins permet-il une meilleure explication de la physique observée chez les supraconducteurs à haute température de transition?
- 2) Comment expliquer, avec des arguments physiques, les résultats obtenus lors des simulations Monte Carlo?

Dans ce travail, on exprime la température en unités d'énergie et l'énergie U dans des unités telles que $t=1$ et $k_B=1$. Le pas du réseau est lui aussi choisi égal à l'unité. Dans les calculs qui feront intervenir le spin, on a choisi $\hbar=2$.

4.2 Effets de taille finie

Des effets liés à la taille finie du réseau apparaissent dès qu'une longueur de corrélation du système étudié devient comparable ou plus grande que la taille du réseau utilisé en simulation. On distingue deux longueurs caractéristiques pour les effets de taille finie apparaissant dans les résultats obtenus par simulation Monte Carlo. La première longueur de corrélation qui nous préoccupe, de type bosonique, est celle liée au phénomène collectif antiferromagnétique. La seconde longueur de corrélation qui nous intéresse est la longueur thermique de Louis de Broglie liée aux fermions. Cette dernière devient de l'ordre de grandeur de la taille du réseau lorsque la température est plus petite que la séparation entre les niveaux discrets d'énergie du système qui formeraient un continuum pour un réseau de taille infinie. Ces deux derniers phénomènes, longueur thermique et longueur de corrélation liée à une transition de phase, commandent donc d'augmenter la taille du réseau lorsqu'on abaisse la température, ce qui est très exigeant du point de vue du calcul numérique. Le calcul de la partie réelle de la susceptibilité magnétique de la section 4.4.3 illustre bien l'augmentation des effets de taille avec la diminution de la température.

4.3 Résultats expérimentaux: susceptibilité magnétique

La figure 4-1 montre la susceptibilité magnétique du composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ dans l'état normal, mesurée à l'aide d'expériences de magnétométrie. Pour une température donnée, on peut voir que la susceptibilité augmente avec le dopage en trous à partir du demi-remplissage, jusqu'à un certain point de revirement à partir duquel elle diminue avec le dopage. Dans le présent travail, il sera intéressant de constater que les simulations Monte Carlo effectuées reproduisent qualitativement ce comportement.

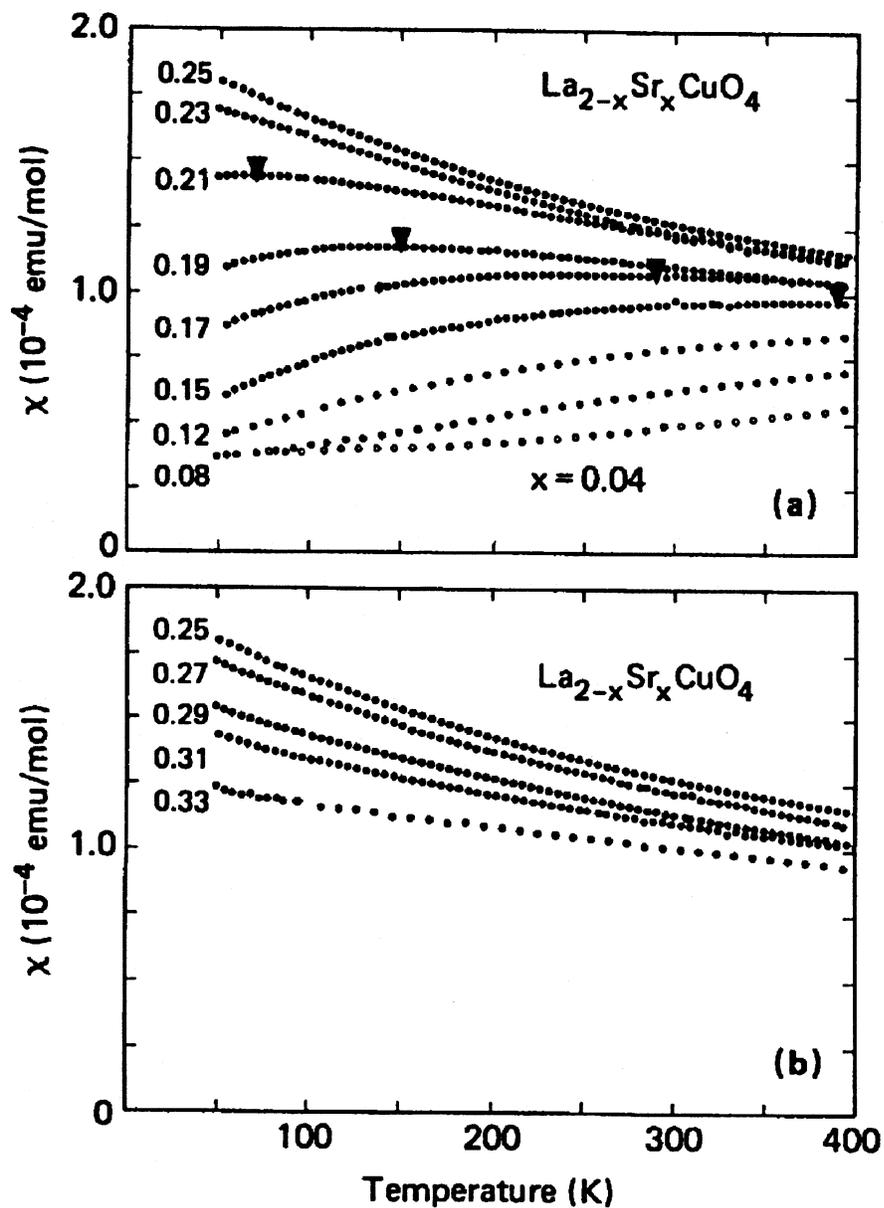


Fig 4-1: Susceptibilité magnétique expérimentale en fonction de la température du composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ dans l'état normal pour différentes valeurs de dopage en trous (x). La susceptibilité provient de mesures magnétométriques. Les pointes de flèches indiquent les températures pour lesquelles la susceptibilité est maximale pour un dopage donné. Source: Torrance et al. 1989.

4.4 Facteur de structure magnétique et approximation auto-cohérente à deux particules

4.4.1 Calcul du facteur de structure magnétique

Le facteur de structure magnétique est défini par:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \left\langle (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})(n_{j,\uparrow} - n_{j,\downarrow}) \right\rangle, \quad (4.1)$$

où N_s est le nombre de sites et $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ sont les vecteurs positions des sites i et j considérés. La méthode la plus efficace pour obtenir cette quantité de façon analytique est celle dite de l'approximation "auto-cohérente à deux particules (ACDP)" décrite à la section 2.3 du présent travail (Vilk *et al.* 1994). Ces calculs donnent un bon accord avec les simulations Monte Carlo (MC) pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers voisins, et ce pour des couplages faibles à intermédiaires ($U \leq 4$). Nous étudierons des résultats en ce sens dans les sections qui suivent.

4.4.2 Susceptibilité magnétique uniforme

Au vecteur d'onde $\mathbf{q} = 0$, le facteur de structure magnétique est relié à la susceptibilité magnétique uniforme par le théorème de fluctuation-dissipation. On a donc

$$S(\mathbf{q} = 0) = \chi T, \quad (4.2)$$

où T est la température. Tel que mentionné à la section 4.3, la susceptibilité magnétique uniforme χ peut être mesurée, entre autre, par des expériences de magnétométrie.

La signature expérimentale de la susceptibilité magnétique uniforme extrapolée à $T=0$, pour les supraconducteurs à haute température de transition, est son augmentation puis

sa diminution lorsqu'on augmente le dopage en trous. Pour les calculs MC effectués dans ce travail, la valeur $t' = -0.35$ a été choisie suite à des calculs de la susceptibilité magnétique uniforme en fonction du remplissage moyen par site pour $U=0$. On peut voir quelques résultats, dans le régime sans interaction, aux figures 4-2, 4-3 et 4-4. Les valeurs de la taille du réseau, de β et de t' choisies pour les simulations MC qui suivent se veulent un compromis entre le temps de calcul requis et la nécessité d'éviter que les effets de taille ne masquent l'augmentation de χT lorsque $\langle n \rangle$ s'éloigne de 1 en diminuant. La figure 4-2 montre clairement que la taille 4×4 est insuffisante pour reproduire qualitativement la pente expérimentale négative de χT près du demi-remplissage à $U=0$ et $\beta=6$, et ce sur une grande plage de valeurs de t' . Cependant, la figure 4-3 indique que pour des réseaux 10×10 l'allure générale de la susceptibilité magnétique uniforme, à $U=0$ et $\beta=5$, s'approche des résultats expérimentaux lorsqu'on choisit $t' = -0.35$. La figure 4-4 montre la susceptibilité magnétique uniforme à $U=0$ en fonction de la taille du réseau utilisé à $\beta=5$ et $t' = -0.35$. On constate que la taille 10×10 semble être le meilleur compromis pour bien reproduire les résultats expérimentaux d'un réseau infini.

Physiquement, le réseau le plus réaliste est celui pour lequel il y a le plus grand nombre possible de vecteurs d'onde, permis par la taille du système, situés sur la courbe isopotentielle correspondant à la singularité de Van Hove de la surface de Fermi. Les figures 4-5 et 4-6 montrent que les vecteurs d'onde permis par un réseau 10×10 concordent mieux avec l'isopotentielle de la singularité de Van Hove pour $t' = -0.35$ que pour $t' = -0.20$. Ceci corrobore le choix de la valeur de t' que nous avons fait précédemment. Il est cependant à noter que la puissance de calcul disponible pour ce travail rend plus pratique le choix de la taille 8×8 tout en conservant $t' = -0.35$.

Les figures 4-7 à 4-9 montrent la susceptibilité magnétique uniforme calculée par MC et ACDP pour différentes tailles de réseaux à $t'=0$ et $t'=-0.35$. Le remplissage $\langle n \rangle$ donne le nombre moyen d'électrons par site, alors que le dopage en trous est donné par $1-\langle n \rangle$.

Pour chaque point des simulations MC 6×6 et 8×8 de la figure 4-7, une moyenne du résultat de deux à cinq calculs différents a été effectuée à l'aide de la méthode du maximum de vraisemblance (voir annexe A). Chaque calcul, comprenant de 1×10^3 à 10×10^3 réchauffements et de 600×10^3 à 2×10^6 mesures, a été démarré en initialisant le générateur de nombres aléatoires avec un nombre différent. L'intervalle entre deux tranches de temps imaginaire varie de $\frac{1}{8}$ à $\frac{1}{16}$. Le temps de calcul moyen (sans la période de réchauffement) pour chaque point du graphique est de 120 heures à 26 MFlops³ pour les points qui posent le moins de problèmes avec le signe du déterminant, alors que les points autour de $\langle n \rangle = 0.9$ nécessitent 300 heures à 26 MFlops. La période de réchauffement n'est pas comptabilisée dans les temps donnés ici, car les présents calculs ont été faits à la suite de ceux des corrélations supraconductrices (voir la section suivante) qui eux comprennent une période de réchauffement. Chaque calcul de la susceptibilité a été démarré à partir de la configuration des champs de Hubbard-Stratonovitch obtenue à la suite d'un calcul pour les corrélations supraconductrices avec les mêmes paramètres de départ (t' , β , $\Delta\tau$, etc.). En d'autres termes, chaque calcul des corrélations supraconductrices sert de réchauffement à un calcul de la susceptibilité, ce qui permet un gain appréciable de temps pour l'obtention des résultats. Cette méthode de calcul "en cascade" est justifiée par la convergence environ dix fois plus rapide des corrélations supraconductrices, par rapport à celle de la susceptibilité, lors de la simulation.

³L'unité *MFlops* signifie "Millions of FLOating Point operations per Second", i.e. "Millions d'opérations en virgule flottante par seconde". L'opération en virgule flottante typique est la multiplication de deux nombres réels en double précision.

Bien que les figures 4-7 à 4-9 décrivent qualitativement le maximum observé expérimentalement pour la susceptibilité magnétique uniforme, l'origine physique des maximums diffère entre le cas de la figure 4-7 et celui des figures 4-8 et 4-9.

Dans le cas de la figure 4-7 (modèle avec $t'=0$), le maximum de la susceptibilité à $U=4$ provient uniquement des interactions entre les électrons, car la courbe avec $U=0$ n'a pas de maximum en fonction du remplissage. Par contre, on peut voir sur les figures 4-8 et 4-9 que la courbe avec $U=0$ présente déjà un maximum pour le modèle avec $t' \neq 0$. Sur ces deux figures, les effets de taille finie proviennent de la longueur d'onde de L. de Broglie qui est un peu plus grande que la taille du réseau. Ceci est surtout observable dans le cas du réseau 6×6 (figure 4-9). On peut avoir une bonne idée des effets de taille finie en comparant les courbes à $U=0$ pour les tailles infinie et 8×8 (figure 4-8) ainsi qu'infinie et 6×6 (figure 4-9). Il y a donc une relation entre la taille du réseau et la température pour laquelle on veut effectuer la simulation. Lorsqu'on abaisse la température, le signe du déterminant des simulations MC diminue. De plus, il faut élargir le réseau pour garder la longueur d'onde de L. de Broglie à l'intérieur de celui-ci, ce qui diminue encore le signe et augmente d'autant le temps de calcul; le problème n'est pas facile à résoudre.

Les oscillations de la susceptibilité, dans la région de la figure 4-7 où $\langle n \rangle < 0.75$, sont essentiellement dues à des effets de taille finie. Sur les figures 4-8 et 4-9, on observe une subite chute de la susceptibilité, pour les calculs avec $U=0$, lorsqu'on passe sous $\langle n \rangle = 0.2$. Ceci s'explique en observant de plus près le calcul de la susceptibilité. On peut exprimer la susceptibilité magnétique $\chi = S(\mathbf{q}=0)/T$ à l'aide de

$$S(\mathbf{q}=0) = - \int \rho(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon , \quad (4.3)$$

où $\rho(\varepsilon)$ est la densité d'états et f la fonction de Fermi. Les diverses composantes de l'intégrale de l'équation (4.3) sont illustrées aux figures 4-10 à 4-12. La figure 4-10 montre la fonction de Fermi à une température non nulle, alors que la figure 4-11 montre sa dérivée. La figure 4-12 montre la densité d'états $N(\varepsilon)$ du modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins, qui est calculée à l'aide de

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2(t^2 - t'\varepsilon)^{1/2}} K \left[\left(\frac{16t^2 - (\varepsilon + 4t')^2}{16(t^2 - t\varepsilon)} \right)^{1/2} \right], \quad (4.4)$$

où $K[\dots]$ est l'intégrale elliptique de première espèce et ε est l'énergie (Bénard *et al.* 1993; Bénard thèse 1993). La bande de conduction s'étend de $\varepsilon_1 = -4t - 4t'$ à $\varepsilon_2 = 4t - 4t'$. Au fur et à mesure qu'on abaisse le remplissage, le potentiel chimique μ diminue et l'intégrand de l'équation (4.3) varie lentement tant que la courbe de la dérivée de la fonction de Fermi reste incluse à l'intérieur de l'intervalle de la bande. Il existe cependant un faible remplissage en deçà duquel la valeur du potentiel chimique passe *sous* la valeur ε_1 . L'intégrand subit alors une brusque chute, ce qui produit l'épaule observée pour $S(\mathbf{q}=0)$ autour de $\langle n \rangle = 0.2$.

La figure 4-13 montre le facteur de structure magnétique, au vecteur d'onde antiferromagnétique (π, π) , obtenu à l'aide de calculs MC avec sauts vers les premiers et seconds voisins ainsi qu'avec l'approche ACDP sur réseau infini. On constate que la longueur de corrélation antiferromagnétique provenant des interactions provoque de faibles effets de taille finie à la température étudiée ici. Les courbes MC 6×6 et MC 8×8 de la figure 4-13, pour $U=4$ et $\langle n \rangle = 1$, montrent une convergence vers le calcul ACDP sur réseau infini lorsqu'on augmente la taille du réseau pour les calculs MC. La longueur de corrélation antiferromagnétique avoisine la taille du réseau, car si elle était beaucoup plus grande, il y aurait croissance de la valeur du facteur de structure proportionnellement à la taille du réseau. Une étude du comportement (non illustrée) en fonction de la taille pour les calculs MC et

ACDP à $U=0$ nous indique que des calculs MC sur réseau 10×10 suffiraient pour éliminer à toutes fins utiles les effets de taille finie. La puissance de calcul dont nous disposons actuellement rend cependant de tels calculs difficiles à réaliser.

La différence entre les calculs MC et ACDP est plus prononcée pour les résultats à $\mathbf{q}=(0,0)$ de la figure 4-8 que pour les résultats à $\mathbf{q}=(\pi,\pi)$ de la figure 4-13. Ceci s'explique par le fait que, pour le calcul ACDP, c'est l'intégrale sur les vecteurs d'onde qui est déterminée de façon auto-cohérente, et non pas le facteur de structure pour chaque vecteur d'onde. De plus, la différence d'échelle de l'axe y des figures 4-8 et 4-13 nous donne des barres d'erreur relatives plus grandes pour le cas $\mathbf{q}=(0,0)$. Le calcul ACDP indique que l'origine physique du maximum de la susceptibilité dans le cas $t'=-0.35$ est un effet de la structure de bande, la singularité de Van Hove, qui est déjà présent dans le cas $U=0$ et qui est amplifié par l'ajout de l'interaction U . Les figures 4-14 à 4-18 montrent que les calculs ACDP et MC concordent très bien ensemble pour toutes les valeurs de \mathbf{q} . L'accord entre les calculs MC et ACDP étaient cependant encore meilleur dans le cas $t'=0$ (Vilk *et al.* 1994).

Pour le cas $t'=0$ de la figure 4-7, le mécanisme à l'origine du maximum de la susceptibilité n'est pas bien défini. L'approche ACDP ne possède pas de maximum, ce qui suggère fortement que ce maximum soit dû à un effet de self-énergie (apparence d'un pseudo-gap). En effet, la self-énergie devient importante dans le cas d'un couplage fort ou lorsqu'il y a de fortes fluctuations antiferromagnétiques. Or, cette self-énergie n'est pas incluse dans le modèle ACDP utilisé ici. Une autre origine du maximum pourrait être un effet de taille finie, bien que les calculs MC semblent converger vers une valeur constante lorsqu'on augmente la taille du réseau. Les calculs ACDP et MC à $\mathbf{q}=(\pi,\pi)$ ont montré que la longueur de corrélation antiferromagnétique a ici dépassée la taille du système, mais demeure finie. Le système de taille finie a donc atteint son état antiferromagnétique alors qu'un système de taille

infinie n'aurait pas atteint cet état pour les paramètres utilisés ici. La quantité $S(0,0)$ est moins sensible aux effets de taille que la quantité $S(\pi,\pi)$, ce qui donne fortement à penser que le maximum calculé pour la susceptibilité est vraiment une caractéristique physique, et non un effet de taille. Les calculs de White (1992) sur l'apparition des pseudo-gaps suggèrent que, pour des tailles de 4×4 à 10×10 , il existe un pseudo-gap dans le poids spectral dont l'existence a été confirmée récemment par Vilk et Tremblay. Ce pseudo-gap se reflète dans la densité d'états et peut donc influencer la susceptibilité magnétique.

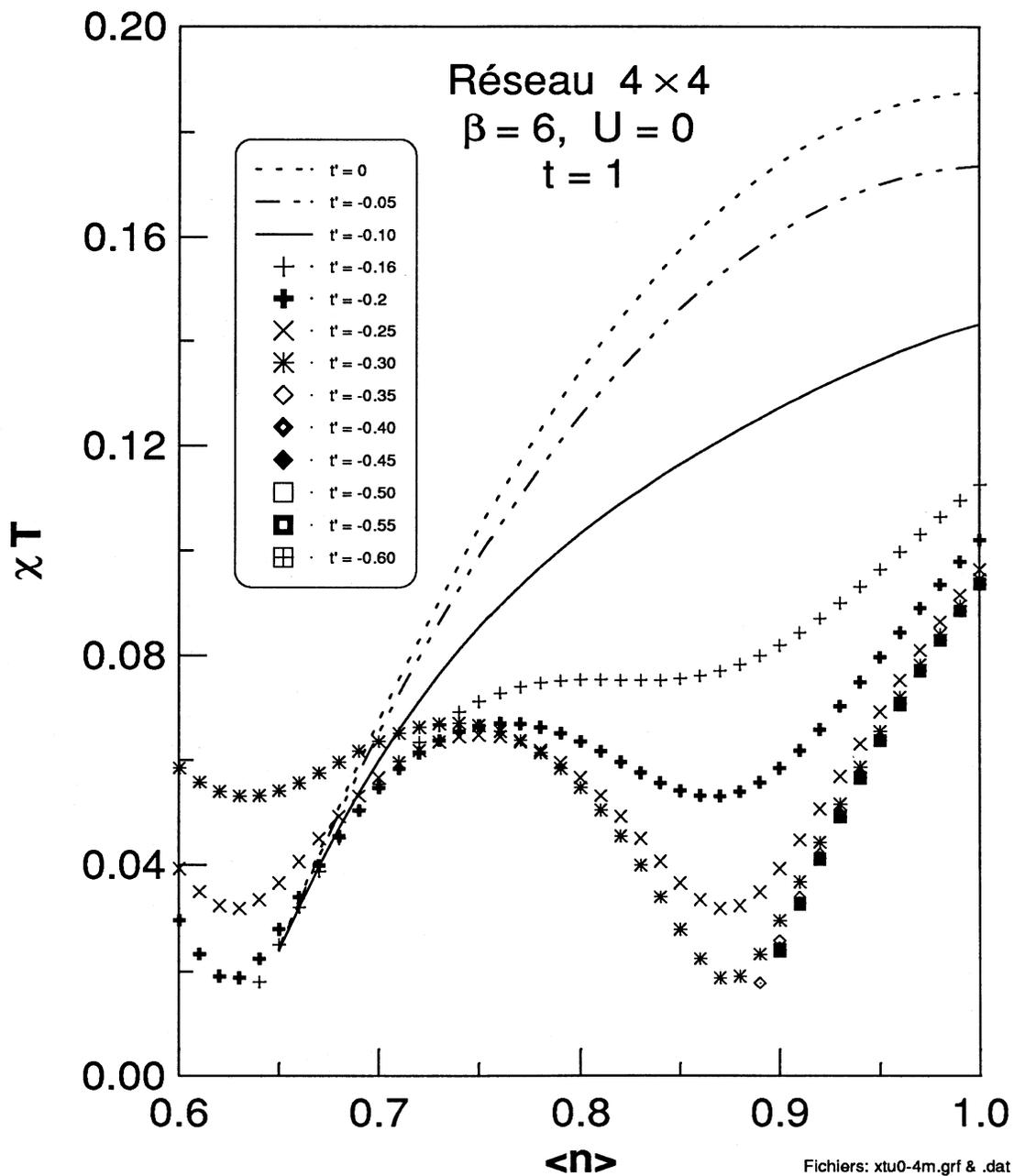


Fig. 4-2: Susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard sans interaction, en fonction du remplissage de la bande pour un réseau 4×4 à la température $\beta=6$ et différentes valeurs de t' . Le dopage en trous ($1-\langle n \rangle$) se lit de droite à gauche. La pente positive, près du demi-remplissage ($\langle n \rangle=1$), ne présente pas d'accord qualitatif avec les expériences qui montrent plutôt une pente négative.

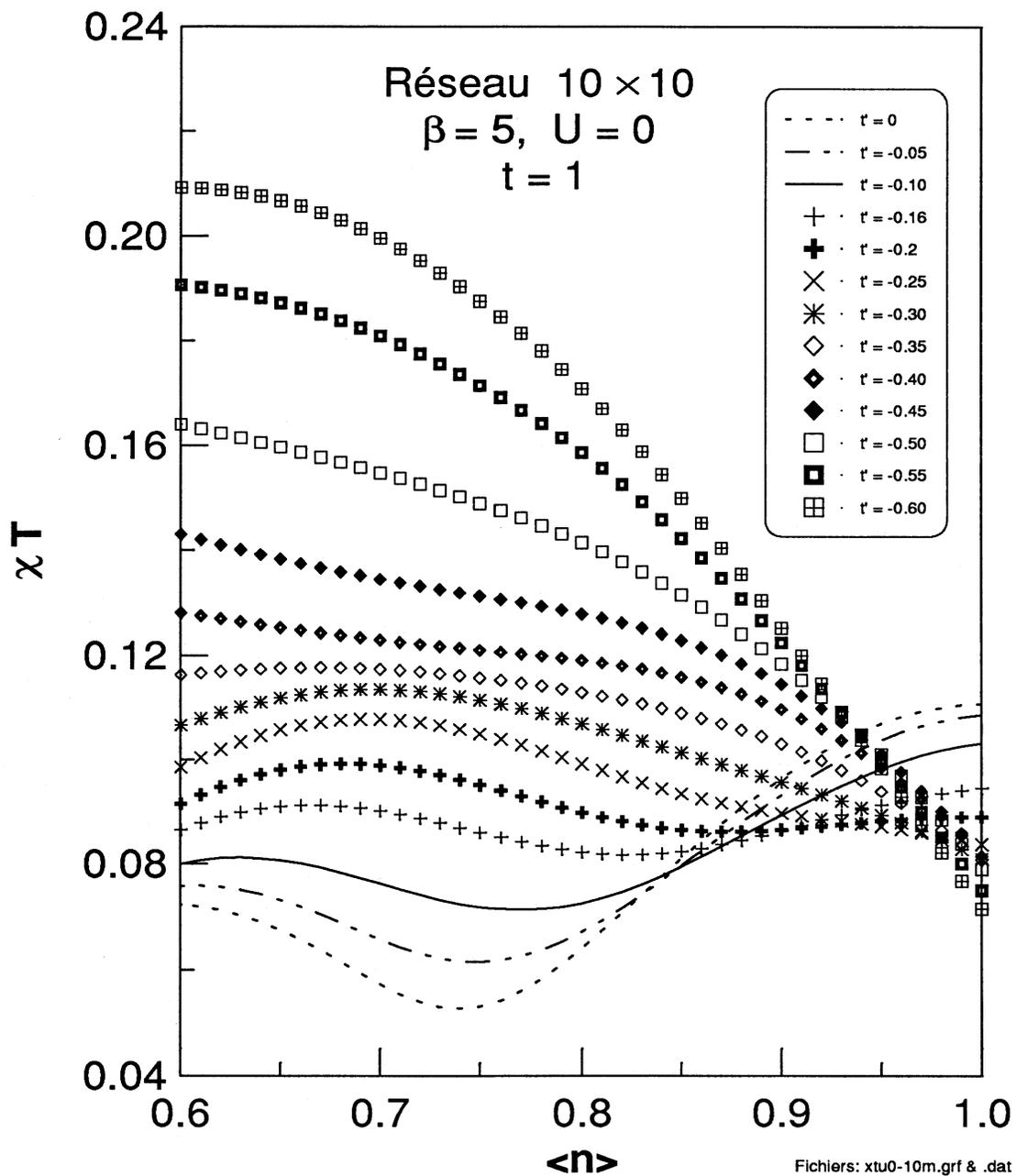


Fig. 4-3: Susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard sans interaction, en fonction du remplissage de la bande pour un réseau 10×10 à la température $\beta=5$ et différentes valeurs de t' . Le dopage en trous ($1-\langle n \rangle$) se lit de droite à gauche. La pente, près du demi-remplissage ($\langle n \rangle=1$) et la forme générale de la courbe présentent un accord qualitatif avec les expériences pour $t'=-0.35$.

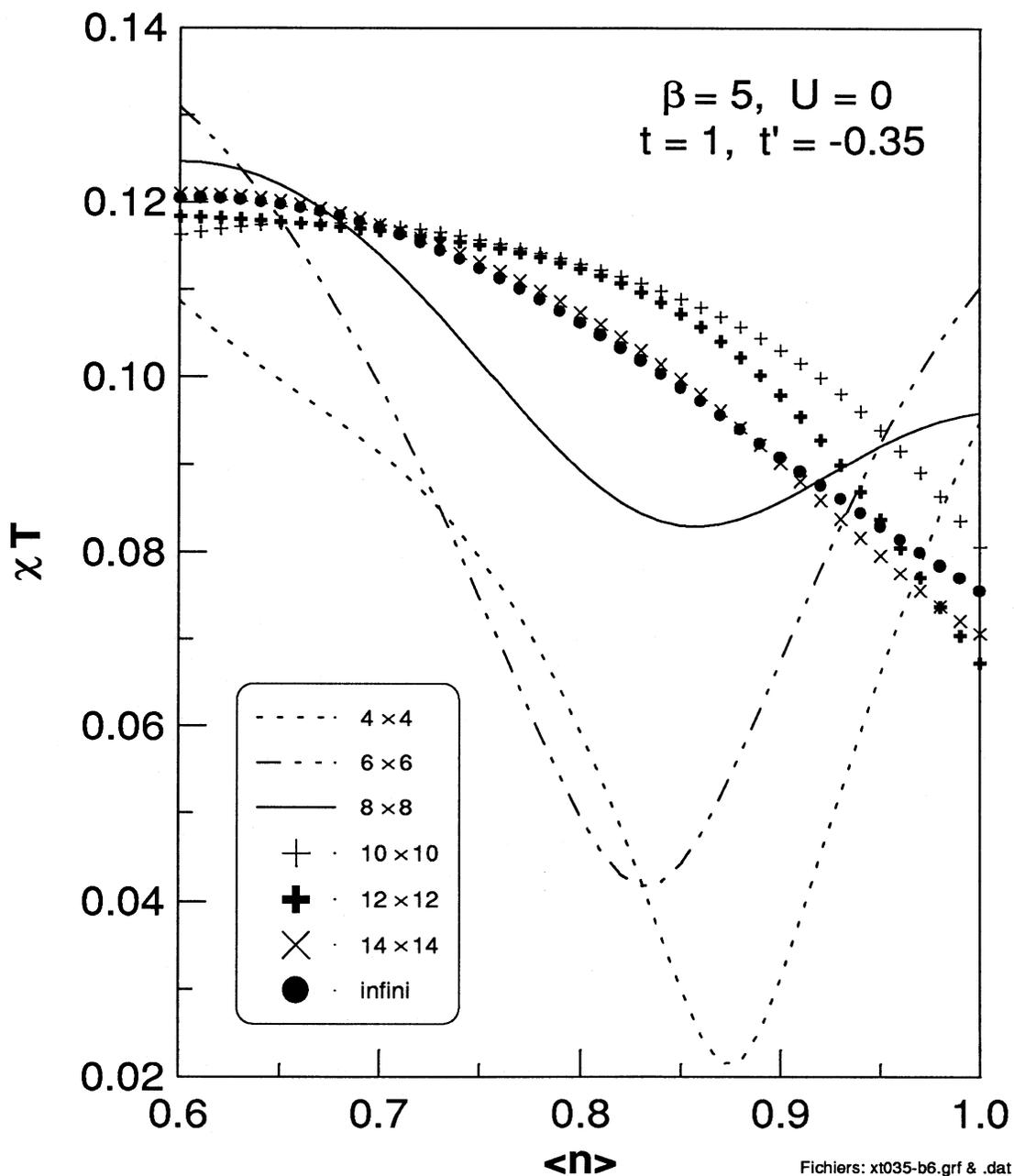
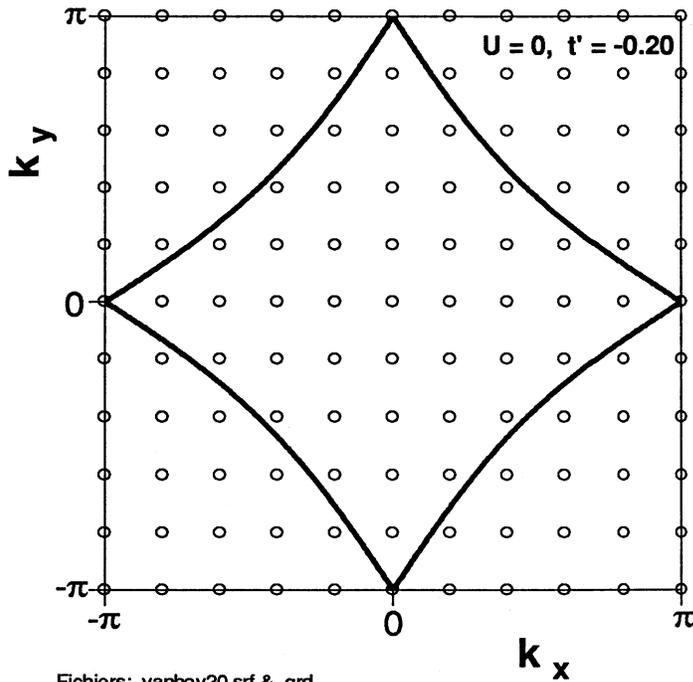
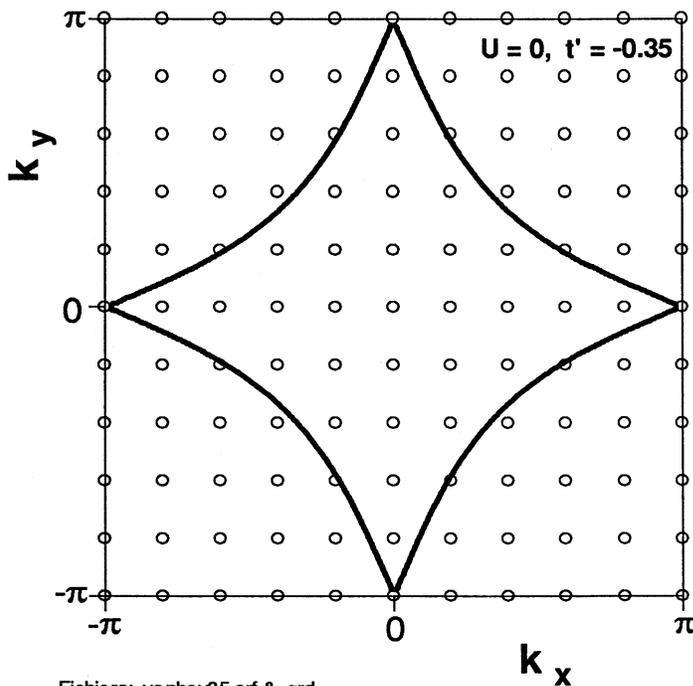


Fig. 4-4: Susceptibilité magnétique uniforme, pour le modèle de Hubbard sans interaction, en fonction du remplissage pour différentes tailles de réseau. Le dopage en trous ($1 - \langle n \rangle$) se lit de droite à gauche. La pente, près du demi-remplissage ($\langle n \rangle = 1$) et la forme générale de la courbe présentent un bon accord qualitatif avec les expériences pour les tailles 10×10 et plus.



Fichiers: vanhov20.srf & .grd

Fig. 4-5: Surface de Fermi pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$ et $t'=-0.20$. Le trait gras marque la courbe isopotentielle correspondant à la singularité de Van Hove. Les points représentent les vecteurs d'onde permis par un réseau 10×10 . Seuls les vecteurs $(0, \pm\pi)$ et $(\pm\pi, 0)$ sont situés sur l'isopotentielle de la singularité de Van Hove.



Fichiers: vanhov35.srf & .grd

Fig. 4-6: Surface de Fermi pour le modèle de Hubbard à $U=0$, $t=1$ et $t'=-0.35$. Le trait gras marque la courbe isopotentielle correspondant à la singularité de Van Hove. Les points représentent les vecteurs d'onde permis par un réseau 10×10 . On voit que plusieurs vecteurs d'onde sont situés sur l'isopotentielle de la singularité de Van Hove.

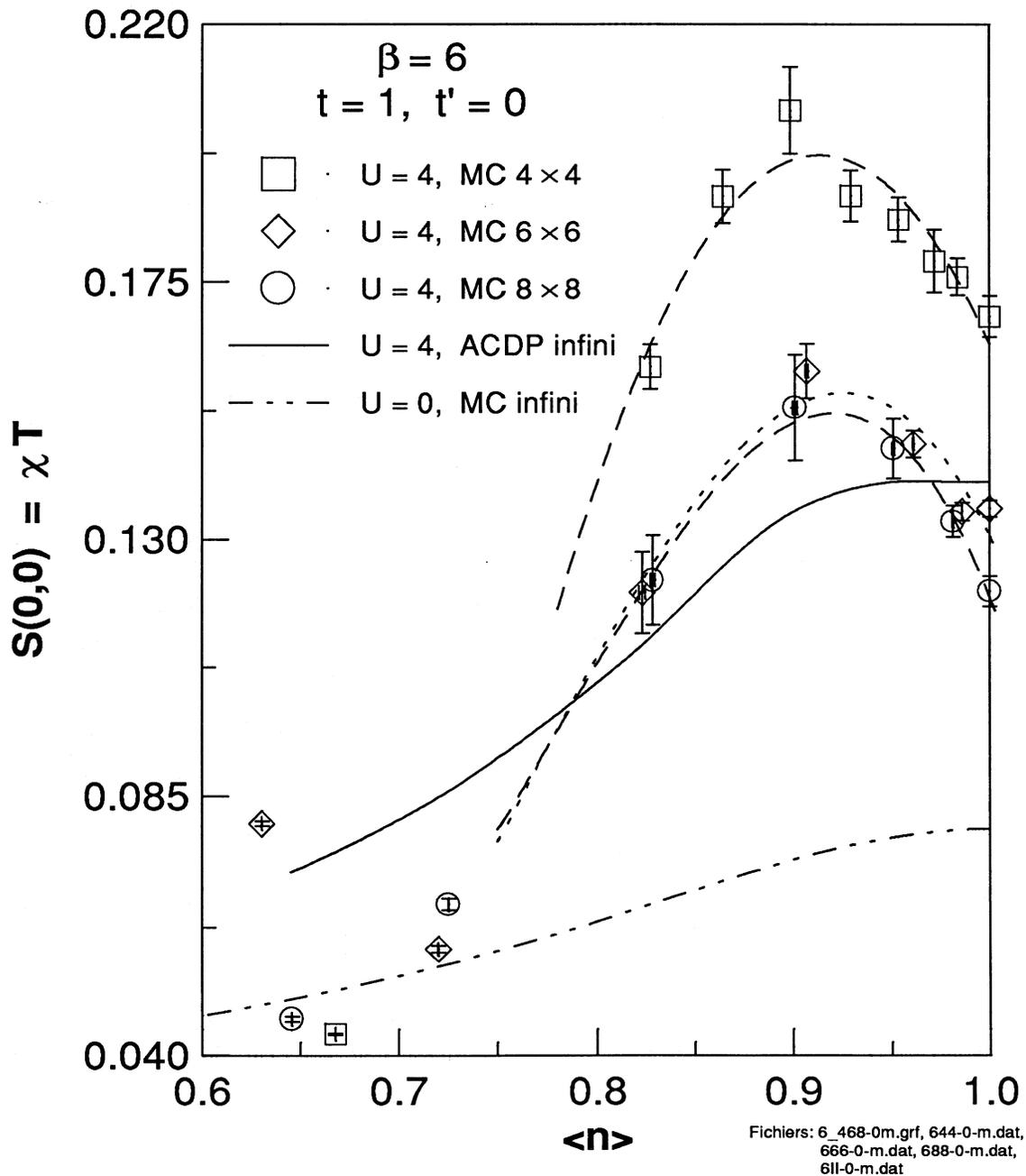


Fig. 4-7: Maximum de la susceptibilité magnétique uniforme en fonction du remplissage pour différentes tailles de réseaux ainsi que pour l'approche ACDP sur réseau infini. Les simulations MC incluent les sauts vers les premiers voisins uniquement. Les résultats MC 4×4 ont été calculés par L. Chen, alors que la courbe ACDP sur réseau infini a été calculée par Y.M. Vilk. La courbe MC infini a été calculée sur réseau 200×200.

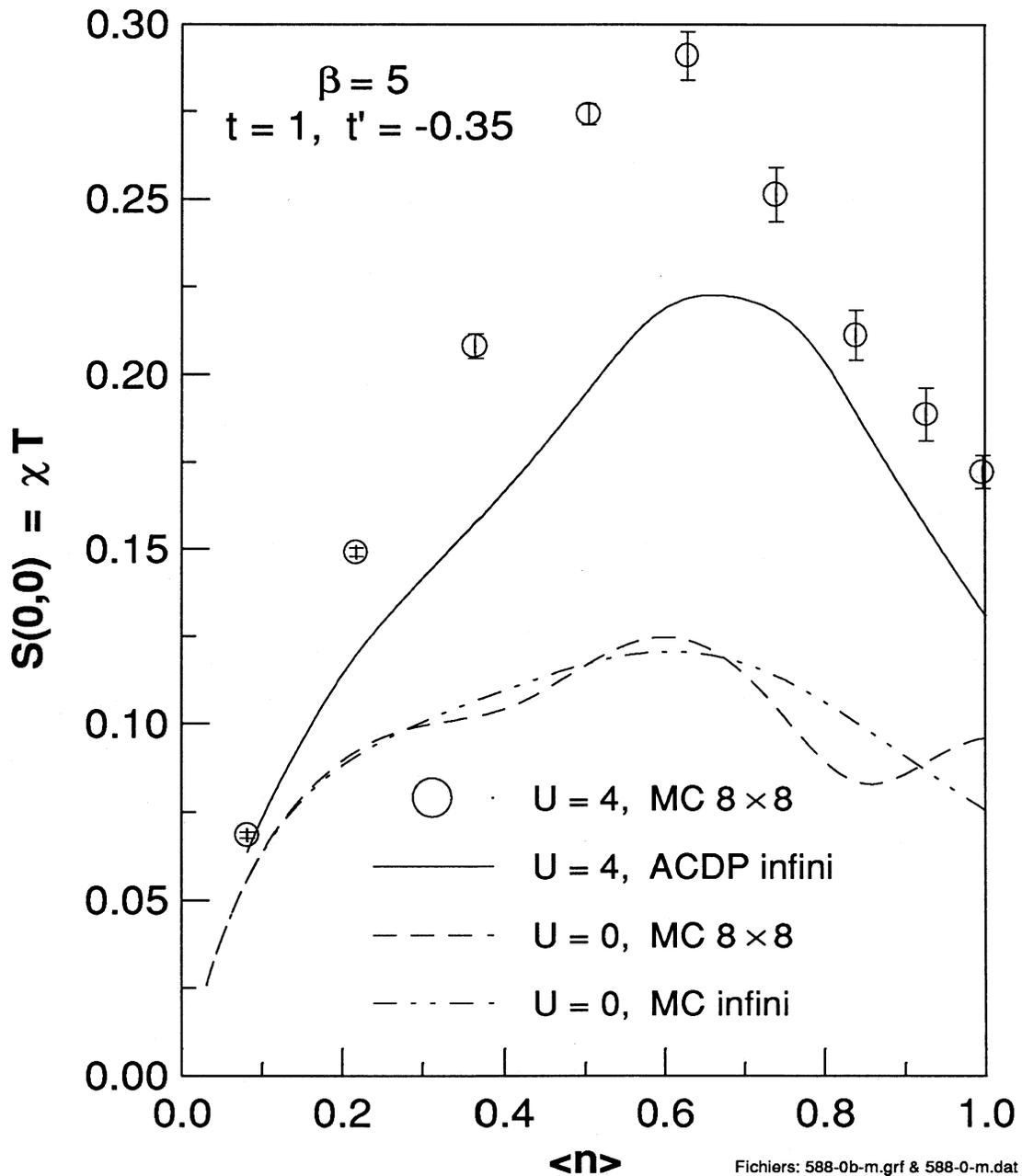


Fig. 4-8: Maximum de la susceptibilité magnétique uniforme en fonction du remplissage pour un calcul MC sur réseau 8×8 ainsi que pour l'approche ACDP sur réseau infini. Les simulations MC incluent les sauts vers les premiers et seconds voisins. La courbe ACDP sur réseau infini a été calculée par Y.M. Vilk. Les courbes pour $U=0$ permettent d'estimer les effets de taille finie. La pente de la susceptibilité, pour $0.65 < \langle n \rangle \leq 1.0$, est en accord qualitatif avec les observations expérimentales.

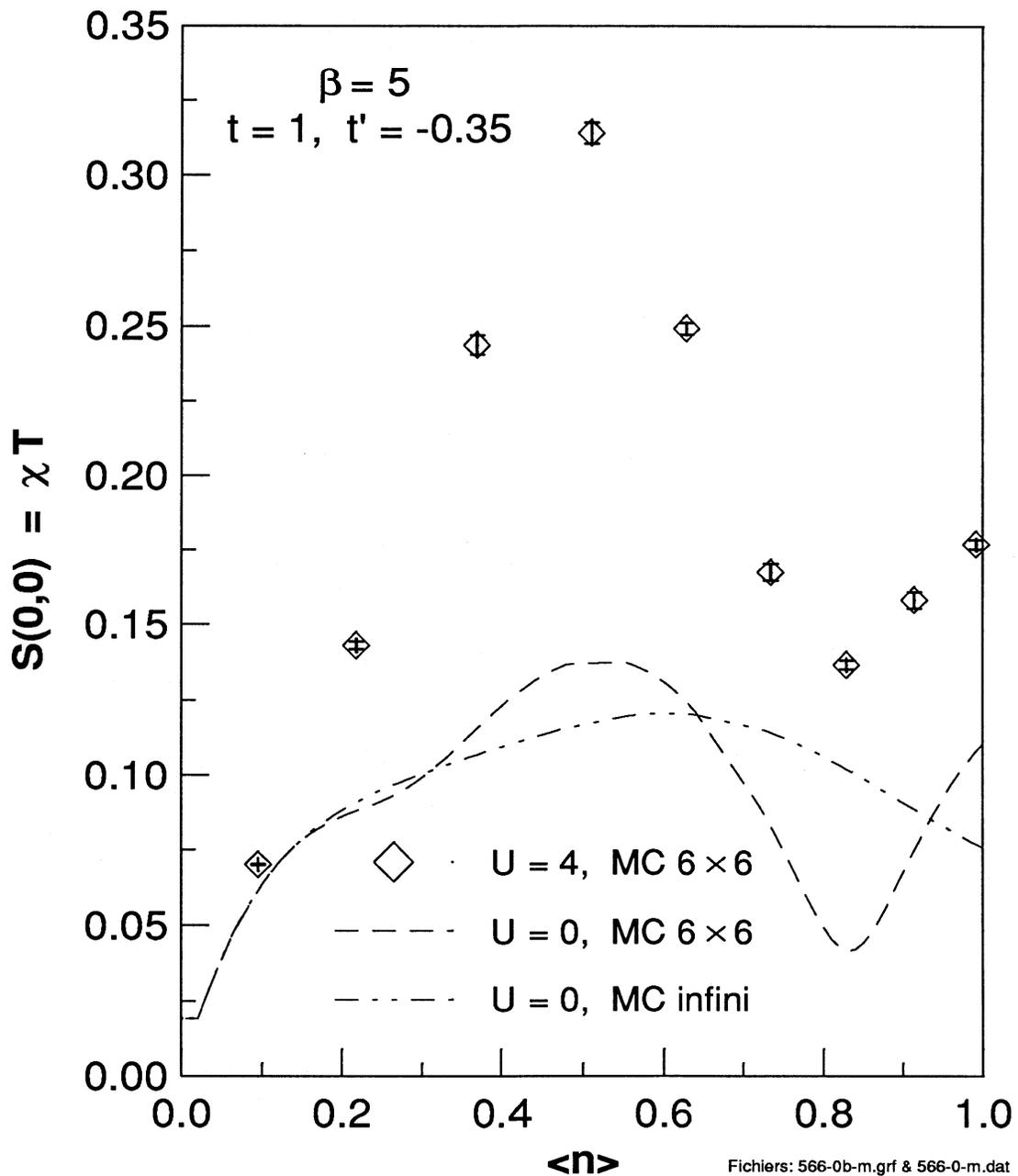
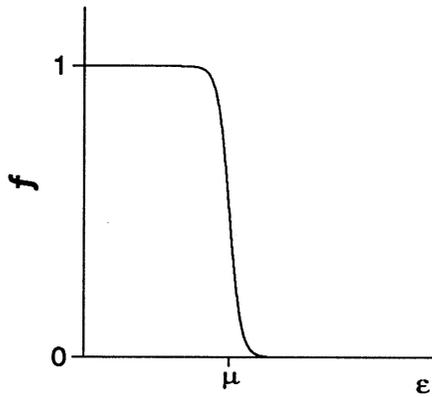
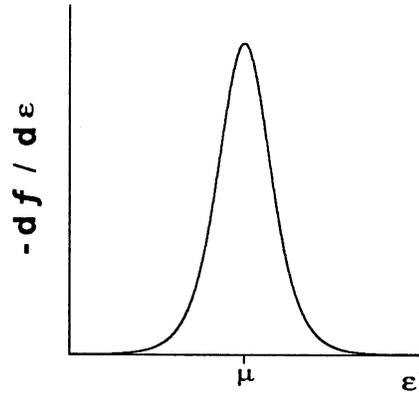


Fig. 4-9: Maximum de la susceptibilité magnétique uniforme en fonction du remplissage pour un calcul MC sur réseau 6×6 . Les simulations MC incluent les sauts vers les premiers et seconds voisins. Les courbes pour $U=0$ permettent d'estimer les effets de taille finie. La pente de la susceptibilité, pour $0.85 < \langle n \rangle \leq 1.0$, est de signe opposé aux observations expérimentales.



Fichier: s0kink-m.grf

Fig. 4-10: Fonction de Fermi à température non nulle.



Fichier: s0kink-m.grf

Fig. 4-11: Dérivée de la fonction de Fermi de la figure 4-10.

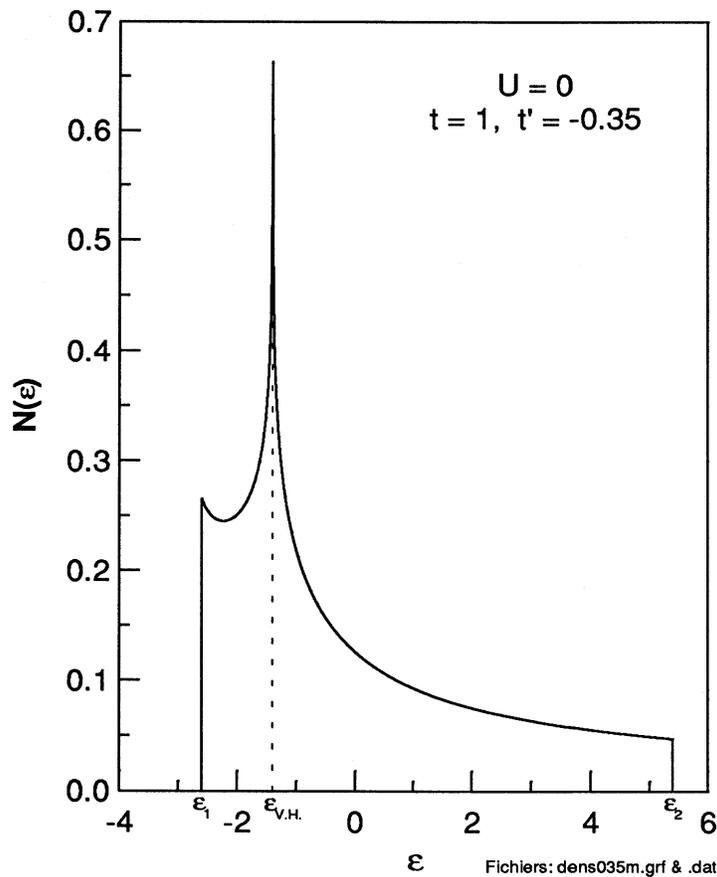


Fig. 4-12: Densité d'états du modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins. La bande de conduction s'étend de $\varepsilon_1 = -4t - 4t'$ à $\varepsilon_2 = 4t - 4t'$. On voit clairement la divergence de la singularité de Van Hove située à $\varepsilon_{V.H.} = 4t'$.

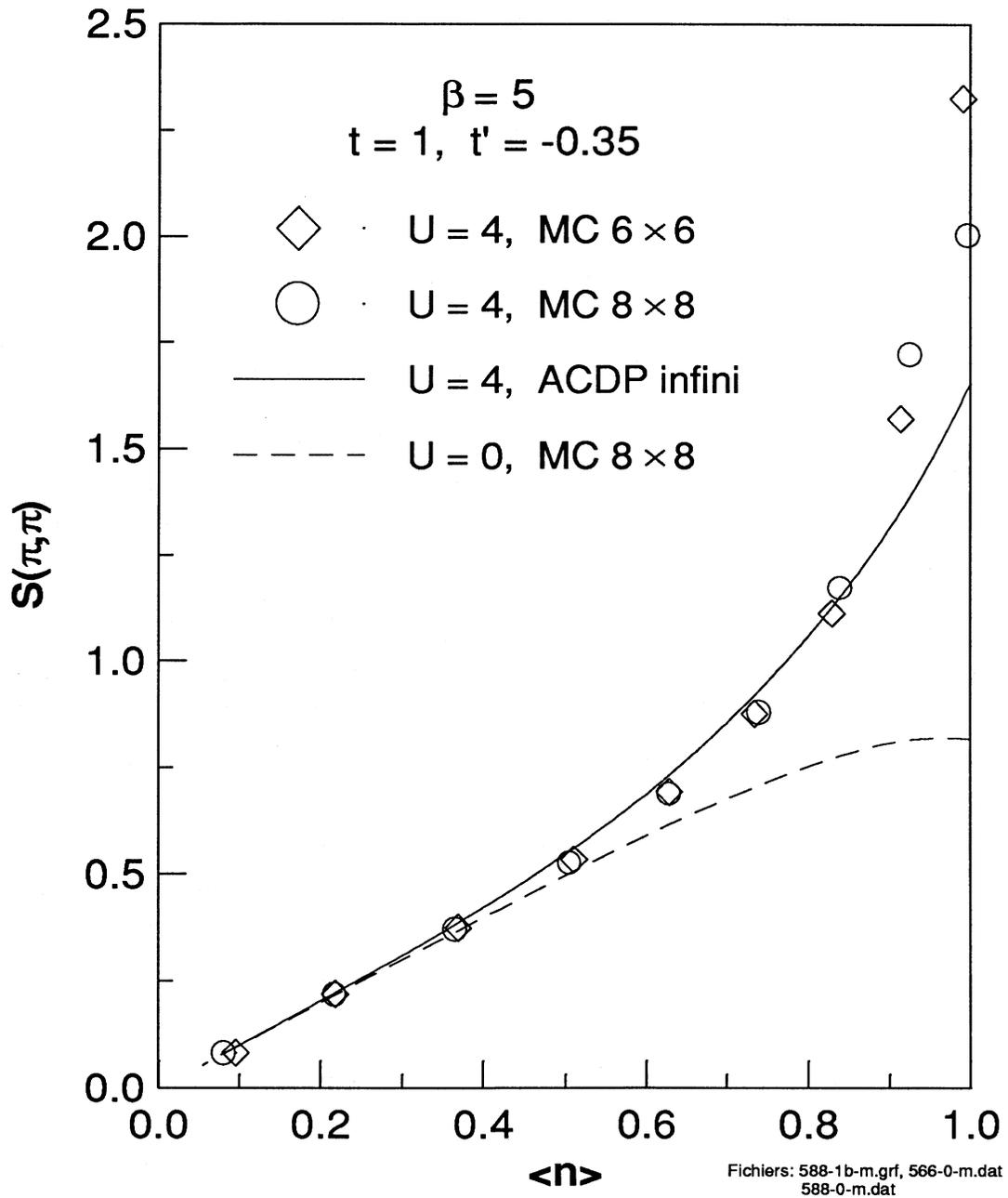


Fig. 4-13: Facteur de structure magnétique, pour le vecteur d'onde antiferromagnétique (π, π) , obtenu à l'aide de calculs MC avec sauts vers les premiers et seconds voisins. La courbe ACDP sur réseau infini a été calculée par Y.M. Vilk. La longueur de corrélation antiferromagnétique des calculs MC demeure finie.

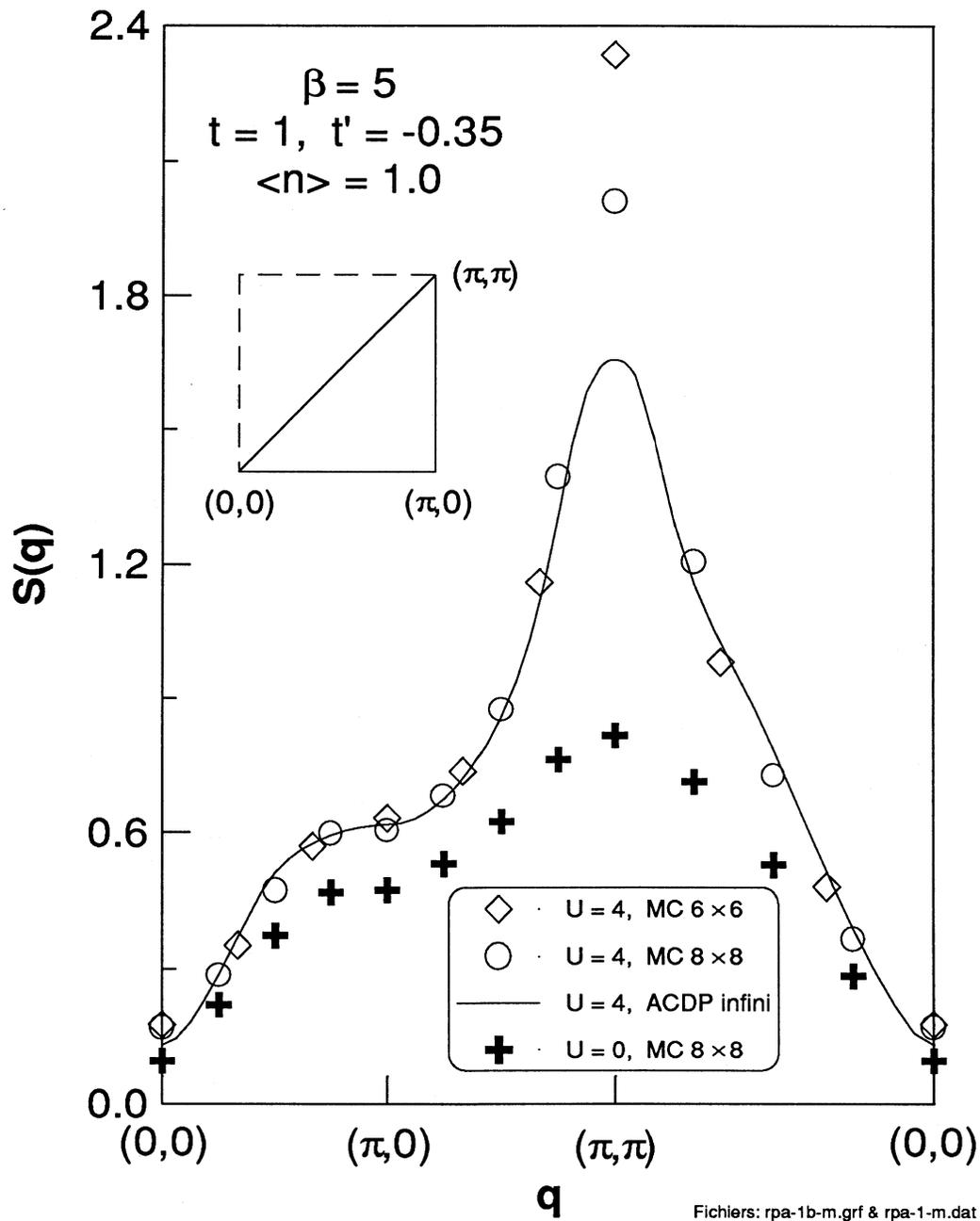


Fig. 4-14: Facteur de structure magnétique calculé le long de la première zone de Brillouin (voir schéma en encart) pour la bande demi-remplie. L'accord du calcul MC avec le calcul ACDP (par Y.M. Vilks) est excellent pour $U=4$, sauf au vecteur d'onde antiferromagnétique (π,π) où le MC présente un effet de taille. Il y a convergence du calcul MC vers le calcul ACDP sur réseau infini lorsqu'on agrandit le réseau du calcul MC. Le résultat du calcul MC pour $U=0$ est indiqué par des croix.

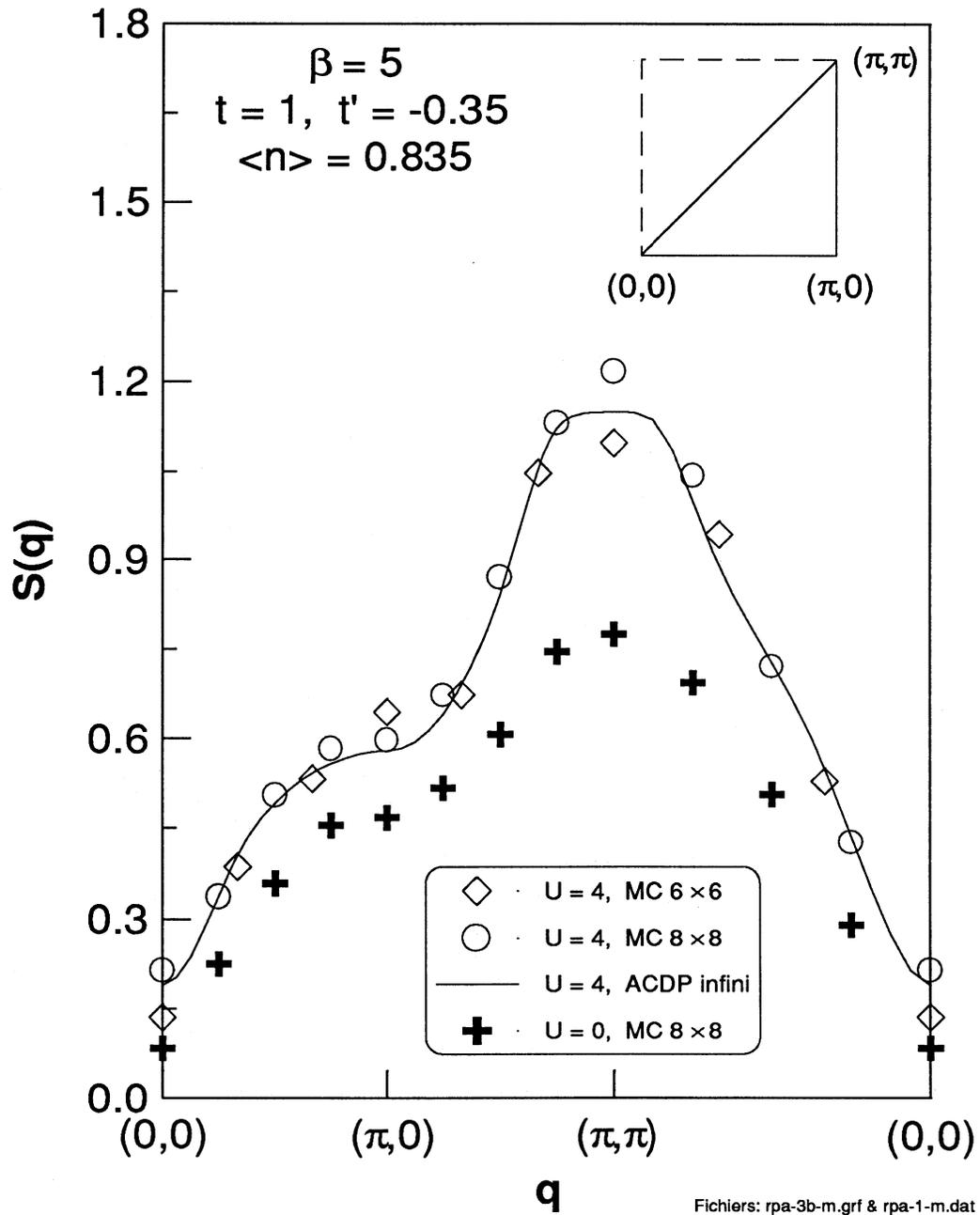


Fig. 4-15: Facteur de structure magnétique calculé le long de la première zone de Brillouin (voir schéma en encart) pour une concentration moyenne de 0.835 électrons par site. La courbe ACDP sur réseau infini a été calculée par Y.M. Vilk. Pour $U=4$, l'accord du calcul MC avec le calcul ACDP est très bon. Les vecteurs d'onde $(0,0)$ et (π,π) présentent un effet de taille.

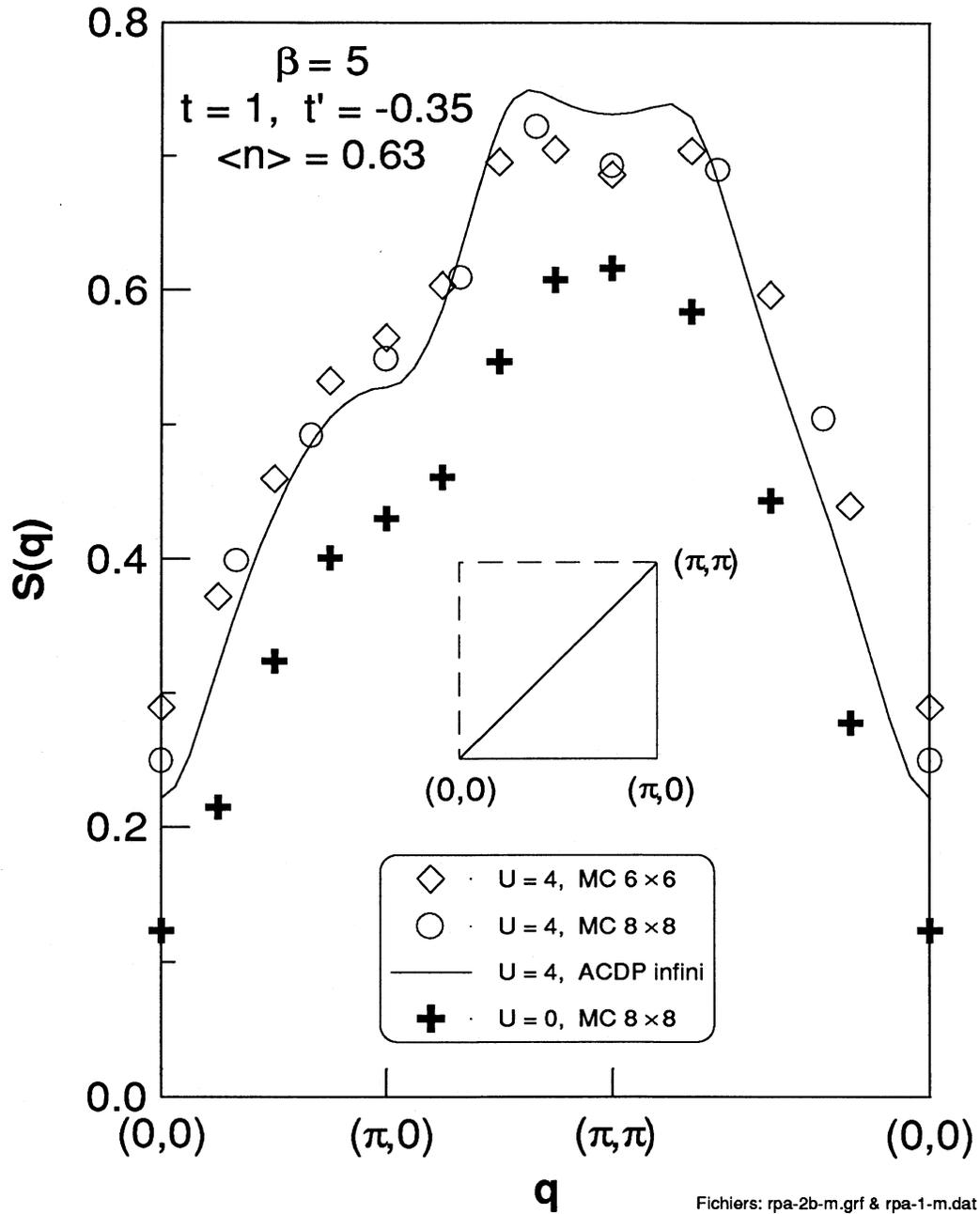


Fig. 4-16: Facteur de structure magnétique calculé le long de la première zone de Brillouin (voir schéma en encart) pour une concentration moyenne de 0.63 électrons par site. La courbe ACDP sur réseau infini a été calculée par Y.M. Vilk.

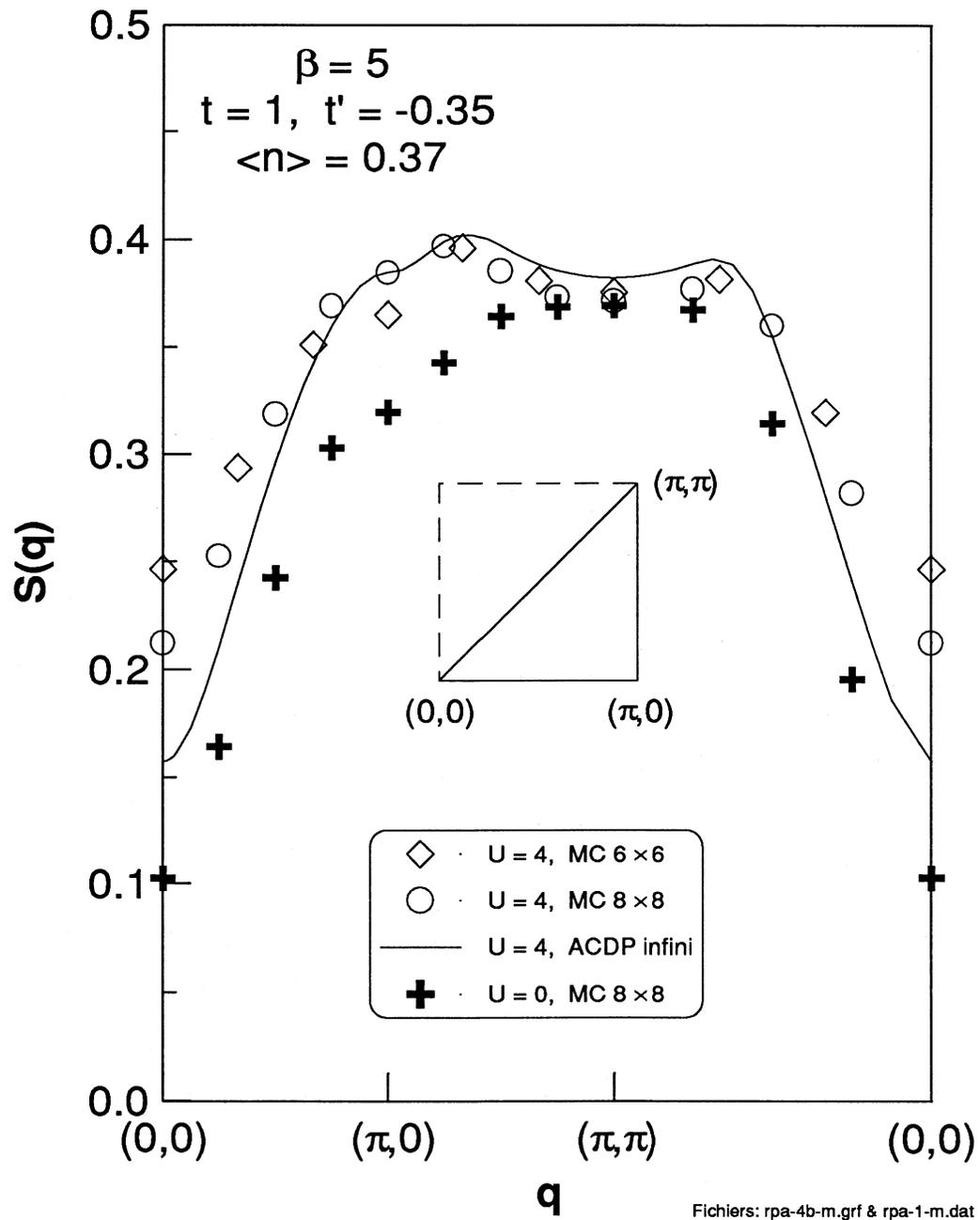


Fig. 4-17: Facteur de structure magnétique calculé le long de la première zone de Brillouin (voir schéma en encart) pour une concentration moyenne de 0.37 électrons par site. La courbe ACDP sur réseau infini a été calculée par Y.M. Vilc.

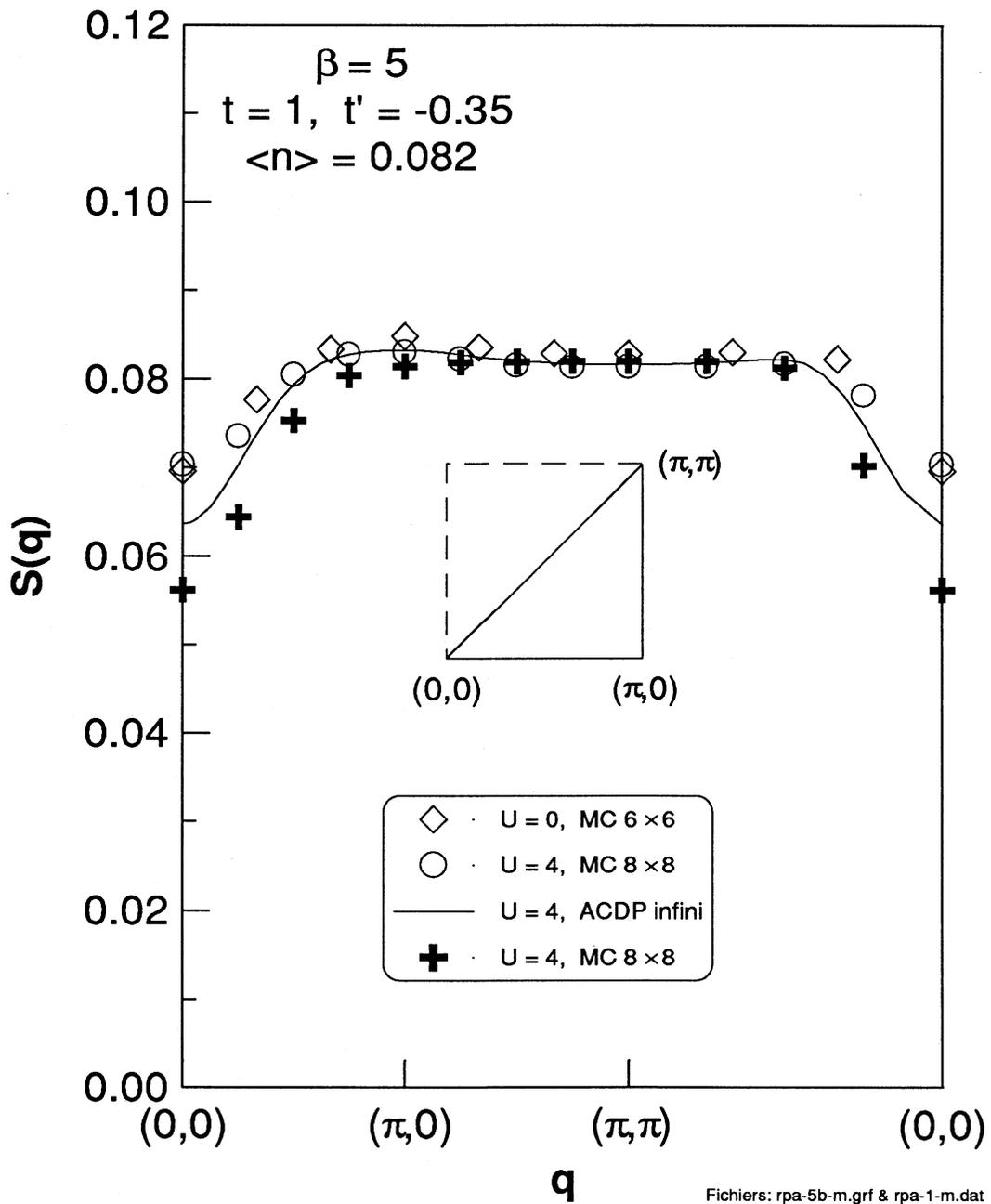


Fig. 4-18: Facteur de structure magnétique calculé le long de la première zone de Brillouin (voir schéma en encart) pour une concentration moyenne de 0.082 électrons par site. La courbe ACDP sur réseau infini a été calculée par Y.M. Vilks. Pour $U=4$, l'accord du calcul MC avec le calcul ACDP demeure bon, car l'échelle du graphique est ici très petite.

4.4.3 Partie réelle de la susceptibilité magnétique

Afin d'illustrer l'importance des effets de taille qui apparaissent lorsque la longueur d'onde de L. de Broglie dépasse la taille du système, nous considérons brièvement dans cette section la partie réelle de la susceptibilité dans le cas sans interaction. Les figures 4-19 à 4-22 montrent la partie réelle de la susceptibilité magnétique le long de la première zone de Brillouin pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins. La valeur $\langle n \rangle = 0.6$, choisie pour le remplissage, se situe près du maximum de la susceptibilité magnétique uniforme des figures 4-8 et 4-9. On remarque, sur les figures 4-19 et 4-21, que le maximum de la partie réelle de la susceptibilité ne se produit pas au vecteur d'onde antiferromagnétique (π, π) .

Les courbes de la figure 4-19 ont été obtenues à l'aide d'un calcul numérique direct de la fonction de Lindhard pour un réseau 400×400 à la température $\beta = 5$. Un tel réseau représente à toutes fins utiles une taille infinie. La figure 4-20 montre les mêmes courbes que la précédente, mais pour un réseau de taille 8×8 . À cette température, la longueur d'onde de L. de Broglie est de l'ordre de grandeur de la taille du réseau 8×8 qui reproduit assez bien les tendances de la partie réelle de la susceptibilité magnétique du réseau infini.

Les courbes de la figure 4-21 ont été calculées pour un réseau 400×400 à la température $\beta = 100$. La figure 4-22 montre les mêmes courbes pour un réseau de taille 8×8 . À cette température, la longueur d'onde de L. de Broglie est beaucoup plus grande que la taille du réseau 8×8 et on voit que la taille 8×8 ne suffit pas pour reproduire la tendance de la partie réelle de la susceptibilité magnétique du réseau infini.

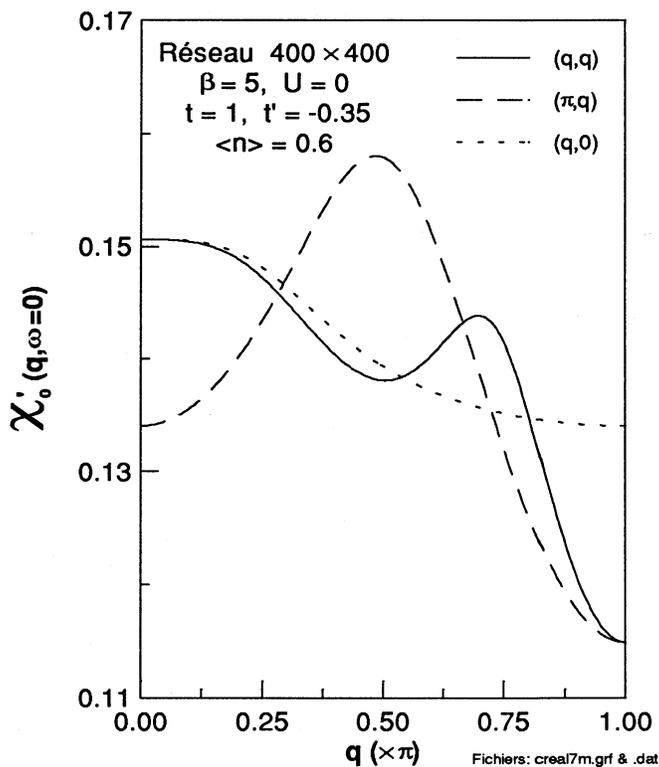


Fig. 4-19: Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins à la température $\beta=5$ et $U=0$. Le réseau de taille 400×400 représente à toutes fins utiles un réseau infini.

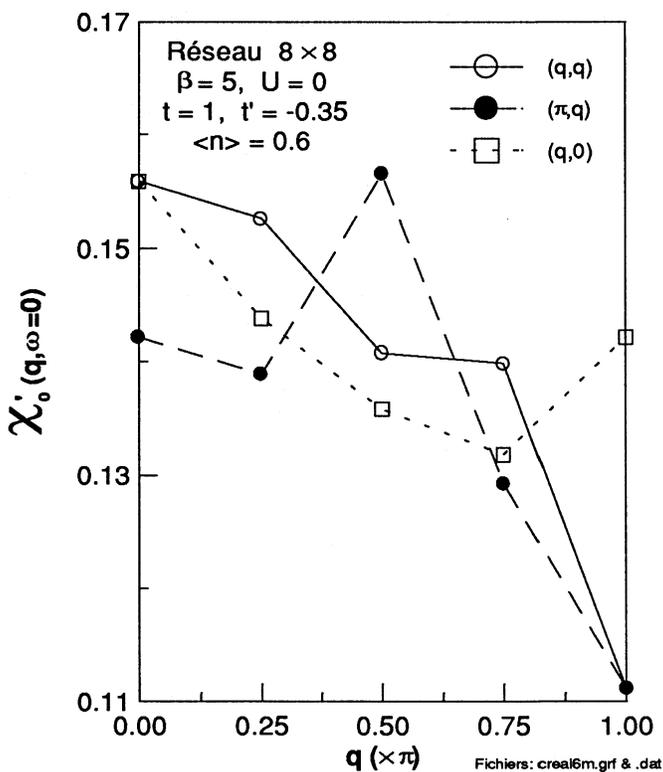


Fig. 4-20: Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins à la température $\beta=5$ et $U=0$. Le réseau est de taille 8×8 . Il n'est possible de calculer la susceptibilité que pour un ensemble discret de points qu'on relie avec des traits.

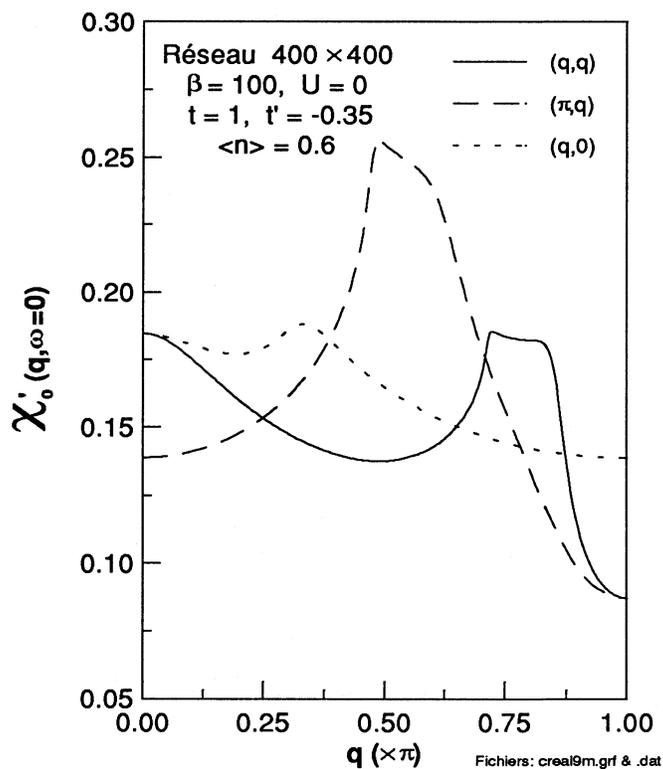


Fig. 4-21: Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins à la température $\beta=100$ et $U=0$. Le réseau de taille 400×400 représente à toutes fins utiles un réseau infini.

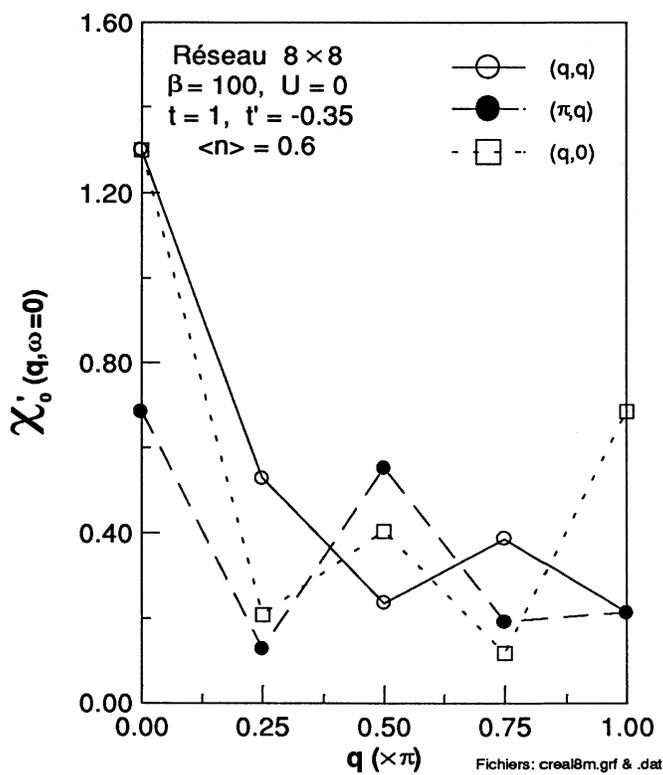


Fig. 4-22: Partie réelle de la susceptibilité magnétique pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins à la température $\beta=100$ et $U=0$. Le réseau est de taille 8×8 . Il n'est possible de calculer la susceptibilité que pour un ensemble discret de points qu'on relie avec des traits.

4.5 Corrélations supraconductrices et approximation de la matrice T

Pour le modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers voisins seulement, Daré *et al.* (1994) ont démontré que les corrélations supraconductrices peuvent être reproduites par des calculs utilisant la matrice T , et ceci avec une précision de 10% pour des remplissages inférieurs au quart ($\langle n \rangle = \frac{1}{2}$). Cependant, près du demi-remplissage ($\langle n \rangle = 1$), on observe une déviation des résultats de la matrice T par rapport aux calculs MC. Pour le cas de la symétrie d , ceci pourrait signifier que la singularité de Van Hove ou que l'antiferromagnétisme augmente les corrélations supraconductrices.

Les résultats des calculs MC pour les corrélations supraconductrices du modèle de Hubbard, avec sauts vers les premiers et seconds voisins, sont tracés aux figures 4-23 à 4-26. Les figures 4-23 et 4-24 montrent les calculs sur réseau 8×8 , alors que les figures 4-25 et 4-26 montrent les calculs sur réseau 6×6 et pour une plus grande gamme de remplissages. Pour chaque point des simulations MC 8×8 , une moyenne du résultat de deux à trois calculs différents a été effectuée à l'aide de la méthode du maximum de vraisemblance (voir annexe A). Chaque calcul MC 8×8 , comprenant de 1×10^3 à 2×10^3 réchauffements et de 30×10^3 à 100×10^3 mesures, a été démarré en initialisant le générateur de nombres aléatoires avec un nombre différent. L'intervalle entre deux tranches de temps imaginaire est de $\frac{1}{16}$. Le temps de calcul moyen pour chaque point du graphique est de 250 heures à 26 MFlops, incluant la période de réchauffement. Comme nous l'avons déjà mentionné dans la section précédente, cette période de réchauffement est absente du calcul de la susceptibilité magnétique qui sera effectué à partir de la configuration des champs de Hubbard-Stratonovitch obtenue ici, d'où une réduction substantielle du temps de calcul pour l'ensemble des deux mesures. Pour la région des calculs MC 6×6 où $\langle n \rangle > 1$, la valeur moyenne du signe

du déterminant est très près de l'unité, ce qui permet d'obtenir des résultats, pour les corrélations supraconductrices, en quelques heures seulement à 26 MFlops.

Les effets de taille, même s'ils demeurent importants, ne sont pas illustrés sur les figures 4-23 à 4-26. Comme dans le cas de la susceptibilité magnétique, il semblerait que des réseaux de 10×10 sites ou plus soient nécessaires pour éliminer les effets de taille, mais le temps de simulation MC nécessaire rend difficile l'utilisation de tels réseaux. Ici, les calculs MC et de matrice T ont été effectués pour des réseaux de même taille.

On constate, pour chacune des figures 4-23 et 4-24, que les calculs de la matrice T concordent avec les simulations MC sur une plage de valeurs de $\langle n \rangle$ la moitié moins étendue que celle pour laquelle il y a concordance dans le cas $t' = 0$ (Daré *et al.* 1994). Cette plage de valeurs se situe près de $\langle n \rangle = 0$. On constate également que les résultats MC sont partout inférieurs ou égaux aux résultats de la matrice T . Ceci semble suggérer, sans le prouver, que le modèle de Hubbard avec $t' \neq 0$ soit moins propice à la supraconductivité que le même modèle avec $t' = 0$. Cette absence de tendance à la supraconductivité a été signalée dans d'autres études (Moreo et Scalapino 1991; Lin *et al.* 1988; dos Santos 1989) à une exception près (dos Santos, 1989). Notons cependant que, tel que nous avons discuté dans la section précédente sur le facteur de structure magnétique, les calculs avec $t' \neq 0$ ont été effectués pour un régime de paramètres où la longueur de corrélation antiferromagnétique avoisine la taille du réseau. Contrairement au cas précédent, la longueur de corrélation est plus grande que la taille du réseau pour les calculs effectués par Daré *et al.* (1994) avec $t' = 0$, là où il y a désaccord entre la matrice T et les simulations MC (en particulier pour la symétrie d). Ceci pourrait donner à penser que l'antiferromagnétisme est important pour augmenter les corrélations supraconductrices. Pour en être certain, il faudrait effectuer des simulations MC avec un U plus élevé ou une température plus basse (β plus élevé) afin de se placer dans un

régime de paramètres qui permettrait à l'antiferromagnétisme de se manifester pleinement dans le cas $t' \neq 0$. Encore une fois, la puissance de calcul disponible rend aujourd'hui ce régime de paramètres difficile à atteindre.

Le calcul des corrélations supraconductrices sur réseau 6×6 (figures 4-25 et 4-26) montre une excellente concordance entre les simulations MC et les calculs de matrice T pour les remplissages $\langle n \rangle > 1.5$. Le désaccord se situe principalement autour de la singularité de Van Hove qui se produit avant le demi-remplissage dans le cas du modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins. Ceci suggère que la divergence de la densité d'états empêche le bon fonctionnement de l'approximation de la matrice T .

Les figures 4-24 et 4-26 montrent les corrélations supraconductrices pour la symétrie d à $U=4$, $\beta=5$ et $t' \neq 0$. On sait que, dans ce régime de paramètres, la température n'est pas encore assez basse pour que se manifeste l'antiferromagnétisme. On observe, sur ces figures, que la matrice T surestime la valeur des corrélations à la singularité de Van Hove. Par contre, dans le cas $U=4$, $\beta=6$ et $t'=0$ pour la même symétrie (Daré *et al.* 1994), la température est suffisamment basse pour que l'antiferromagnétisme apparaisse. On observe alors que la matrice T sous-estime les corrélations au demi-remplissage, là où singularité de Van Hove et antiferromagnétisme coïncident. Ces deux observations suggèrent que l'antiferromagnétisme amplifie les corrélations supraconductrices de symétrie d .

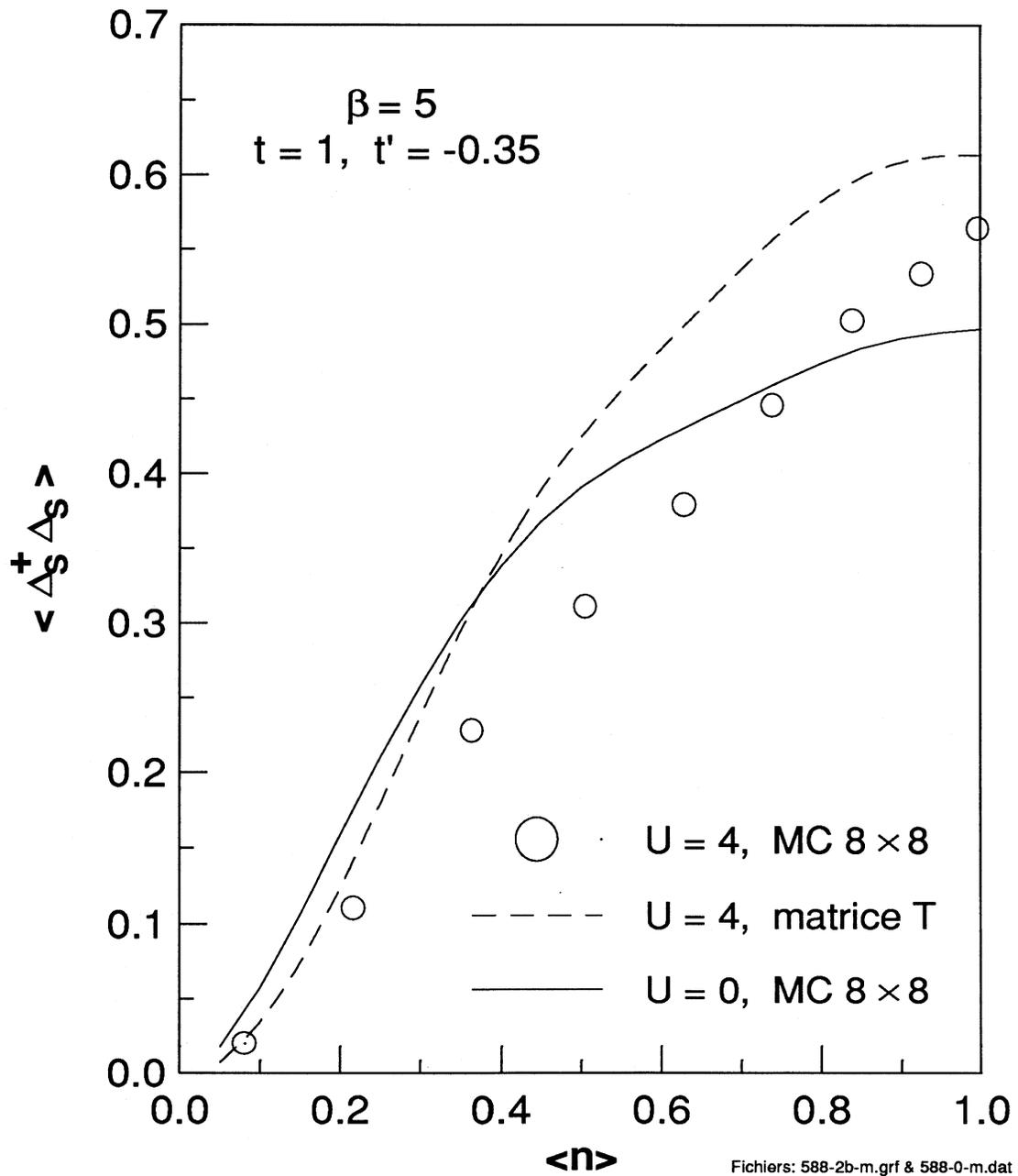


Fig. 4-23: Corrélations supraconductrices, pour la symétrie S étendue, du modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins pour un réseau 8×8 . Les courbes de la matrice T ont été calculées par A.-M. Daré pour un réseau 8×8 . Les calculs MC et de la matrice T donnent la même courbe pour $U=0$.

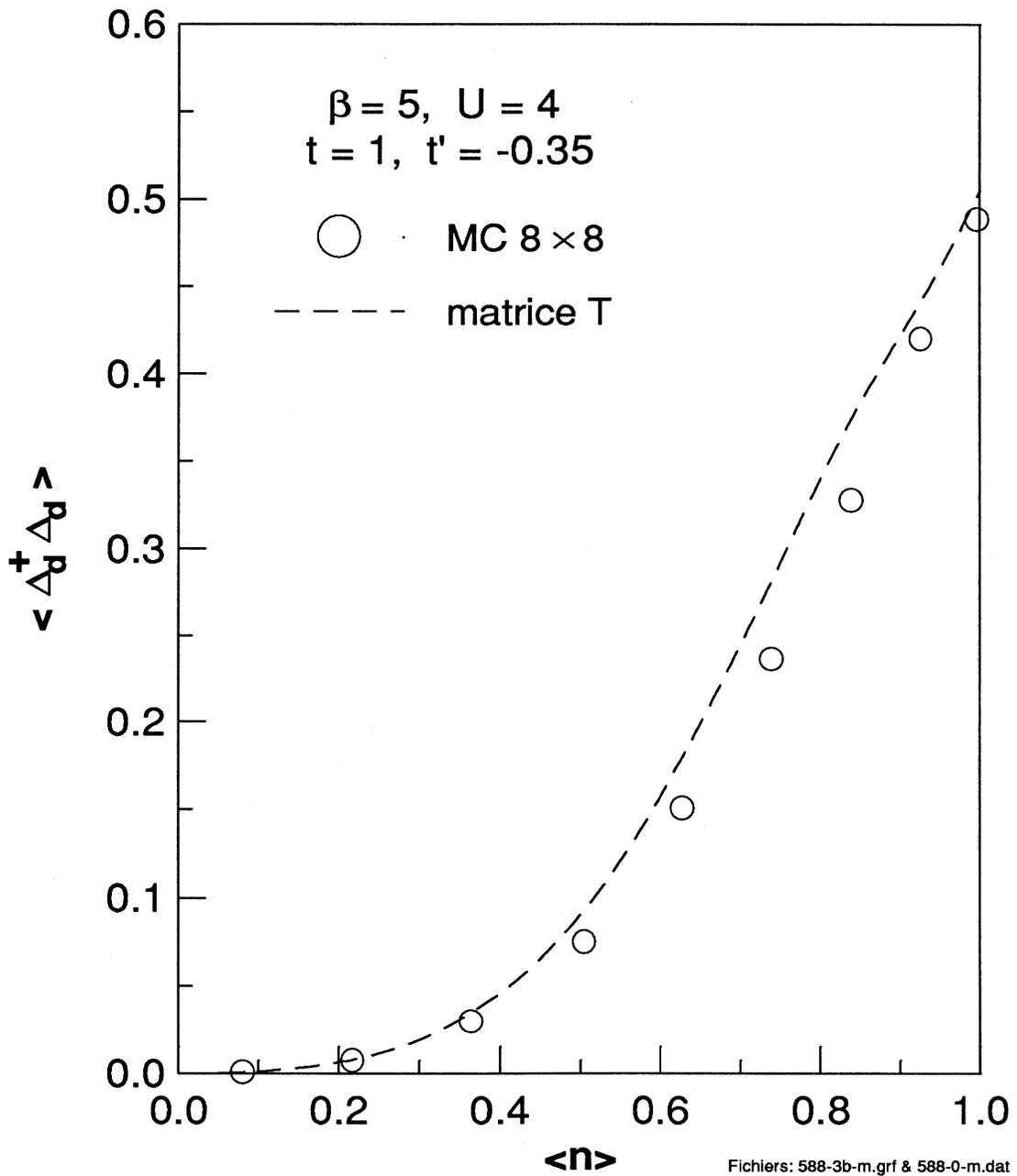


Fig. 4-24: Corrélations supraconductrices, pour la symétrie d , du modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins pour un réseau 8×8 . La courbe de la matrice T a été calculée par A.-M. Daré pour un réseau 8×8 .

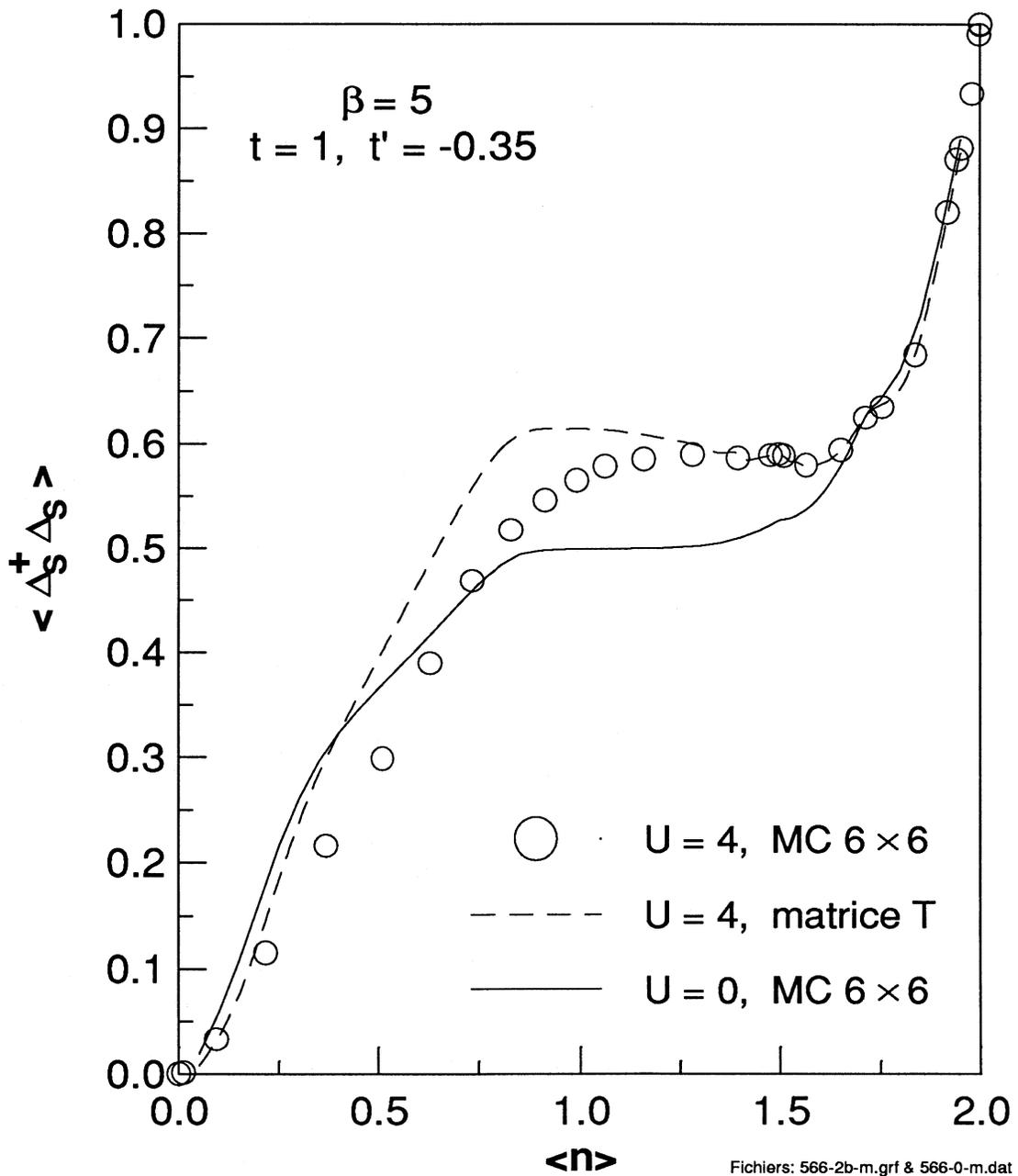


Fig. 4-25: Corrélations supraconductrices, pour la symétrie S étendue, du modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins pour un réseau 6×6 . Les courbes de la matrice T ont été calculées par A.-M. Daré pour un réseau 6×6 . Les calculs MC et de la matrice T donnent la même courbe pour $U=0$.

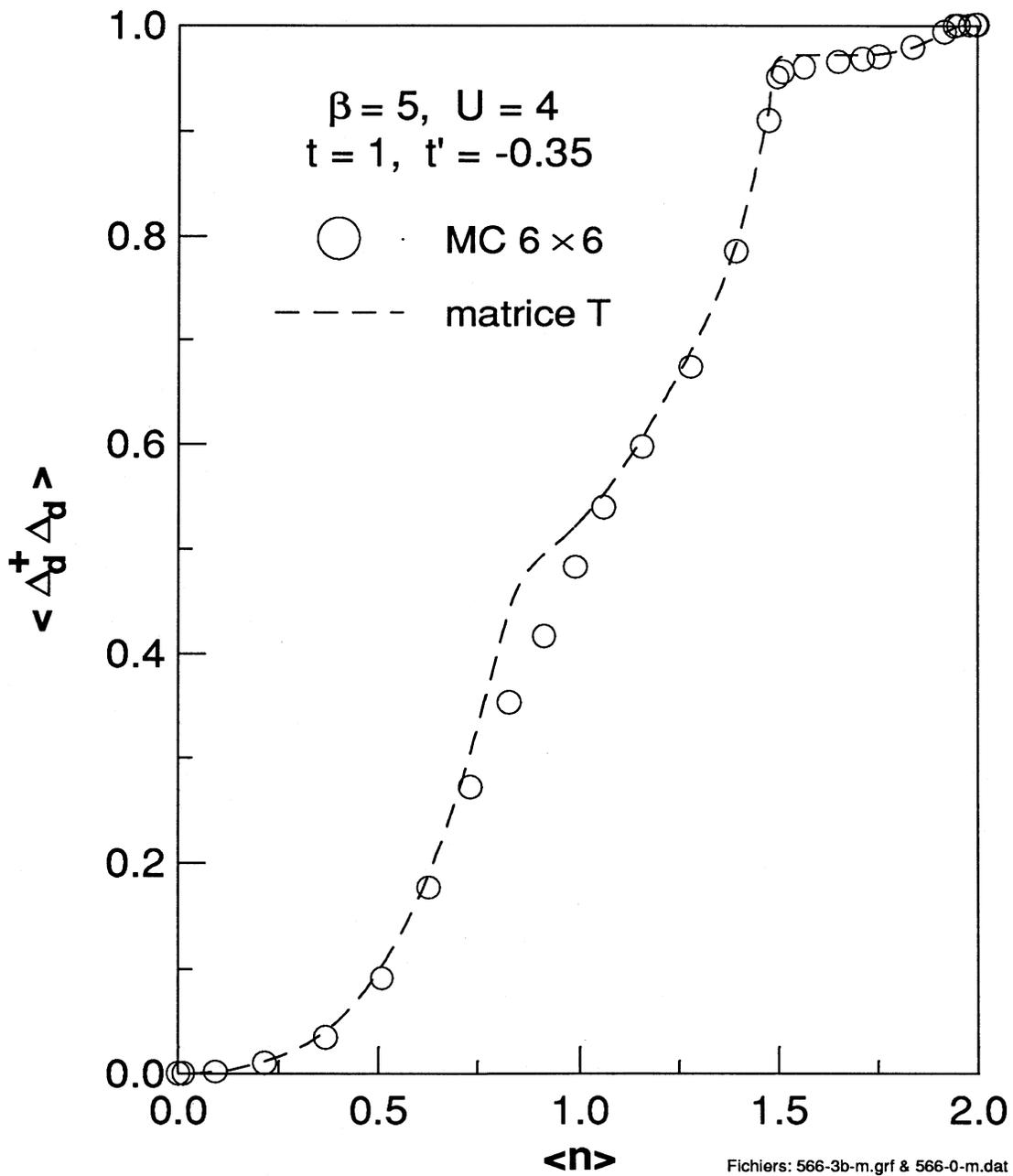


Fig. 4-26: Corrélations supraconductrices, pour la symétrie d , du modèle de Hubbard avec sauts vers les premiers et seconds voisins pour un réseau 6×6 . La courbe de la matrice T a été calculée par A.-M. Daré pour un réseau 6×6 .

4.6 Quelques détails techniques sur les simulations et les ordinateurs utilisés

La sauvegarde de toutes les configurations de l'algorithme Metropolis nécessite un espace disque énorme. C'est pourquoi le programme que nous utilisons accumule plutôt les statistiques sur les observables physiques tout au long de la simulation. Ainsi, seuls quelques méga-octets de mémoire vive et d'espace disque sont nécessaires pour effectuer une simulation. Le programme est cependant très exigeant au niveau de la vitesse de calcul qui est la principale qualité recherchée chez les ordinateurs utilisés. En effet, des simulations MC quantique de plusieurs jours, voire même de plusieurs semaines, sont monnaie courante sur des stations de travail.

Sur une station de travail IBM RISC 6000 modèle 375 (125 MFlops de pointe, 26 MFlops de rendement moyen), 60-70% du temps de calcul est utilisé dans la sous-routine de multiplication de matrices éparées. Sur le superordinateur Fujitsu VPX240/10 (2.5 GFlops de pointe), 35% du temps de calcul est utilisé dans cette même sous-routine. Près de 75% du temps de calcul total est utilisé par l'unité vectorielle du Fujitsu, donnant ainsi une accélération d'environ 3.5 par rapport à un calcul n'utilisant pas les capacités vectorielles du superordinateur. En passant de la station de travail IBM au Fujitsu, l'accélération globale est d'environ un facteur 3 lorsqu'on ne fait que recompiler le code sur le Fujitsu. Ce faible gain de vitesse indique clairement qu'il faut retravailler le code pour mieux profiter du processeur vectoriel du Fujitsu.

Comme pour toutes les simulations MC (classiques ou quantiques), le code utilisé est trivialement parallélisable, bien que cela n'ait pas été fait dans le présent travail. Il suffit de démarrer plusieurs simulations en initialisant le générateur de nombres aléatoires avec un nombre différent pour chaque unité centrale de traitement. C'est la seule communication

requis entre les unités centrales de traitement, au début du calcul. La seule autre communication requise, qui a lieu à la fin du calcul, consiste à rassembler les divers résultats pour en faire une moyenne selon la méthode du maximum de vraisemblance. L'application de cette méthode est cependant limitée pour les raisons énoncées ci-dessous.

Lors d'une simulation, il est raisonnable de balayer autant de tranches de temps en réchauffant le système qu'en mesurant les observables par la suite. On obtient ainsi un équilibre entre le temps de calcul investi en réchauffement et celui utilisé pour la convergence de la valeur moyenne des observables. On sait par ailleurs que de petites valeurs du signe du déterminant imposent le calcul d'un grand nombre d'échantillons pour obtenir une convergence statistique satisfaisante des observables. Ainsi, il existe un temps de simulation minimum pour un régime de paramètres donné d'un système. C'est lorsque ce minimum devient trop élevé pour l'obtention d'une réponse dans un délai raisonnable que la méthode de parallélisation triviale énoncée plus haut s'avère inefficace. Il vaut mieux alors séparer une seule simulation en plusieurs composantes qu'on distribuera aux ordinateurs séquentiels qui sont les nœuds d'un ordinateur parallèle. Notons qu'une telle partition entraîne un échange de données entre les unités centrales de traitement et qu'un débit élevé de communication peut rapidement devenir une limitation à la vitesse globale.

CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons étudié le modèle de Hubbard à l'aide de simulations Monte Carlo quantiques sur réseau bidimensionnel. L'hamiltonien contient deux termes cinétiques de paramètres t et t' , pour les sauts vers les premiers et seconds voisins respectivement, ainsi qu'un terme de paramètre U pour le potentiel de Coulomb écranté. Nous avons ici concentré notre étude sur le cas du couplage intermédiaire, soit $U=4$.

Le calcul de la susceptibilité magnétique uniforme reproduit qualitativement les résultats expérimentaux, mesurés par magnétométrie, pour les cas $t'=0$ et $t'=-0.35$ (avec $t=1$). Nous obtenons donc une augmentation suivie d'une diminution de la susceptibilité lorsque le dopage en trous croît à partir du demi-remplissage. Cependant, l'origine du maximum de la susceptibilité diffère selon que $t'=0$ ou $t'=-0.35$. Pour $t'=0$, le maximum de la susceptibilité magnétique uniforme provient des interactions des électrons sur un même site, car les calculs pour $U=0$ ne montrent pas de maximum. Pour $t'=-0.35$, le maximum de la susceptibilité est un effet de la structure de bande (singularité de Van Hove) amplifié par les interactions puisque le maximum est déjà présent pour $U=0$.

La comparaison des calculs MC et ACDP de la susceptibilité magnétique montre un bon accord pour un ensemble de points stratégiques de la zone de Brillouin, soit le long des directions de haute symétrie. Malgré les effets de taille constatés dans le calcul MC, le facteur de structure converge généralement vers le calcul ACDP sur réseau infini lorsqu'on augmente la taille. Pour une température $\beta=5$, le calcul de la partie réelle de la susceptibilité magnétique sur réseau 8×8 reproduit assez bien les résultats sur réseau infini, mais pour une température inférieure, telle $\beta=100$, il y a augmentation importante des effets de taille finie.

Les comparaisons des calculs MC des corrélations supraconductrices (S étendue et d) avec ceux de l'approximation de la matrice T montrent un bon accord pour des remplissages situés loin de la singularité de Van Hove. Cette singularité coïncide avec le niveau de Fermi au demi-remplissage dans le cas $t'=0$ et à un remplissage inférieur au demi-remplissage dans le cas $t'=-0.35$. Dans ce dernier cas, les calculs des corrélations supraconductrices ont été faits à une température pour laquelle il n'y a pas encore de corrélations antiferromagnétiques. On constate que l'approximation de la matrice T surestime les corrélations supraconductrices à $t'=-0.35$ où l'antiferromagnétisme est absent, alors qu'elle les sous-estime à $t'=0$ où l'antiferromagnétisme est présent. Cette observation donne à penser que l'antiferromagnétisme favorise les corrélations supraconductrices de symétrie d .

Les divers résultats qui précèdent ouvrent la voie à de futures études, mais le signe moyen du déterminant et les effets de taille demeurent à ce jour les principales limitations des simulations Monte Carlo quantiques. Dans le cas de la comparaison entre les calculs MC et ceux de l'approximation de la matrice T , il serait intéressant d'explorer le domaine $U < 0$ pour comparer avec certaines études de Moreo (Moreo 1991). Pour établir l'effet de la grandeur de l'interaction sur la susceptibilité magnétique, il faudrait effectuer des calculs MC pour $U > 4$, dans les cas $t'=0$ et $t'=-0.35$. Pour s'approcher de plus en plus de la transition entre les phases normales et supraconductrices, on doit abaisser la température et donc augmenter β . Ceci impose cependant une augmentation de la taille du réseau pour compenser l'augmentation de la longueur de L. de Broglie avec la diminution de la température. Une importante difficulté numérique est associée aux trois dernières mesures proposées ($U \uparrow$, $\beta \uparrow$ et taille \uparrow), car chacune d'entre elles contribue à la diminution du signe moyen du déterminant, et il s'ensuit une forte augmentation du temps de calcul avant d'obtenir une convergence suffisante des observables calculées.

ANNEXE A: CALCUL DE LA MOYENNE ET DE L'ÉCART-TYPE PONDÉRÉS PAR LA MÉTHODE DU MAXIMUM DE VRAISEMBLANCE

Le texte de la présente annexe est basé sur le chapitre 4 du volume de Bevington et Robinson (1992). Définissons tout d'abord la "distribution parente": il s'agit de la distribution statistique idéale d'une quantité physique mesurable autour de sa valeur moyenne. Cette distribution, intrinsèque au système physique étudié, est inaccessible aux instruments de mesures à cause de leur imprécision. En éliminant toutes les sources d'erreurs systématiques, il serait théoriquement possible d'atteindre cette distribution parente en effectuant un nombre infini de mesures sur le système.

Supposons qu'on tire au hasard un échantillon de N valeurs parmi la population parente qui obéit à une distribution gaussienne de moyenne μ et d'écart-type σ . La probabilité dQ_i de tirer la valeur x_i dans l'intervalle dx est donnée par

$$dQ_i = P_i dx \quad ; \quad P_i = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_i - \mu}{\sigma}\right)^2\right], \quad (\text{A.1})$$

où P_i est la fonction de probabilité de chaque valeur. Pour la moyenne, on a seulement accès à une valeur expérimentale μ' , qui est un estimé de la vraie valeur μ . On se pose la question suivante: quelle relation permettrait de dériver μ' à partir des données expérimentales, de façon à ce que sa valeur approche μ avec le maximum de vraisemblance?

On étudie d'abord le cas où les valeurs mesurées possèdent toutes la même incertitude. Supposons une distribution d'essai avec une moyenne μ' et le même écart-type σ

pour chaque valeur tirée. Pour des épreuves indépendantes, la probabilité $P(\mu')$ qu'un ensemble de N valeurs observées provienne de la distribution parente est alors donnée par

$$P(\mu') = \prod_{i=1}^N P_i(\mu') \quad ; \quad P_i(\mu') = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x_i - \mu'}{\sigma}\right)^2\right], \quad (\text{A.2})$$

$$\Rightarrow P(\mu') = \left(\frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}}\right)^N \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \mu'}{\sigma}\right)^2\right].$$

Étudions maintenant le cas où les valeurs mesurées possèdent des incertitudes différentes. Ainsi, on suppose maintenant une distribution d'essais avec une moyenne μ' unique, mais un écart-type σ_i différent pour chaque valeur tirée. La probabilité que l'ensemble de N valeurs observées provienne de la distribution parente est alors donnée par

$$P(\mu') = \prod_{i=1}^N P_i(\mu') = \prod_{i=1}^N \left(\frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}}\right) \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \mu'}{\sigma_i}\right)^2\right]. \quad (\text{A.3})$$

En appliquant la méthode du maximum de vraisemblance, on maximise l'équation (A.3) par rapport à μ' , ce qui revient à minimiser l'argument de l'exponentielle à l'aide de la dérivée:

$$-\frac{1}{2} \frac{d}{d\mu'} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \mu'}{\sigma_i}\right)^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \mu'}{\sigma_i^2}\right) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i}{\sigma_i^2}\right) - \mu' \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{\sigma_i^2}\right) = 0, \quad (\text{A.4})$$

d'où on obtient la valeur la plus probable pour la moyenne des observations, soit la valeur pondérée suivante⁴:

$$\boxed{\mu' = \frac{\sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i}{\sigma_i^2}\right)}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{\sigma_i^2}\right)}} \quad (\text{A.5})$$

⁴Dans ce travail, chaque observation x_i est issue d'une moyenne Monte Carlo d'une observable donnée. L'écart-type σ_i est en fait l'écart-type de cette moyenne MC.

Le calcul de l'écart-type résultant des N observations est fait à partir de l'approximation des dérivées partielles:

$$\sigma_{\mu'}^2 = \langle (\mu' - \mu)^2 \rangle \cong \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i^2 \left(\frac{\partial \mu'}{\partial x_i} \right)^2 \right], \quad (\text{A.6})$$

où on a négligé les termes croisés contenant des produits de dérivées partielles par rapport à des x_i différents. On peut négliger ces termes pour des observations non corrélées. En injectant l'équation (A.5) dans l'équation (A.6), on obtient l'écart-type pondéré pour l'échantillon des N valeurs considérées:

$$\sigma_{\mu'}^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{\sigma_i^2} \right)} \quad (\text{A.7})$$

Voici quelques cas limite intéressants pour les équations (A.5) et (A.7):

- 1) Si une des mesures de l'ensemble est obtenue avec une précision infinie ($\sigma_j = 0$), la moyenne μ' est égale à cette mesure et l'écart-type $\sigma_{\mu'}$ résultant est nul.
- 2) Si une des mesures de l'ensemble est obtenue avec une précision nulle ($\sigma_j \rightarrow \infty$), cette mesure n'a aucun poids dans le calcul de la moyenne μ' et de l'écart-type $\sigma_{\mu'}$.
- 3) Si tous les écarts-type sont égaux ($\sigma_i = \sigma$), l'équation (A.5) se réduit à la relation bien connue pour la moyenne:

$$\mu' = \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i. \quad (\text{A.8})$$

On peut arriver directement à ce résultat en maximisant l'équation (A.2) à l'aide de la dérivée.

BIBLIOGRAPHIE

- BARMA, M., SHASTRY, B.S. 1978. Phys. Rev. B 18, 3351.
- BÉNARD, P. 1993. Thèse de doctorat présentée au département de physique de l'Université de Sherbrooke.
- BÉNARD, P., CHEN, L., TREMBLAY, A.-M.S. 1993. Phys. Rev. B 47, 15217.
- BEVINGTON, P.R., ROBINSON, D.K. 1992. Data reduction and error analysis for the physical sciences, 2^e édition (McGraw-Hill, Toronto).
- BLANKENBECLER, R., SCALAPINO, D.J., SUGAR, R.L. 1981. Phys. Rev. D 24, 2278.
- BURNS, G. 1992. High-temperature superconductivity: An Introduction (Academic Press, New York).
- CHEN, C.T., SETTE, F., MA, Y., HYBERTSEN, M.S., STECHEL, E.B., FOULKES, W.M.C., SCHLUTER, M., CHEONG, S.-W., COOPER, A.S., RUPP, L.W. Jr., BATLOGG, B., SOO, Y.L., MING, Z.H., KROL, A., KAO, Y.H. 1991. Phys. Rev. Lett. 66, 104.
- CHEN, L., TREMBLAY, A.-M.S. 1994. Phys. Rev. B 49, 4338.
- DARÉ, A.-M., CHEN, L., TREMBLAY, A.-M.S. 1994. Phys. Rev. B 49, 4106.
- DONIACH, S., SONDEHEIMER, E.H. 1974. Green's functions for solid state physicists (Benjamin/Cummings, Don Mills).
- DOS SANTOS, R.R. 1992. Phys. Rev. B 46, 5496.
- DOS SANTOS, R.R. 1989. Phys. Rev. B 39, 7259.
- FRADKIN, E. 1991. Field theories of condensed matter systems (Addison-Wesley, Don Mills).
- FURUKAWA, N., MASATOSHI, I. 1992. Jour. of The Phys. Soc. of Japan 61, 3331.
- HIRSCH, J.E. 1985. Phys. Rev. B 31, 4403.
- HIRSCH, J.E. 1983. Phys. Rev. B 28, 4059.

- HUBBARD, J. 1963. Proc. Roy. Soc. London A 276, 238.
- HYBERTSEN, M.S., STECHEL, E.B., FOULKES, W.M.C., SCHLÜTER, M. 1992. Phys. Rev. B 45, 10032.
- HYBERTSEN, M.S., STECHEL, E.B., SCHLÜTER, M., JENISON, D.R. 1990. Phys. Rev. B 41, 11068.
- KALOS, M.H., WHITLOCK, P.A. 1986. Monte Carlo Methods (Wiley, New York).
- KEIMER, B., BELK, N., BIRGENEAU, R.J., CASSANHO, A., CHEN, C.Y., GREVEN, M., KASTNER, M.A., AHARONY, A., ENDOH, Y., ERWIN, R.W., SHIRANE, G. 1992. Phys. Rev. B 46, 14034.
- KRESIN, Z.V. WOLF, S.A. 1990. Fundamentals of superconductivity (Plenum Press, New York).
- LIN, H.Q., HIRSCH, J.E., SCALAPINO, D.J. 1988. Phys. Rev. B 37, 7359.
- LIN, H.Q., HIRSCH, J.E. 1987. Phys. Rev. B 35, 3359.
- LOH, E.Y., GUBERNATIS, J.E. 1992. Stable numerical simulations of models of interacting electrons in condensed-matter physics, dans Electron Phase Transitions, Éd. W. Hauke, Y.V. Kopaev (Elsevier, Amsterdam), pp. 177-235.
- LOH, E.Y. Jr., GUBERNATIS, J.E., SCALETTAR, R.T., WHITE, S.R., SCALAPINO, D.J., SUGAR, R.L. 1990. Phys. Rev. B 41, 9301.
- LU, J.P., SI, Q., KIM, J.H., LEVIN, K. 1991. Physica C 179, 191.
- LU, J.P., SI, Q., KIM, J.H., LEVIN, K. 1990. Phys. Rev. Lett. 65, 2466.
- MAHAN, G.D. 1990. Many-particle physics, 2^e édition (Plenum press, Londres).
- MARTIN, P.A., ROTHEN, F. 1990. Problèmes à N-corps et champs quantiques (Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne).
- MOREO, A. 1993. Phys. Rev. B 48, 3380.
- MOREO, A., SCALAPINO, D.J. 1991. Phys. Rev. B 43, 8211.
- MOREO, A., SCALAPINO, D.J. 1991. Phys. Rev. Lett. 66, 946.
- MOREO, A., SCALAPINO, D.J., SUGAR, R.L., WHITE, S.R., BICKERS, N.E. 1990. Phys. Rev. B 41, 2313.

- NEGELE, J.W., ORLAND, H. 1988. Quantum Many-Particle Systems (Addison-Wesley, Don Mills)
- PINES, D., NOZIÈRES, P. 1966. Theory of quantum liquids (Benjamin, New York), vol. I.
- RICKAYZEN, G. 1980. Green's functions and condensed matter (Academic Press, New York).
- SI, Q., LU, J.P., LEVIN, K. 1992. Phys. Rev. B 45, 4930.
- SUZUKI, M. 1976. Comm. Math. Phys. 51, 183.
- TAMASAKU, K., NAKAMURA, Y., UCHIDA, S. 1992. Phys. Rev. Let. 69, 1455.
- TORRANCE, J.B., BEZINGE, A., NAZZAL, A.I., HUANG, T.C., PARKIN, S.S.P., KEANE, D.T., LAPLACA, S.J., HORN, P.M., HELD, G.A. 1989. Phys. Rev. B 40, 8872.
- TREMBLAY, A.M.-S. 1994. Méthode Monte Carlo pour les électrons sur réseau, dans Simulations numériques en physique, notes de cours de l'école d'été du CRPS, 7-9 juin 1993. Éd. L. Lewis, J. Lopez, G. Slater, A.-M.S. Tremblay. (Université de Sherbrooke, Sherbrooke), pp. 530-582.
- TREMBLAY, A.M.-S., BOILY, C., CHEN, L., NÉLISSE, H., REID, A. 1990. Monte Carlo method for strongly interacting electrons, dans Symposium de Superinformatique, 4-6 juin 1990, Éd. Dominique Pelletier (École Polytechnique de Montréal, Montréal), pp. 197-210.
- TROTTER, H.F. 1959. Proc. Am. Math. Soc. 10, 545.
- VEILLEUX, A.F., DARÉ, A.-M., CHEN, L., VILK, Y.M., TREMBLAY, A.-M.S. 1994. Quantum Monte Carlo simulations for a model of high-temperature superconductors: effect of next-nearest-neighbor hopping, dans Proceedings of Supercomputing Symposium 1994, 6-8 juin 1994, Éd. Dr. John W. Ross (Université de Toronto, Toronto), pp. 78-85.
- VILK, Y.M., CHEN, L., TREMBLAY, A.-M.S. 1994. Phys. Rev. B Rapid Comm. 49, 13267.
- WHITE, S.R. 1992. Phys. Rev. B 46, 5679.
- WHITE, S.R., SCALAPINO, D.J., SUGAR, R.L., LOH, E.Y., GUBERNATIS, J.E., SCALETTAR, R.T. 1989. Phys. Rev. B 40, 506.